Full wwPDB NMR Structure Validation Report (i)

Jun 5, 2023 – 05:29 PM EDT

PDB ID	:	2M1W
BMRB ID	:	18882
Title	:	TICAM-2 TIR domain
Authors	:	Enokizono, Y.; Kumeta, H.; Funami, K.; Horiuchi, M.; Sarmiento, J.; Yamashita, K.; Standley, D.M.; Matsumoto, M.; Seya, T.; Inagaki, F.
Deposited on	:	2012-12-07

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

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

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

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

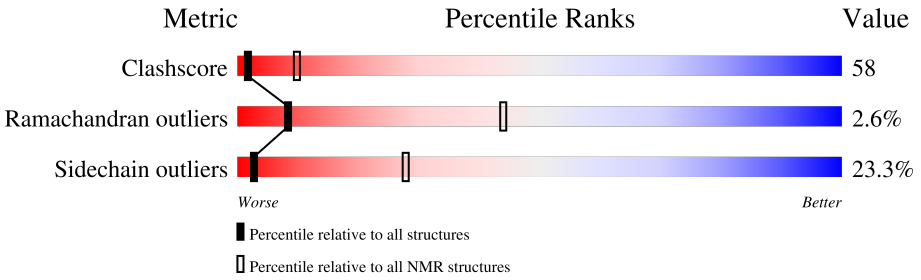
MolProbity	:	4.02b-467
Percentile statistics	:	20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
wwPDB-RCI	:	v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV	:	Wang et al. (2010)
wwPDB-ShiftChecker	:	v1.2
BMRB Restraints Analysis	:	v1.2
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal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

1 Overall quality at a glance (i)

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

The overall completeness of chemical shifts assignment is 89%.

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



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

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

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	166	21% 54% 9% 16%

2 Ensemble composition and analysis (i)

This entry contains 20 models. Model 2 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *lowest energy*.

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:77-A:116, A:125-A:224 (140)	0.69	2

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 3 clusters and 2 single-model clusters were found.

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

3 Entry composition (i)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2488 atoms, of which 1122 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called TIR domain-containing adapter molecule 2.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
			Total	C	H	N	O	S	
1	A	166	2488	867	1122	240	254	5	0

There are 6 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	70	GLY	-	expression tag	UNP Q86XR7
A	71	PRO	-	expression tag	UNP Q86XR7
A	72	LEU	-	expression tag	UNP Q86XR7
A	73	GLY	-	expression tag	UNP Q86XR7
A	74	SER	-	expression tag	UNP Q86XR7
A	117	HIS	CYS	engineered mutation	UNP Q86XR7

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: TIR domain-containing adapter molecule 2

Chain A: 21% 54% 9% 16%

G70 P71 L72 G73 S74 E75 E76 V77 F78 L79 K80 F81 V82 I83 L84 H85 A86 E87 D88 D89 T90 D91 E92 A93 L94 R95 V96 Q97 N98 L99 L100 Q101 D102 D103 F104 G105 I106 K107 P108 G109 I110 I111 F112 H117 G118 R119 Q120 H121 L122 Q123 N124 L125 D126 D127 A128 V129 S132 A133

W134 T135 I136 L137 L138 L139 T140 F143 L144 R145 D146 T147 W148 C149 N150 F151 Y154 L157 M158 N159 S160 V161 N162 R163 Q164 H165 K166 Y167 N168 S169 V170 I171 P172 M173 R174 P175 L176 N177 N178 P179 L180 P181 R182 T185 P186 F187 A188 L189 Q190 T191 I192 N193 A194 L195 E196 E197

E198 F202 P203 T204 Q205 V206 I209 F210 Q211 E212 S213 V214 Y215 K216 T217 Q218 Q219 T220 I221 W222 K223 E224 T225 R226 N227 M228 V229 Q230 R231 Q232 F233 I234 A235

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: TIR domain-containing adapter molecule 2

Chain A: 24% 46% 14% 16%

G70 P71 L72 G73 S74 E75 E76 V77 F78 L79 K80 F81 V82 I83 L84 H85 A86 E87 D88 D89 T90 A93 L94 R95 V96 Q97 N98 L99 L100 Q101 D102 D103 F104 K107 P108 G109 I110 I111 M115 P116 H117 G118 R119 Q120 H121 L122 Q123 N124 L125 D126 D127 A128 V129 N130 G131 S132 A133

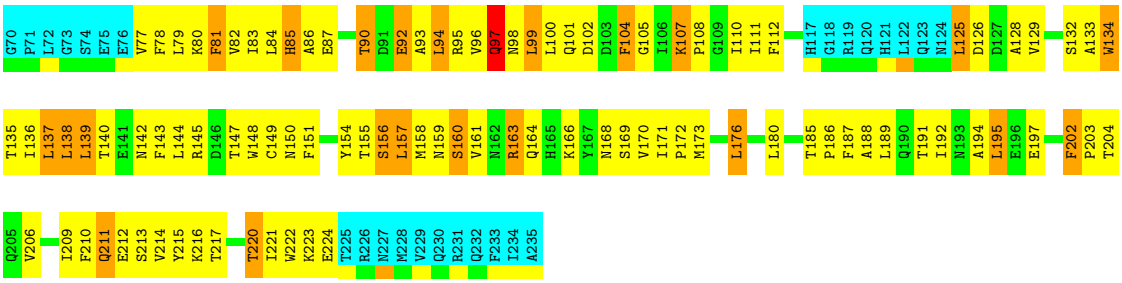
W134 T135 I136 L137 L138 L139 T140 E141 N142 F143 L144 R145 D146 T147 W148 C149 N150 F151 Q152 F153 Y154 T155 S156 L157 M158 N159 S160 V161 N162 R163 Q164 H165 K166 Y167 N168 S169 V170 I171 P172 M173 R174 P175 L176 N177 N178 P179 L180 P181 R182 P186 F187 A188 L189 Q190 T191 I192 N193 A194 L195

E196 E197 E198 F202 P203 T204 Q205 V206 I209 F210 Q211 E212 S213 V214 Y215 K216 T217 Q218 Q219 T220 I221 W222 K223 E224 T225 R226 N227 M228 V229 Q230 R231 Q232 F233 I234 A235

4.2.2 Score per residue for model 2 (medoid)

- Molecule 1: TIR domain-containing adapter molecule 2

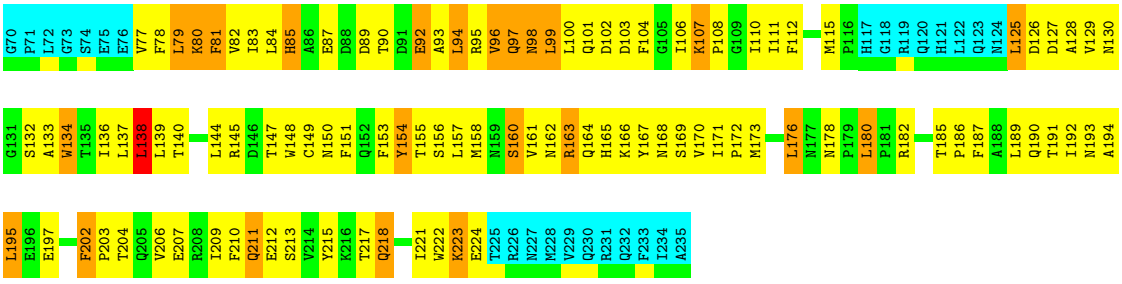
Chain A: 25% 46% 13% • 16%



4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: TIR domain-containing adapter molecule 2

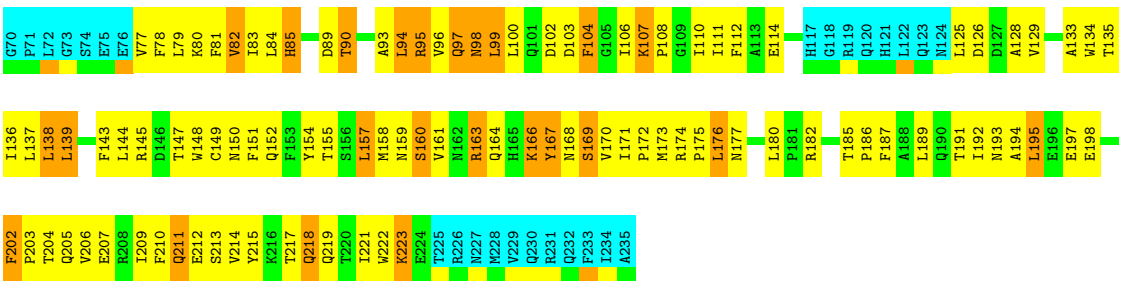
Chain A: 21% 49% 14% • 16%



4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: TIR domain-containing adapter molecule 2

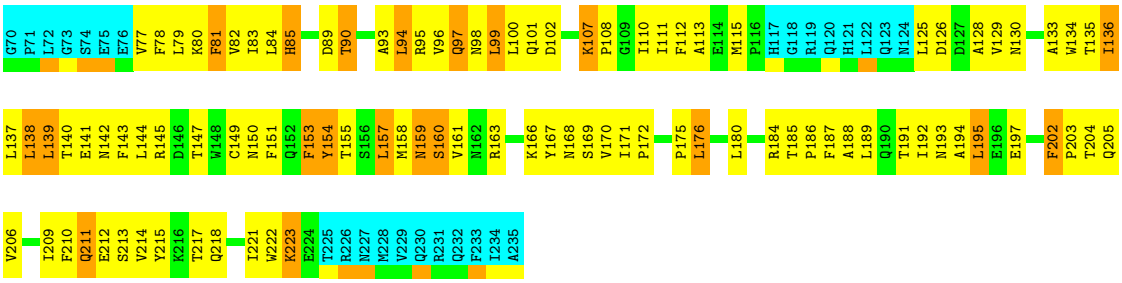
Chain A: 23% 47% 14% 16%



4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: TIR domain-containing adapter molecule 2

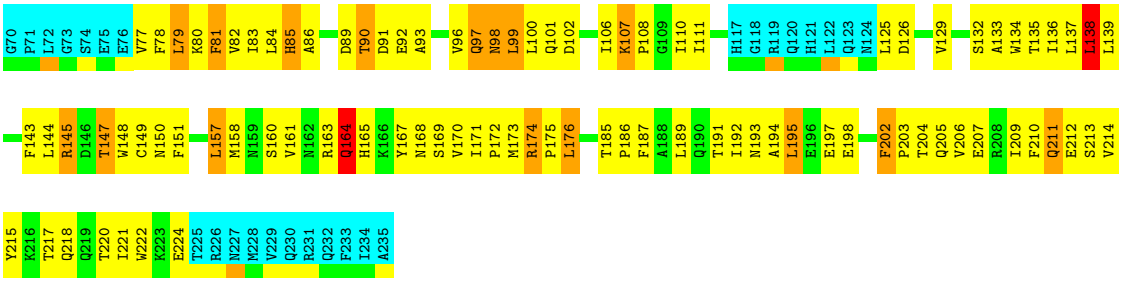
Chain A: 25% 47% 12% 16%



4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: TIR domain-containing adapter molecule 2

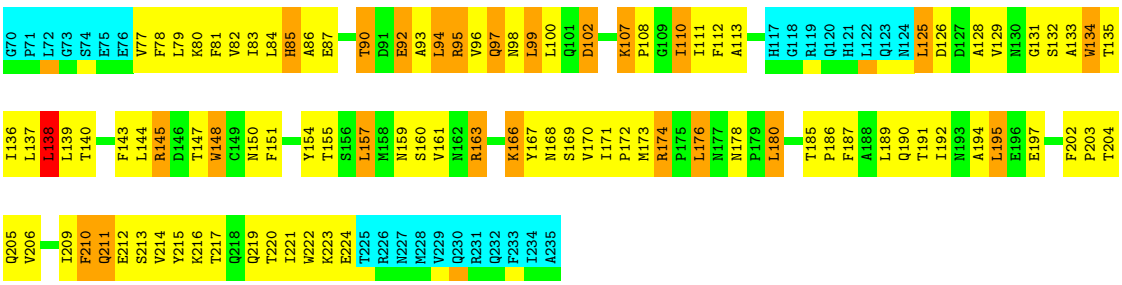
Chain A: 28% 45% 10% • 16%



4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: TIR domain-containing adapter molecule 2

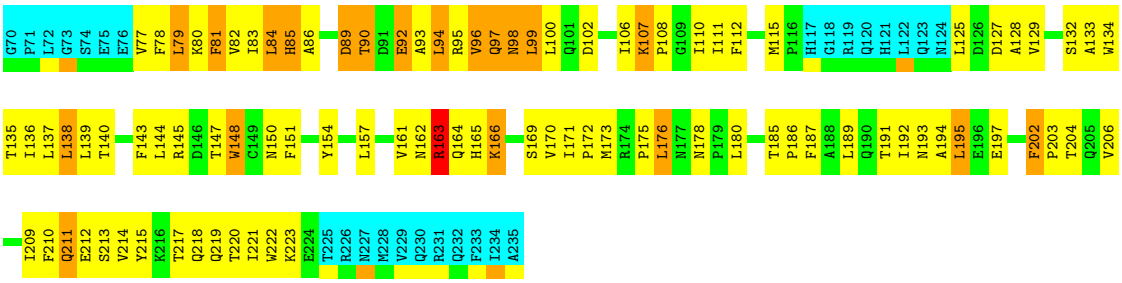
Chain A: 25% 45% 14% • 16%



4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: TIR domain-containing adapter molecule 2

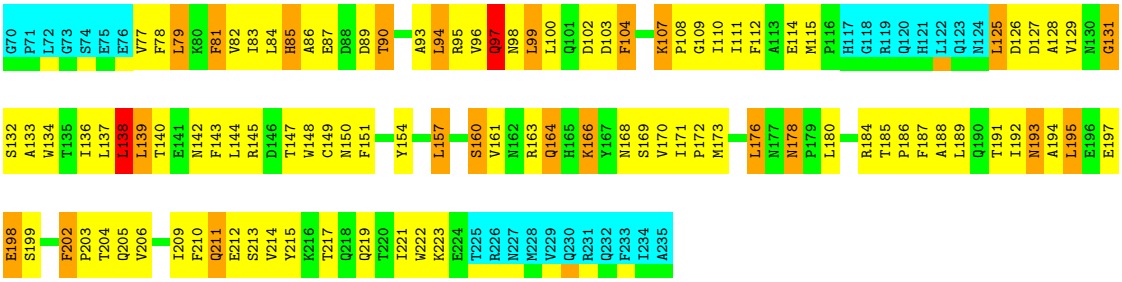
Chain A: 28% 44% 12% • 16%



4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: TIR domain-containing adapter molecule 2

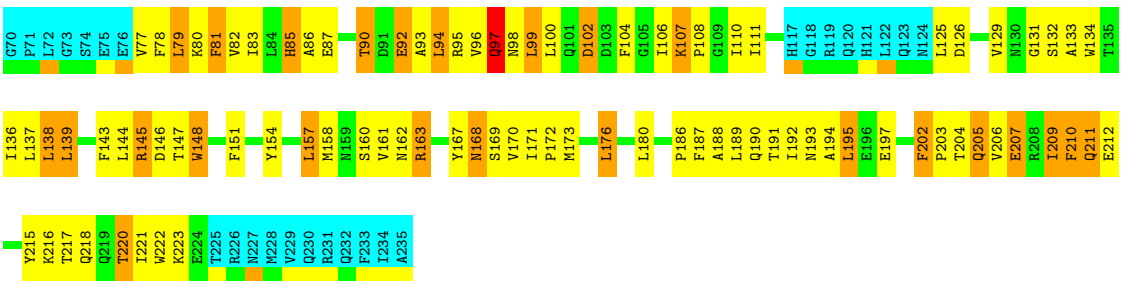
Chain A: 23% 46% 13% • 16%



4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: TIR domain-containing adapter molecule 2

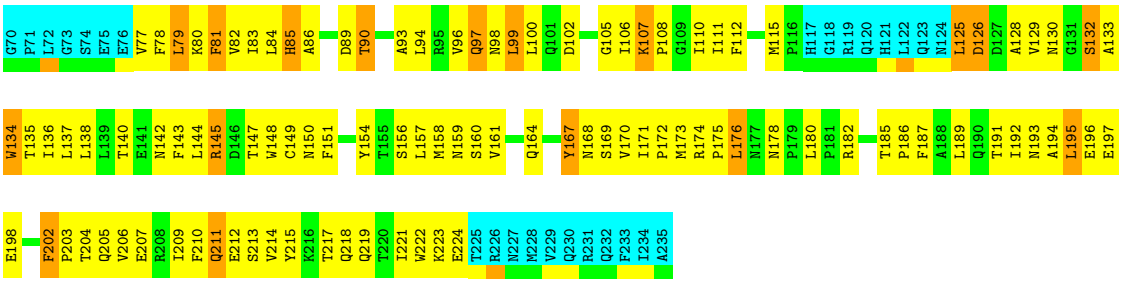
Chain A: 30% 39% 15% • 16%



4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: TIR domain-containing adapter molecule 2

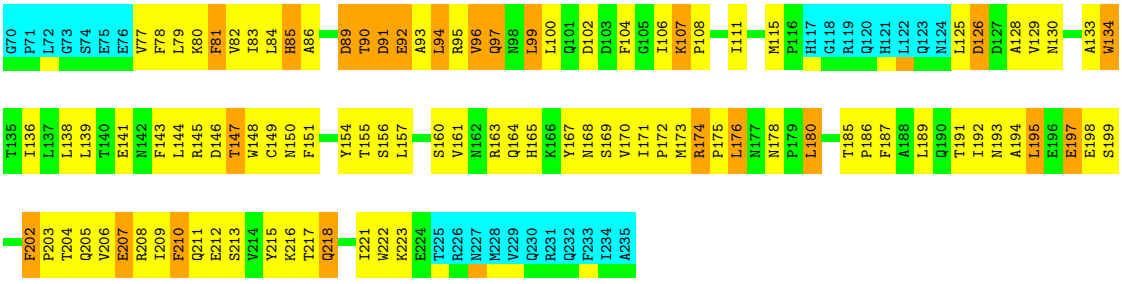
Chain A: 22% 52% 10% 16%



4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: TIR domain-containing adapter molecule 2

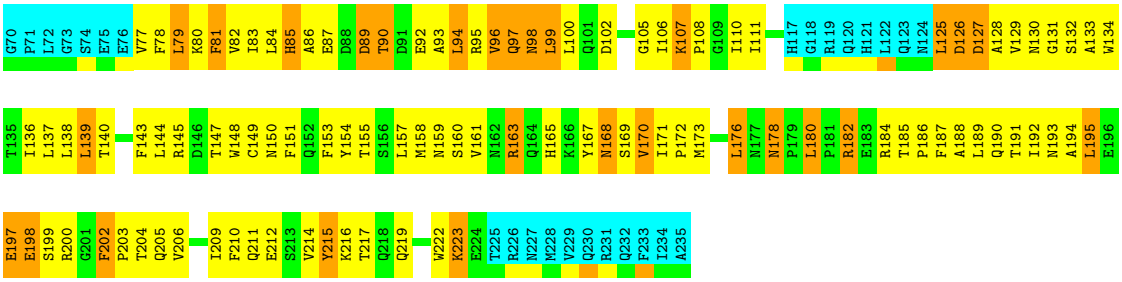
Chain A: 24% 46% 14% 16%



4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: TIR domain-containing adapter molecule 2

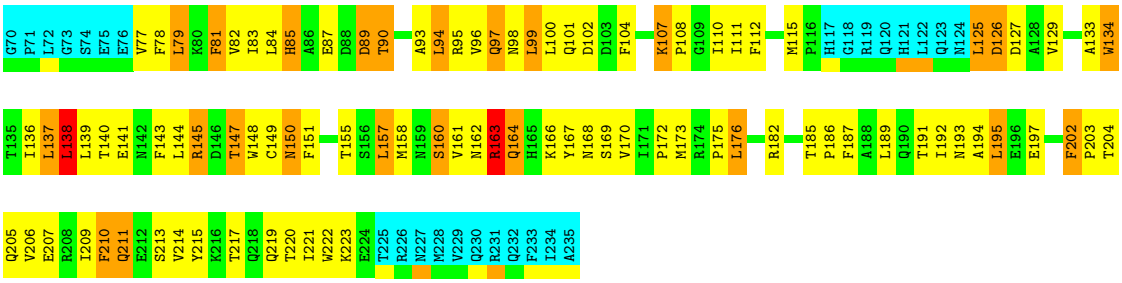
Chain A: 21% 46% 17% 16%



4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: TIR domain-containing adapter molecule 2

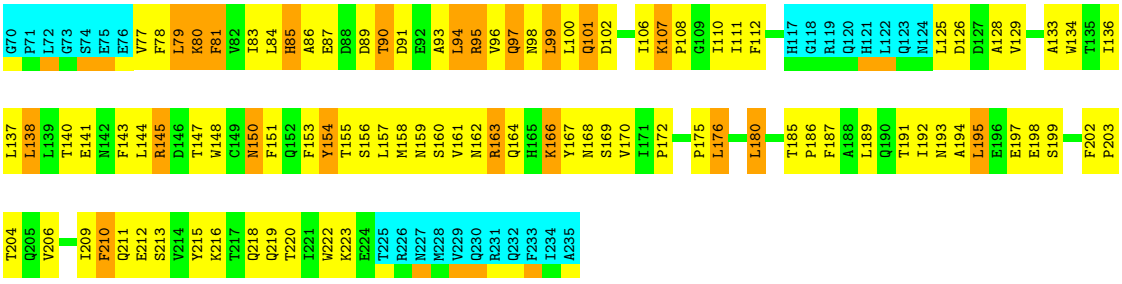
Chain A: 28% 41% 14% • 16%



4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: TIR domain-containing adapter molecule 2

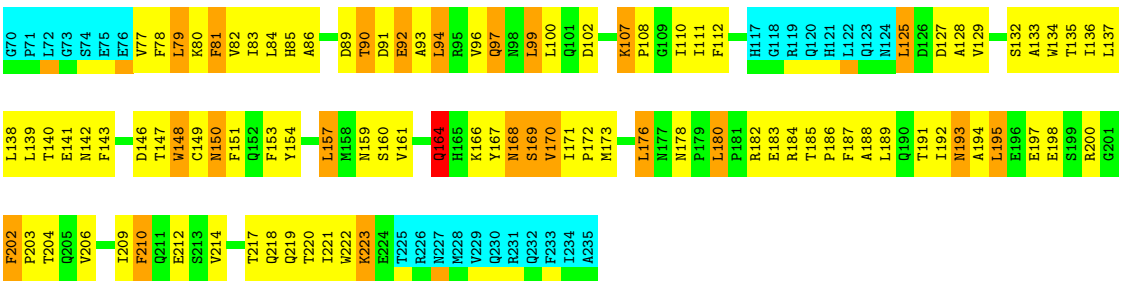
Chain A: 27% 45% 13% 16%



4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: TIR domain-containing adapter molecule 2

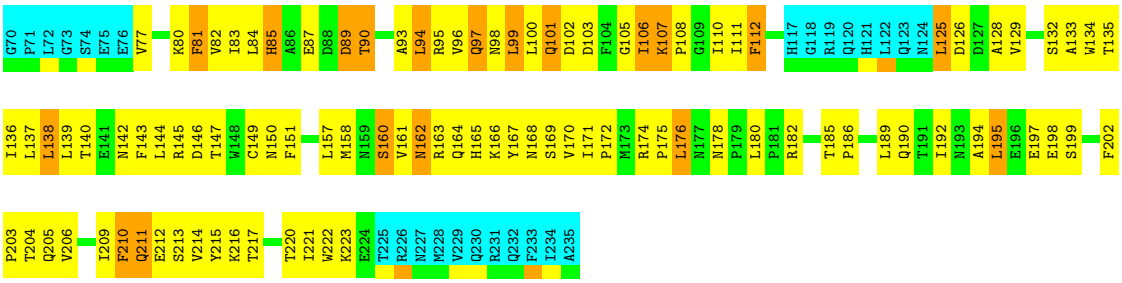
Chain A: 26% 45% 13% • 16%



4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: TIR domain-containing adapter molecule 2

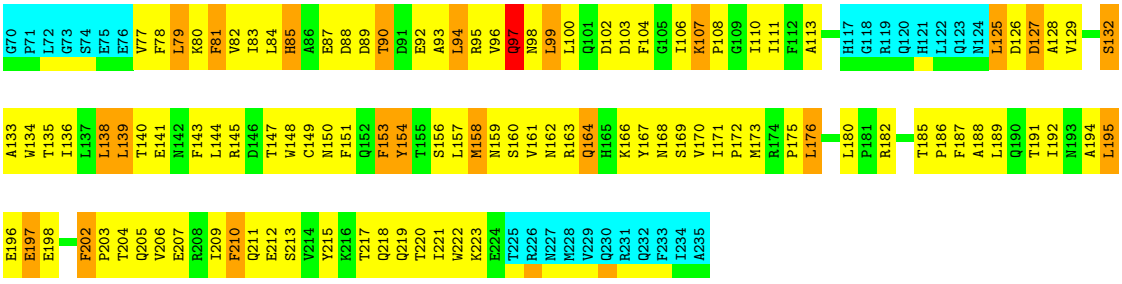
Chain A: 25% 48% 11% 16%



4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: TIR domain-containing adapter molecule 2

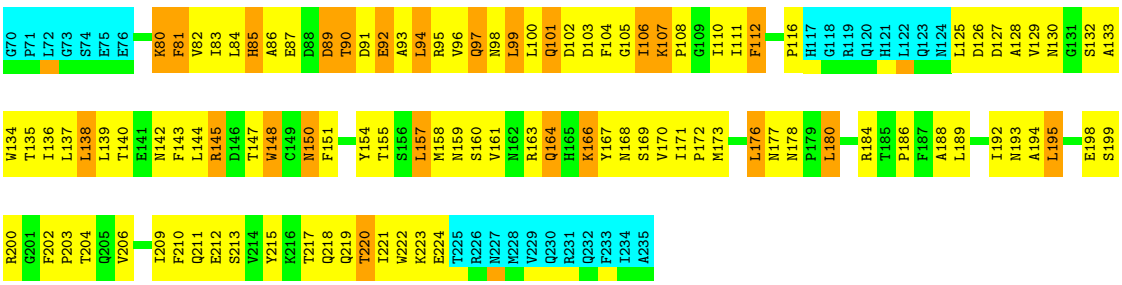
Chain A: 20% 51% 13% • 16%



4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: TIR domain-containing adapter molecule 2

Chain A: 21% 49% 14% 16%



4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: TIR domain-containing adapter molecule 2

Chain A: 26% 43% 15% 16%

G70 P71 L72 G73 S74 E75 E76 V77 F78 L79 K80 F81 V82 I83 L84 H85 A86 D89 T90 D91 E92 A93 L94 R95 V96 Q97 N98 L99 L100 Q101 D102 D103 F104 G105 I106 K107 P108 G109 I110 I111 F112 H117 G118 R119 Q120 H121 L122 Q123 N124 L125 D126 D127 A128 V129 N130 A133 W134

T135 I136 L137 L138 L139 T140 F143 L144 R145 D146 T147 W148 C149 N150 F151 Q152 F153 Y154 L157 M158 N159 S160 V161 N162 R163 Q164 H165 K166 Y167 N168 S169 V170 I171 P172 P175 L176 N177 N178 P179 L180 T185 P186 L189 Q190 T191 I192 N193 A194 L195 E196 E197 F202 P203 T204

Q205 V206 E207 R208 I209 F210 Q211 E212 S213 V214 Y215 K216 T217 Q218 Q219 T220 I221 W222 K223 E224 T225 R226 N227 M228 V229 Q230 R231 Q232 F233 I234 A235

5 Refinement protocol and experimental data overview (i)

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

Of the 100 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *target function.*

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

Software name	**Classification**	**Version**
Sparky	refinement	3.113
CYANA	structure solution	2.1
CYANA	geometry optimization	2.1
CYANA	refinement	2.1

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	2058
Number of shifts mapped to atoms	1853
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	205
Number of shifts with mapping warnings	0
Assignment completeness (well-defined parts)	89%

6 Model quality (i)

6.1 Standard geometry (i)

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

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

6.2 Too-close contacts (i)

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	1156	956	1131	133±11
All	All	23120	19120	22620	2668

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 58.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:112:PHE:CE1	1:A:128:ALA:HB2	1.12	1.79	20	8
1:A:81:PHE:CZ	1:A:83:ILE:HD11	1.12	1.79	20	18
1:A:82:VAL:HG11	1:A:128:ALA:HB1	1.08	1.22	4	3
1:A:167:TYR:CD1	1:A:221:ILE:HG22	1.05	1.85	10	1
1:A:80:LYS:HZ3	1:A:106:ILE:HG22	1.04	0.87	15	1
1:A:93:ALA:HB2	1:A:138:LEU:HD21	1.02	1.25	15	13
1:A:125:LEU:HD11	1:A:157:LEU:HD11	1.02	1.24	8	1
1:A:217:THR:HG22	1:A:221:ILE:HD11	1.00	1.29	19	17
1:A:84:LEU:HD11	1:A:128:ALA:HB1	1.00	1.31	15	4
1:A:151:PHE:CE1	1:A:157:LEU:HD12	0.99	1.92	17	9
1:A:80:LYS:NZ	1:A:106:ILE:HG22	0.98	1.72	15	1
1:A:151:PHE:CZ	1:A:157:LEU:HD12	0.95	1.96	1	8
1:A:93:ALA:HB2	1:A:138:LEU:CD2	0.94	1.92	9	16
1:A:104:PHE:CE2	1:A:206:VAL:HG11	0.94	1.97	1	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:83:ILE:CG2	1:A:93:ALA:HB1	0.92	1.94	20	12
1:A:143:PHE:CE1	1:A:147:THR:HG21	0.92	1.99	4	6
1:A:82:VAL:CG1	1:A:135:THR:HG22	0.92	1.94	2	7
1:A:176:LEU:HD21	1:A:197:GLU:CG	0.91	1.96	4	9
1:A:84:LEU:HD11	1:A:128:ALA:HB3	0.90	1.44	3	9
1:A:170:VAL:O	1:A:171:ILE:HD12	0.90	1.67	5	13
1:A:151:PHE:CZ	1:A:157:LEU:HD22	0.89	2.00	13	2
1:A:136:ILE:O	1:A:137:LEU:HD23	0.89	1.67	19	5
1:A:143:PHE:CE2	1:A:147:THR:HG21	0.88	2.03	5	5
1:A:82:VAL:HG12	1:A:135:THR:HG22	0.88	1.46	8	7
1:A:217:THR:HG22	1:A:221:ILE:CD1	0.87	1.98	19	15
1:A:93:ALA:HB2	1:A:138:LEU:HD22	0.87	1.45	9	10
1:A:111:ILE:HD12	1:A:113:ALA:HB3	0.87	1.43	7	3
1:A:80:LYS:NZ	1:A:106:ILE:HG23	0.86	1.86	4	4
1:A:94:LEU:HD22	1:A:94:LEU:O	0.86	1.71	9	15
1:A:172:PRO:O	1:A:194:ALA:HB1	0.85	1.71	14	20
1:A:160:SER:OG	1:A:170:VAL:HG21	0.84	1.71	18	2
1:A:176:LEU:HD21	1:A:197:GLU:HG2	0.84	1.49	20	6
1:A:125:LEU:HD11	1:A:157:LEU:CD1	0.84	2.00	8	1
1:A:80:LYS:HZ3	1:A:106:ILE:CG2	0.83	1.81	15	1
1:A:176:LEU:HD21	1:A:197:GLU:HG3	0.83	1.51	5	11
1:A:104:PHE:CE1	1:A:206:VAL:HG11	0.82	2.09	4	2
1:A:82:VAL:HG11	1:A:128:ALA:CB	0.81	2.04	4	2
1:A:217:THR:CG2	1:A:221:ILE:HD11	0.81	2.06	19	10
1:A:158:MET:O	1:A:161:VAL:HG22	0.81	1.75	2	3
1:A:161:VAL:O	1:A:192:ILE:HD13	0.80	1.76	16	7
1:A:133:ALA:HB3	1:A:134:TRP:CE3	0.80	2.12	13	15
1:A:202:PHE:O	1:A:206:VAL:HG23	0.80	1.77	11	16
1:A:133:ALA:HB3	1:A:134:TRP:CZ3	0.79	2.11	13	13
1:A:176:LEU:HD21	1:A:197:GLU:CD	0.79	1.97	1	4
1:A:167:TYR:CE2	1:A:222:TRP:CD1	0.79	2.71	12	1
1:A:143:PHE:CZ	1:A:147:THR:HG21	0.78	2.13	5	4
1:A:84:LEU:HD21	1:A:128:ALA:CB	0.78	2.09	4	3
1:A:94:LEU:HB2	1:A:111:ILE:HD13	0.77	1.54	9	11
1:A:151:PHE:CE1	1:A:157:LEU:HD22	0.77	2.14	11	3
1:A:137:LEU:O	1:A:139:LEU:HD22	0.77	1.79	4	2
1:A:125:LEU:CD1	1:A:157:LEU:HD11	0.77	2.06	8	1
1:A:151:PHE:CD1	1:A:157:LEU:HD21	0.77	2.15	12	1
1:A:209:ILE:HG22	1:A:210:PHE:CE1	0.76	2.15	19	18
1:A:99:LEU:HD23	1:A:100:LEU:N	0.76	1.95	3	20
1:A:84:LEU:CD1	1:A:128:ALA:HB1	0.76	2.09	15	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:100:LEU:HD22	1:A:206:VAL:HG11	0.76	1.56	17	6
1:A:86:ALA:HB2	1:A:143:PHE:CD1	0.76	2.16	8	3
1:A:195:LEU:HD23	1:A:209:ILE:HD12	0.76	1.55	11	13
1:A:176:LEU:N	1:A:176:LEU:HD13	0.76	1.96	15	17
1:A:160:SER:HB3	1:A:170:VAL:HG21	0.75	1.58	2	2
1:A:82:VAL:HG13	1:A:135:THR:HG22	0.75	1.59	5	3
1:A:167:TYR:CE1	1:A:222:TRP:CD1	0.75	2.74	15	1
1:A:79:LEU:HD23	1:A:80:LYS:N	0.75	1.97	1	1
1:A:161:VAL:O	1:A:192:ILE:HD11	0.74	1.82	6	7
1:A:125:LEU:HD22	1:A:157:LEU:HD12	0.74	1.59	2	1
1:A:85:HIS:NE2	1:A:111:ILE:HD12	0.74	1.97	20	12
1:A:139:LEU:HD11	1:A:189:LEU:HD13	0.74	1.60	5	4
1:A:218:GLN:HA	1:A:221:ILE:HD12	0.74	1.57	11	8
1:A:176:LEU:HD21	1:A:197:GLU:OE2	0.74	1.83	18	2
1:A:186:PRO:CG	1:A:189:LEU:HD12	0.73	2.14	18	20
1:A:135:THR:HG23	1:A:169:SER:O	0.73	1.82	16	1
1:A:83:ILE:HG21	1:A:93:ALA:HB1	0.73	1.58	20	3
1:A:189:LEU:HA	1:A:192:ILE:HD12	0.73	1.60	10	2
1:A:161:VAL:CG1	1:A:188:ALA:HB1	0.73	2.14	10	2
1:A:144:LEU:HD13	1:A:145:ARG:N	0.72	1.99	15	7
1:A:209:ILE:HG22	1:A:210:PHE:CD1	0.72	2.19	3	19
1:A:176:LEU:HD22	1:A:198:GLU:HB3	0.72	1.60	9	2
1:A:176:LEU:HD11	1:A:197:GLU:CG	0.72	2.15	6	3
1:A:84:LEU:HD11	1:A:128:ALA:CB	0.72	2.15	2	6
1:A:136:ILE:C	1:A:137:LEU:HD23	0.71	2.05	19	3
1:A:136:ILE:O	1:A:137:LEU:HD13	0.71	1.86	14	2
1:A:100:LEU:HD22	1:A:206:VAL:HG21	0.71	1.62	12	4
1:A:96:VAL:HG21	1:A:173:MET:HE1	0.71	1.62	18	10
1:A:99:LEU:HD23	1:A:99:LEU:C	0.71	2.06	1	20
1:A:85:HIS:CD2	1:A:93:ALA:HB3	0.71	2.21	4	11
1:A:84:LEU:HD23	1:A:112:PHE:CD1	0.71	2.20	4	2
1:A:171:ILE:HG12	1:A:209:ILE:HG21	0.71	1.61	10	1
1:A:80:LYS:O	1:A:133:ALA:HB3	0.71	1.86	4	6
1:A:160:SER:O	1:A:170:VAL:HG21	0.71	1.86	1	1
1:A:84:LEU:CD1	1:A:128:ALA:HB3	0.71	2.15	3	4
1:A:94:LEU:HD22	1:A:94:LEU:C	0.70	2.06	9	14
1:A:139:LEU:HD21	1:A:185:THR:HG23	0.70	1.61	6	3
1:A:202:PHE:N	1:A:203:PRO:CD	0.70	2.54	15	20
1:A:81:PHE:CE1	1:A:83:ILE:HD11	0.70	2.22	15	13
1:A:82:VAL:CG1	1:A:128:ALA:HB1	0.70	2.09	4	2
1:A:172:PRO:HG3	1:A:189:LEU:HD22	0.70	1.62	3	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:83:ILE:HG23	1:A:136:ILE:HB	0.70	1.62	10	12
1:A:170:VAL:C	1:A:171:ILE:HD12	0.70	2.07	8	13
1:A:125:LEU:HD21	1:A:150:ASN:ND2	0.69	2.02	16	3
1:A:151:PHE:CE1	1:A:157:LEU:CD1	0.69	2.75	17	8
1:A:125:LEU:O	1:A:128:ALA:HB3	0.69	1.87	2	2
1:A:125:LEU:HD21	1:A:150:ASN:HD21	0.69	1.46	16	1
1:A:176:LEU:HD11	1:A:197:GLU:HG3	0.69	1.65	11	4
1:A:144:LEU:C	1:A:144:LEU:HD13	0.69	2.08	3	14
1:A:140:THR:HG23	1:A:178:ASN:OD1	0.68	1.88	19	6
1:A:84:LEU:HD21	1:A:128:ALA:HB2	0.68	1.65	4	2
1:A:100:LEU:HD21	1:A:202:PHE:CZ	0.68	2.22	17	3
1:A:151:PHE:CD1	1:A:157:LEU:HD13	0.68	2.22	8	1
1:A:176:LEU:HD22	1:A:198:GLU:CB	0.68	2.18	13	2
1:A:136:ILE:C	1:A:137:LEU:HD22	0.68	2.08	2	1
1:A:80:LYS:HZ3	1:A:106:ILE:HA	0.68	1.48	6	4
1:A:125:LEU:HD12	1:A:126:ASP:N	0.68	2.04	17	5
1:A:89:ASP:HB2	1:A:138:LEU:HD23	0.68	1.65	20	3
1:A:133:ALA:CB	1:A:134:TRP:CZ3	0.68	2.77	13	12
1:A:80:LYS:HZ3	1:A:106:ILE:HG23	0.68	1.48	4	2
1:A:129:VAL:O	1:A:129:VAL:HG12	0.67	1.89	10	15
1:A:125:LEU:HD11	1:A:157:LEU:CD2	0.67	2.20	18	2
1:A:151:PHE:CE2	1:A:157:LEU:HD12	0.67	2.24	10	2
1:A:125:LEU:HD22	1:A:150:ASN:ND2	0.67	2.04	14	2
1:A:81:PHE:CE2	1:A:83:ILE:HD11	0.67	2.23	19	3
1:A:157:LEU:O	1:A:161:VAL:HG23	0.67	1.90	16	2
1:A:93:ALA:CB	1:A:138:LEU:HD21	0.67	2.14	15	3
1:A:157:LEU:HD13	1:A:157:LEU:O	0.66	1.89	17	2
1:A:188:ALA:O	1:A:192:ILE:HD12	0.66	1.90	18	8
1:A:80:LYS:HD3	1:A:106:ILE:HG22	0.66	1.68	10	3
1:A:167:TYR:CZ	1:A:222:TRP:CD1	0.66	2.82	12	2
1:A:137:LEU:HD22	1:A:137:LEU:N	0.66	2.06	2	1
1:A:151:PHE:CZ	1:A:157:LEU:CD1	0.66	2.78	5	4
1:A:151:PHE:CZ	1:A:157:LEU:HD11	0.65	2.25	12	1
1:A:151:PHE:CE2	1:A:161:VAL:CG2	0.65	2.80	8	1
1:A:151:PHE:CE1	1:A:157:LEU:HD11	0.65	2.26	12	1
1:A:161:VAL:HG13	1:A:192:ILE:HD11	0.65	1.69	12	1
1:A:151:PHE:CE2	1:A:157:LEU:CD1	0.65	2.79	10	1
1:A:176:LEU:HD22	1:A:198:GLU:CG	0.65	2.22	13	1
1:A:94:LEU:HD13	1:A:95:ARG:N	0.65	2.07	1	13
1:A:143:PHE:O	1:A:147:THR:HG23	0.65	1.92	16	3
1:A:195:LEU:HD23	1:A:209:ILE:CD1	0.64	2.22	1	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:137:LEU:HD11	1:A:170:VAL:CG1	0.64	2.22	11	5
1:A:161:VAL:HG12	1:A:192:ILE:HD13	0.64	1.70	9	2
1:A:175:PRO:C	1:A:176:LEU:HD13	0.64	2.13	20	11
1:A:209:ILE:CG2	1:A:210:PHE:CE1	0.64	2.80	8	19
1:A:176:LEU:HD11	1:A:197:GLU:HB3	0.64	1.70	20	4
1:A:129:VAL:HG21	1:A:157:LEU:HD11	0.64	1.70	19	1
1:A:143:PHE:CE2	1:A:147:THR:CG2	0.64	2.80	8	2
1:A:136:ILE:O	1:A:137:LEU:HD22	0.64	1.93	9	2
1:A:82:VAL:HG11	1:A:128:ALA:O	0.63	1.93	2	4
1:A:97:GLN:HG2	1:A:111:ILE:HG23	0.63	1.69	3	5
1:A:80:LYS:NZ	1:A:107:LYS:H	0.63	1.89	20	2
1:A:125:LEU:HD11	1:A:150:ASN:HB3	0.63	1.69	12	1
1:A:163:ARG:NE	1:A:192:ILE:HG23	0.63	2.09	2	2
1:A:176:LEU:CD1	1:A:176:LEU:N	0.63	2.61	8	7
1:A:143:PHE:CE1	1:A:147:THR:CG2	0.63	2.82	9	2
1:A:133:ALA:CB	1:A:134:TRP:CE3	0.62	2.82	14	12
1:A:176:LEU:HD11	1:A:197:GLU:HG2	0.62	1.71	5	4
1:A:83:ILE:HG22	1:A:93:ALA:HB1	0.62	1.71	4	4
1:A:161:VAL:HG12	1:A:188:ALA:HB1	0.62	1.70	10	1
1:A:125:LEU:HD13	1:A:154:TYR:OH	0.62	1.93	13	1
1:A:151:PHE:CD2	1:A:161:VAL:CG2	0.62	2.82	8	1
1:A:83:ILE:HG13	1:A:136:ILE:HD13	0.62	1.71	6	1
1:A:85:HIS:CB	1:A:138:LEU:HD22	0.62	2.24	14	12
1:A:160:SER:HB2	1:A:170:VAL:HG21	0.62	1.70	20	7
1:A:148:TRP:CH2	1:A:186:PRO:CB	0.62	2.82	18	6
1:A:167:TYR:CD1	1:A:168:ASN:N	0.62	2.67	14	3
1:A:202:PHE:CD1	1:A:202:PHE:C	0.62	2.72	14	8
1:A:81:PHE:O	1:A:81:PHE:CD1	0.62	2.52	15	18
1:A:79:LEU:HD11	1:A:110:ILE:HG22	0.62	1.70	3	7
1:A:129:VAL:HG21	1:A:157:LEU:HD21	0.62	1.70	5	2
1:A:144:LEU:HD13	1:A:144:LEU:C	0.61	2.15	10	3
1:A:163:ARG:CZ	1:A:192:ILE:HG23	0.61	2.25	2	3
1:A:143:PHE:CZ	1:A:147:THR:CG2	0.61	2.83	5	2
1:A:147:THR:HG23	1:A:151:PHE:CZ	0.61	2.31	12	2
1:A:89:ASP:CB	1:A:138:LEU:HD23	0.61	2.26	6	1
1:A:77:VAL:O	1:A:222:TRP:CZ2	0.61	2.54	11	1
1:A:85:HIS:CE1	1:A:90:THR:OG1	0.61	2.53	8	11
1:A:136:ILE:C	1:A:137:LEU:HD12	0.61	2.15	6	1
1:A:84:LEU:HD21	1:A:112:PHE:CZ	0.61	2.30	19	2
1:A:100:LEU:CD2	1:A:206:VAL:HG21	0.61	2.26	14	4
1:A:166:LYS:O	1:A:167:TYR:CD1	0.60	2.54	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:138:LEU:O	1:A:143:PHE:CD2	0.60	2.55	8	4
1:A:197:GLU:OE2	1:A:202:PHE:CD1	0.60	2.54	16	2
1:A:147:THR:O	1:A:151:PHE:CD1	0.60	2.55	10	2
1:A:85:HIS:HD2	1:A:93:ALA:HB3	0.60	1.53	4	10
1:A:150:ASN:O	1:A:154:TYR:CD2	0.60	2.55	18	2
1:A:104:PHE:CE2	1:A:206:VAL:CG1	0.60	2.81	1	2
1:A:138:LEU:O	1:A:143:PHE:CD1	0.60	2.55	20	7
1:A:161:VAL:HG12	1:A:192:ILE:CD1	0.60	2.26	9	3
1:A:77:VAL:O	1:A:222:TRP:CH2	0.60	2.54	11	18
1:A:89:ASP:HB3	1:A:138:LEU:HD23	0.60	1.73	6	1
1:A:151:PHE:CD2	1:A:161:VAL:HG21	0.60	2.32	8	1
1:A:161:VAL:HG13	1:A:189:LEU:HD23	0.60	1.74	13	2
1:A:133:ALA:O	1:A:134:TRP:CD1	0.60	2.54	16	8
1:A:94:LEU:HD23	1:A:94:LEU:O	0.60	1.95	20	2
1:A:151:PHE:CE1	1:A:157:LEU:HD13	0.60	2.30	2	2
1:A:137:LEU:CD1	1:A:170:VAL:CG1	0.60	2.80	7	2
1:A:164:GLN:H	1:A:164:GLN:NE2	0.60	1.95	18	1
1:A:153:PHE:C	1:A:153:PHE:CD1	0.59	2.75	5	1
1:A:167:TYR:CE2	1:A:168:ASN:OD1	0.59	2.55	1	3
1:A:140:THR:HG23	1:A:178:ASN:ND2	0.59	2.12	11	2
1:A:89:ASP:CB	1:A:138:LEU:HD12	0.59	2.28	8	2
1:A:176:LEU:HD13	1:A:176:LEU:N	0.59	2.12	1	1
1:A:96:VAL:HG21	1:A:173:MET:CE	0.59	2.27	11	7
1:A:125:LEU:HB2	1:A:157:LEU:HD11	0.59	1.72	11	1
1:A:125:LEU:HD21	1:A:150:ASN:CB	0.59	2.26	12	1
1:A:140:THR:HG23	1:A:178:ASN:CG	0.59	2.17	7	3
1:A:129:VAL:HA	1:A:135:THR:HG21	0.59	1.74	18	2
1:A:163:ARG:NE	1:A:192:ILE:HD13	0.59	2.13	20	1
1:A:167:TYR:CZ	1:A:222:TRP:CG	0.59	2.91	12	1
1:A:167:TYR:CE1	1:A:168:ASN:OD1	0.59	2.56	14	2
1:A:82:VAL:HG11	1:A:128:ALA:HA	0.58	1.75	1	2
1:A:125:LEU:HD22	1:A:157:LEU:CD1	0.58	2.27	2	1
1:A:96:VAL:HG12	1:A:97:GLN:N	0.58	2.13	3	7
1:A:125:LEU:HD11	1:A:157:LEU:HD21	0.58	1.76	8	2
1:A:144:LEU:CD1	1:A:145:ARG:CZ	0.58	2.81	20	1
1:A:82:VAL:HG21	1:A:115:MET:CE	0.58	2.28	12	2
1:A:137:LEU:HD11	1:A:170:VAL:HG13	0.58	1.75	10	4
1:A:163:ARG:HE	1:A:192:ILE:HD13	0.58	1.59	20	1
1:A:83:ILE:HG23	1:A:136:ILE:CB	0.58	2.28	18	9
1:A:85:HIS:CE1	1:A:113:ALA:HB2	0.58	2.34	7	2
1:A:197:GLU:OE1	1:A:202:PHE:CE1	0.58	2.57	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:125:LEU:CD1	1:A:157:LEU:HD21	0.58	2.28	8	2
1:A:84:LEU:CD2	1:A:112:PHE:CZ	0.58	2.87	19	2
1:A:187:PHE:O	1:A:191:THR:HG23	0.58	1.99	1	4
1:A:99:LEU:HD21	1:A:202:PHE:HZ	0.58	1.59	6	6
1:A:158:MET:HE2	1:A:161:VAL:HG21	0.58	1.74	17	3
1:A:136:ILE:C	1:A:137:LEU:HD13	0.58	2.19	14	1
1:A:170:VAL:O	1:A:171:ILE:HD13	0.57	1.99	18	3
1:A:203:PRO:HA	1:A:206:VAL:CG1	0.57	2.29	18	4
1:A:180:LEU:HD21	1:A:184:ARG:CB	0.57	2.29	5	1
1:A:160:SER:CB	1:A:170:VAL:HG21	0.57	2.29	20	6
1:A:89:ASP:HB2	1:A:138:LEU:HD12	0.57	1.75	15	2
1:A:180:LEU:HD12	1:A:185:THR:OG1	0.57	2.00	7	3
1:A:137:LEU:HD12	1:A:137:LEU:N	0.57	2.15	6	1
1:A:82:VAL:HG11	1:A:128:ALA:CA	0.57	2.30	1	2
1:A:167:TYR:CD2	1:A:168:ASN:N	0.56	2.73	3	3
1:A:173:MET:CE	1:A:195:LEU:HD12	0.56	2.30	18	12
1:A:176:LEU:N	1:A:176:LEU:CD1	0.56	2.68	15	10
1:A:103:ASP:OD1	1:A:104:PHE:CE1	0.56	2.58	18	2
1:A:129:VAL:HG21	1:A:157:LEU:CD2	0.56	2.29	16	2
1:A:129:VAL:HG13	1:A:168:ASN:ND2	0.56	2.15	14	2
1:A:202:PHE:N	1:A:203:PRO:HD2	0.56	2.16	15	20
1:A:125:LEU:HD22	1:A:150:ASN:CG	0.56	2.19	9	1
1:A:104:PHE:CZ	1:A:206:VAL:HG11	0.56	2.35	4	5
1:A:167:TYR:CD1	1:A:221:ILE:CG2	0.56	2.78	10	1
1:A:133:ALA:O	1:A:134:TRP:CG	0.56	2.58	13	13
1:A:78:PHE:CG	1:A:78:PHE:O	0.56	2.58	14	1
1:A:151:PHE:CE2	1:A:157:LEU:HD11	0.56	2.35	12	1
1:A:160:SER:OG	1:A:170:VAL:HG11	0.56	2.00	16	1
1:A:82:VAL:HG12	1:A:135:THR:CG2	0.56	2.28	8	2
1:A:151:PHE:HE1	1:A:157:LEU:HD13	0.56	1.59	2	2
1:A:206:VAL:HG13	1:A:210:PHE:CD2	0.56	2.36	7	9
1:A:138:LEU:O	1:A:143:PHE:CG	0.55	2.59	1	7
1:A:147:THR:O	1:A:151:PHE:CG	0.55	2.60	8	5
1:A:144:LEU:HD12	1:A:145:ARG:NH1	0.55	2.16	20	1
1:A:134:TRP:CE2	1:A:209:ILE:O	0.55	2.60	20	6
1:A:125:LEU:HD21	1:A:150:ASN:HB3	0.55	1.77	12	1
1:A:186:PRO:HG2	1:A:189:LEU:HD12	0.55	1.78	13	17
1:A:99:LEU:O	1:A:103:ASP:CB	0.55	2.54	20	4
1:A:103:ASP:OD1	1:A:104:PHE:CE2	0.55	2.60	4	1
1:A:81:PHE:CZ	1:A:83:ILE:CD1	0.55	2.89	16	3
1:A:161:VAL:HG12	1:A:189:LEU:HD21	0.55	1.77	17	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:96:VAL:CG1	1:A:97:GLN:N	0.55	2.69	13	10
1:A:125:LEU:HD13	1:A:157:LEU:HG	0.55	1.78	1	1
1:A:125:LEU:HD12	1:A:125:LEU:C	0.55	2.22	17	3
1:A:94:LEU:C	1:A:94:LEU:HD13	0.55	2.22	10	2
1:A:78:PHE:O	1:A:78:PHE:CD2	0.54	2.60	12	4
1:A:193:ASN:OD1	1:A:209:ILE:HD11	0.54	2.02	9	1
1:A:202:PHE:O	1:A:206:VAL:CG2	0.54	2.56	15	16
1:A:206:VAL:O	1:A:210:PHE:CD2	0.54	2.60	12	10
1:A:84:LEU:HD21	1:A:128:ALA:HB3	0.54	1.78	5	1
1:A:197:GLU:OE1	1:A:202:PHE:CD1	0.54	2.59	7	2
1:A:161:VAL:CG1	1:A:192:ILE:CD1	0.54	2.85	11	1
1:A:84:LEU:HD21	1:A:112:PHE:CE1	0.54	2.37	19	2
1:A:167:TYR:HB3	1:A:221:ILE:HG22	0.54	1.77	16	1
1:A:148:TRP:CE3	1:A:151:PHE:CD2	0.54	2.95	1	1
1:A:148:TRP:CH2	1:A:186:PRO:HB3	0.54	2.38	18	3
1:A:197:GLU:OE1	1:A:202:PHE:CZ	0.54	2.61	7	1
1:A:146:ASP:O	1:A:149:CYS:CB	0.54	2.56	16	1
1:A:81:PHE:HE2	1:A:136:ILE:HD13	0.54	1.63	7	1
1:A:85:HIS:CD2	1:A:90:THR:HA	0.54	2.37	13	18
1:A:159:ASN:HD22	1:A:159:ASN:N	0.54	2.00	5	2
1:A:103:ASP:OD1	1:A:104:PHE:CZ	0.53	2.62	19	2
1:A:151:PHE:CE1	1:A:157:LEU:HD21	0.53	2.38	12	1
1:A:167:TYR:OH	1:A:222:TRP:CD1	0.53	2.61	15	1
1:A:96:VAL:HG13	1:A:97:GLN:N	0.53	2.18	17	6
1:A:176:LEU:HD22	1:A:198:GLU:HG3	0.53	1.79	13	1
1:A:101:GLN:HB2	1:A:107:LYS:CG	0.53	2.33	20	1
1:A:137:LEU:N	1:A:137:LEU:CD1	0.53	2.71	6	1
1:A:86:ALA:HB2	1:A:143:PHE:HD2	0.53	1.63	2	2
1:A:133:ALA:C	1:A:134:TRP:CG	0.53	2.82	14	13
1:A:151:PHE:CD1	1:A:157:LEU:HD11	0.53	2.38	12	1
1:A:167:TYR:HB2	1:A:221:ILE:HG22	0.53	1.79	6	2
1:A:206:VAL:HG23	1:A:210:PHE:CD2	0.53	2.39	14	4
1:A:167:TYR:CD2	1:A:168:ASN:OD1	0.53	2.61	18	1
1:A:140:THR:C	1:A:180:LEU:HD23	0.53	2.24	17	1
1:A:79:LEU:HD23	1:A:80:LYS:H	0.53	1.64	1	1
1:A:82:VAL:CG2	1:A:115:MET:CE	0.53	2.87	12	5
1:A:158:MET:HE1	1:A:161:VAL:HG21	0.53	1.81	3	2
1:A:105:GLY:O	1:A:107:LYS:N	0.53	2.42	20	3
1:A:158:MET:CE	1:A:161:VAL:HG21	0.53	2.34	1	4
1:A:112:PHE:CD1	1:A:128:ALA:HB2	0.53	2.39	8	1
1:A:165:HIS:CG	1:A:165:HIS:O	0.53	2.61	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:167:TYR:CD1	1:A:167:TYR:C	0.53	2.82	13	2
1:A:134:TRP:CZ2	1:A:209:ILE:O	0.53	2.61	4	5
1:A:125:LEU:CD1	1:A:157:LEU:HD23	0.53	2.33	4	1
1:A:136:ILE:HG23	1:A:173:MET:HB2	0.53	1.79	4	4
1:A:96:VAL:HG21	1:A:173:MET:HE2	0.53	1.79	8	1
1:A:153:PHE:CD1	1:A:153:PHE:O	0.53	2.62	16	2
1:A:166:LYS:HA	1:A:221:ILE:HG21	0.52	1.81	9	2
1:A:195:LEU:HD11	1:A:206:VAL:HG22	0.52	1.81	2	2
1:A:85:HIS:HB2	1:A:138:LEU:HD22	0.52	1.80	14	5
1:A:81:PHE:CE1	1:A:106:ILE:CG2	0.52	2.93	20	4
1:A:112:PHE:CZ	1:A:128:ALA:HB2	0.52	2.33	20	1
1:A:148:TRP:CH2	1:A:186:PRO:HB2	0.52	2.40	9	5
1:A:171:ILE:HG22	1:A:171:ILE:O	0.52	2.04	3	8
1:A:100:LEU:CD2	1:A:206:VAL:HG11	0.52	2.34	7	5
1:A:161:VAL:HG13	1:A:192:ILE:CD1	0.52	2.34	11	2
1:A:218:GLN:NE2	1:A:221:ILE:CD1	0.52	2.73	19	1
1:A:144:LEU:O	1:A:148:TRP:CB	0.52	2.58	12	8
1:A:172:PRO:O	1:A:194:ALA:CB	0.52	2.58	12	15
1:A:173:MET:HE2	1:A:195:LEU:HD12	0.52	1.80	3	4
1:A:166:LYS:C	1:A:167:TYR:CG	0.52	2.83	4	1
1:A:144:LEU:CD1	1:A:145:ARG:N	0.52	2.72	15	3
1:A:151:PHE:CE1	1:A:157:LEU:CD2	0.52	2.93	18	2
1:A:195:LEU:CD2	1:A:209:ILE:HD12	0.52	2.35	4	4
1:A:112:PHE:HE1	1:A:128:ALA:HB2	0.52	1.64	19	3
1:A:150:ASN:O	1:A:154:TYR:CG	0.52	2.63	8	1
1:A:167:TYR:CZ	1:A:168:ASN:ND2	0.52	2.78	16	1
1:A:163:ARG:NH2	1:A:189:LEU:CD2	0.52	2.73	20	1
1:A:148:TRP:CZ2	1:A:186:PRO:HB3	0.51	2.40	7	2
1:A:125:LEU:CD2	1:A:150:ASN:ND2	0.51	2.73	19	1
1:A:216:LYS:N	1:A:216:LYS:CD	0.51	2.72	13	1
1:A:187:PHE:O	1:A:191:THR:CG2	0.51	2.58	18	15
1:A:81:PHE:O	1:A:81:PHE:CG	0.51	2.63	17	7
1:A:176:LEU:HD21	1:A:197:GLU:CB	0.51	2.35	9	1
1:A:101:GLN:O	1:A:107:LYS:CD	0.51	2.58	17	2
1:A:80:LYS:HZ2	1:A:106:ILE:HG23	0.51	1.61	4	1
1:A:167:TYR:N	1:A:221:ILE:HG21	0.51	2.21	20	1
1:A:147:THR:CG2	1:A:148:TRP:N	0.51	2.73	13	5
1:A:79:LEU:HD23	1:A:132:SER:OG	0.51	2.06	13	2
1:A:147:THR:OG1	1:A:151:PHE:CE1	0.51	2.59	12	2
1:A:112:PHE:CD1	1:A:115:MET:SD	0.51	3.04	9	2
1:A:158:MET:O	1:A:161:VAL:CG2	0.51	2.58	15	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:129:VAL:O	1:A:168:ASN:CB	0.51	2.59	2	4
1:A:80:LYS:O	1:A:133:ALA:CB	0.51	2.58	16	7
1:A:134:TRP:CD1	1:A:169:SER:HB3	0.51	2.41	5	3
1:A:140:THR:HG22	1:A:141:GLU:H	0.51	1.65	16	4
1:A:154:TYR:CD1	1:A:154:TYR:N	0.51	2.79	18	1
1:A:164:GLN:NE2	1:A:164:GLN:N	0.51	2.58	1	2
1:A:163:ARG:HG3	1:A:192:ILE:HG23	0.51	1.81	17	1
1:A:96:VAL:CG2	1:A:197:GLU:OE2	0.50	2.60	9	2
1:A:129:VAL:O	1:A:129:VAL:CG1	0.50	2.59	14	13
1:A:161:VAL:O	1:A:192:ILE:CD1	0.50	2.59	19	10
1:A:207:GLU:O	1:A:211:GLN:CB	0.50	2.59	4	4
1:A:206:VAL:HA	1:A:210:PHE:CE2	0.50	2.41	18	5
1:A:78:PHE:HE1	1:A:215:TYR:HH	0.50	1.47	14	1
1:A:140:THR:O	1:A:144:LEU:CB	0.50	2.60	13	5
1:A:134:TRP:CD1	1:A:169:SER:HB2	0.50	2.41	4	7
1:A:89:ASP:O	1:A:138:LEU:CD2	0.50	2.60	18	2
1:A:154:TYR:CD1	1:A:154:TYR:O	0.50	2.64	13	1
1:A:176:LEU:HD11	1:A:197:GLU:CB	0.50	2.36	18	2
1:A:134:TRP:CH2	1:A:210:PHE:HA	0.50	2.42	15	14
1:A:154:TYR:CE2	1:A:156:SER:HB2	0.50	2.42	2	2
1:A:139:LEU:HD23	1:A:185:THR:HG23	0.50	1.84	5	1
1:A:167:TYR:OH	1:A:222:TRP:CG	0.50	2.64	12	1
1:A:80:LYS:HZ1	1:A:106:ILE:HA	0.50	1.67	20	1
1:A:133:ALA:O	1:A:169:SER:CB	0.50	2.59	1	6
1:A:195:LEU:HD11	1:A:206:VAL:CG2	0.50	2.37	2	5
1:A:180:LEU:CD1	1:A:185:THR:OG1	0.50	2.60	15	6
1:A:182:ARG:CG	1:A:190:GLN:OE1	0.50	2.60	3	1
1:A:94:LEU:O	1:A:94:LEU:CD2	0.50	2.59	20	2
1:A:125:LEU:N	1:A:125:LEU:HD12	0.50	2.22	16	1
1:A:176:LEU:HD12	1:A:198:GLU:HB3	0.50	1.82	17	3
1:A:190:GLN:CG	1:A:190:GLN:O	0.50	2.60	10	5
1:A:197:GLU:OE1	1:A:202:PHE:CE2	0.50	2.65	7	1
1:A:94:LEU:HD13	1:A:94:LEU:C	0.50	2.26	18	4
1:A:158:MET:HA	1:A:158:MET:HE2	0.50	1.84	5	3
1:A:166:LYS:HG3	1:A:167:TYR:CE2	0.50	2.42	4	1
1:A:85:HIS:NE2	1:A:90:THR:HG23	0.50	2.21	10	2
1:A:161:VAL:CG1	1:A:192:ILE:HD11	0.50	2.35	12	2
1:A:176:LEU:HD21	1:A:197:GLU:OE1	0.50	2.06	12	2
1:A:97:GLN:HE21	1:A:111:ILE:HG23	0.50	1.65	19	2
1:A:218:GLN:NE2	1:A:221:ILE:HD12	0.50	2.21	19	1
1:A:192:ILE:CG2	1:A:193:ASN:N	0.50	2.75	5	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:82:VAL:HG22	1:A:83:ILE:N	0.50	2.22	14	11
1:A:139:LEU:CD2	1:A:185:THR:HG23	0.50	2.37	5	4
1:A:151:PHE:HD1	1:A:157:LEU:HD13	0.50	1.65	8	1
1:A:125:LEU:CD2	1:A:150:ASN:OD1	0.50	2.60	9	1
1:A:176:LEU:N	1:A:176:LEU:HD23	0.50	2.22	13	2
1:A:100:LEU:HD22	1:A:206:VAL:CG2	0.50	2.36	14	3
1:A:165:HIS:CE1	1:A:217:THR:HG21	0.50	2.42	12	1
1:A:144:LEU:C	1:A:144:LEU:CD1	0.49	2.80	3	13
1:A:94:LEU:HG	1:A:111:ILE:HD13	0.49	1.82	3	2
1:A:139:LEU:HD11	1:A:172:PRO:HB2	0.49	1.84	7	1
1:A:80:LYS:CE	1:A:107:LYS:O	0.49	2.60	8	1
1:A:125:LEU:CD1	1:A:150:ASN:O	0.49	2.60	12	1
1:A:80:LYS:NZ	1:A:107:LYS:N	0.49	2.60	8	2
1:A:102:ASP:O	1:A:103:ASP:C	0.49	2.49	20	3
1:A:202:PHE:CE1	1:A:206:VAL:HG21	0.49	2.42	11	1
1:A:148:TRP:CZ3	1:A:158:MET:SD	0.49	3.06	13	1
1:A:98:ASN:O	1:A:101:GLN:CG	0.49	2.60	20	1
1:A:160:SER:OG	1:A:170:VAL:CG2	0.49	2.61	1	1
1:A:125:LEU:CD2	1:A:147:THR:OG1	0.49	2.60	13	1
1:A:176:LEU:HD12	1:A:198:GLU:HG3	0.49	1.83	18	1
1:A:220:THR:O	1:A:224:GLU:CG	0.49	2.60	20	4
1:A:135:THR:O	1:A:137:LEU:CD1	0.49	2.60	6	1
1:A:176:LEU:HD12	1:A:198:GLU:CG	0.49	2.38	6	4
1:A:176:LEU:HD21	1:A:197:GLU:HB3	0.49	1.84	9	1
1:A:153:PHE:O	1:A:153:PHE:CG	0.49	2.65	20	3
1:A:154:TYR:CD2	1:A:156:SER:HB2	0.49	2.43	1	1
1:A:78:PHE:CE2	1:A:215:TYR:OH	0.49	2.63	5	3
1:A:125:LEU:O	1:A:128:ALA:CB	0.49	2.60	2	1
1:A:136:ILE:HG23	1:A:173:MET:CB	0.49	2.37	4	1
1:A:151:PHE:CE1	1:A:157:LEU:HB3	0.49	2.42	15	1
1:A:80:LYS:CD	1:A:107:LYS:O	0.49	2.60	2	3
1:A:99:LEU:HD11	1:A:202:PHE:CZ	0.49	2.42	3	1
1:A:215:TYR:O	1:A:219:GLN:CB	0.49	2.61	11	2
1:A:80:LYS:CG	1:A:81:PHE:N	0.49	2.76	10	3
1:A:125:LEU:O	1:A:129:VAL:HG23	0.49	2.07	20	1
1:A:99:LEU:C	1:A:99:LEU:CD2	0.49	2.78	4	16
1:A:140:THR:CG2	1:A:178:ASN:OD1	0.49	2.61	17	4
1:A:163:ARG:NH1	1:A:193:ASN:ND2	0.49	2.60	6	1
1:A:125:LEU:HD11	1:A:150:ASN:O	0.49	2.07	12	1
1:A:147:THR:CG2	1:A:151:PHE:CZ	0.49	2.96	12	1
1:A:84:LEU:CD2	1:A:112:PHE:CE1	0.48	2.96	4	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:129:VAL:CG1	1:A:129:VAL:O	0.48	2.60	18	2
1:A:136:ILE:HG23	1:A:173:MET:HB3	0.48	1.85	7	2
1:A:197:GLU:OE1	1:A:202:PHE:CG	0.48	2.65	7	1
1:A:82:VAL:CG1	1:A:128:ALA:O	0.48	2.61	9	2
1:A:160:SER:O	1:A:170:VAL:CG2	0.48	2.59	1	1
1:A:161:VAL:CG1	1:A:189:LEU:HD23	0.48	2.37	7	1
1:A:151:PHE:CE2	1:A:161:VAL:HG22	0.48	2.42	8	1
1:A:203:PRO:O	1:A:206:VAL:CG1	0.48	2.61	10	4
1:A:125:LEU:CD1	1:A:154:TYR:OH	0.48	2.61	13	1
1:A:92:GLU:CG	1:A:177:ASN:ND2	0.48	2.76	19	1
1:A:82:VAL:CG2	1:A:115:MET:HE1	0.48	2.39	3	3
1:A:163:ARG:CD	1:A:170:VAL:O	0.48	2.61	4	1
1:A:82:VAL:HG21	1:A:115:MET:HE1	0.48	1.84	12	1
1:A:101:GLN:O	1:A:107:LYS:HD3	0.48	2.07	19	2
1:A:163:ARG:CG	1:A:192:ILE:HG23	0.48	2.38	17	1
1:A:162:ASN:O	1:A:163:ARG:C	0.48	2.52	3	4
1:A:167:TYR:CG	1:A:168:ASN:N	0.48	2.82	3	3
1:A:192:ILE:HG22	1:A:193:ASN:N	0.48	2.24	10	1
1:A:135:THR:N	1:A:169:SER:O	0.48	2.46	2	3
1:A:101:GLN:CG	1:A:101:GLN:O	0.48	2.60	15	1
1:A:137:LEU:N	1:A:137:LEU:CD2	0.48	2.76	2	1
1:A:174:ARG:NH2	1:A:182:ARG:NH2	0.48	2.61	1	1
1:A:162:ASN:O	1:A:164:GLN:N	0.48	2.46	8	2
1:A:187:PHE:CD1	1:A:187:PHE:O	0.48	2.67	10	1
1:A:81:PHE:CE1	1:A:106:ILE:HG22	0.48	2.44	19	3
1:A:166:LYS:C	1:A:221:ILE:HG21	0.48	2.28	7	2
1:A:126:ASP:O	1:A:130:ASN:CB	0.48	2.62	19	2
1:A:174:ARG:NH2	1:A:180:LEU:H	0.48	2.07	12	1
1:A:79:LEU:HD23	1:A:132:SER:HG	0.48	1.69	13	1
1:A:148:TRP:CH2	1:A:158:MET:SD	0.48	3.07	13	1
1:A:210:PHE:CD1	1:A:210:PHE:N	0.48	2.81	7	11
1:A:153:PHE:O	1:A:153:PHE:CD1	0.48	2.66	15	1
1:A:101:GLN:O	1:A:101:GLN:CD	0.48	2.53	15	1
1:A:154:TYR:CE1	1:A:156:SER:HB3	0.47	2.44	15	1
1:A:147:THR:O	1:A:150:ASN:ND2	0.47	2.47	16	1
1:A:164:GLN:HE21	1:A:164:GLN:N	0.47	2.08	6	1
1:A:80:LYS:HZ2	1:A:107:LYS:H	0.47	1.52	8	1
1:A:161:VAL:CG1	1:A:188:ALA:CB	0.47	2.89	10	1
1:A:219:GLN:O	1:A:223:LYS:N	0.47	2.48	13	2
1:A:147:THR:O	1:A:150:ASN:N	0.47	2.48	16	15
1:A:154:TYR:CZ	1:A:156:SER:OG	0.47	2.60	1	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:166:LYS:O	1:A:167:TYR:CG	0.47	2.67	4	1
1:A:176:LEU:HD12	1:A:198:GLU:HG2	0.47	1.85	17	3
1:A:96:VAL:HG22	1:A:197:GLU:OE1	0.47	2.09	10	2
1:A:80:LYS:HZ3	1:A:107:LYS:H	0.47	1.50	20	1
1:A:197:GLU:OE1	1:A:202:PHE:CD2	0.47	2.67	7	1
1:A:171:ILE:HG22	1:A:195:LEU:HB2	0.47	1.86	16	3
1:A:87:GLU:CG	1:A:87:GLU:O	0.47	2.62	17	3
1:A:159:ASN:O	1:A:164:GLN:NE2	0.47	2.48	1	7
1:A:154:TYR:CE1	1:A:156:SER:CB	0.47	2.98	3	2
1:A:139:LEU:HD21	1:A:172:PRO:HB2	0.47	1.87	10	1
1:A:151:PHE:N	1:A:151:PHE:CD1	0.47	2.82	17	2
1:A:80:LYS:O	1:A:133:ALA:N	0.47	2.48	15	8
1:A:86:ALA:O	1:A:90:THR:N	0.47	2.48	13	11
1:A:161:VAL:HG12	1:A:192:ILE:HD11	0.47	1.87	11	1
1:A:85:HIS:CE1	1:A:111:ILE:HD12	0.47	2.44	20	1
1:A:81:PHE:CD1	1:A:81:PHE:C	0.47	2.88	6	4
1:A:96:VAL:O	1:A:99:LEU:N	0.47	2.48	7	13
1:A:134:TRP:CZ2	1:A:210:PHE:HA	0.47	2.45	5	13
1:A:78:PHE:CE2	1:A:108:PRO:HD3	0.47	2.44	12	3
1:A:163:ARG:CD	1:A:192:ILE:CG1	0.47	2.93	10	1
1:A:125:LEU:CB	1:A:157:LEU:HD21	0.47	2.40	19	1
1:A:131:GLY:HA2	1:A:222:TRP:CD1	0.47	2.45	10	3
1:A:99:LEU:O	1:A:103:ASP:N	0.47	2.48	20	3
1:A:82:VAL:HG22	1:A:83:ILE:H	0.46	1.69	8	3
1:A:105:GLY:O	1:A:107:LYS:CD	0.46	2.64	13	1
1:A:150:ASN:OD1	1:A:150:ASN:C	0.46	2.53	16	1
1:A:99:LEU:HD21	1:A:202:PHE:CZ	0.46	2.43	8	3
1:A:145:ARG:CD	1:A:145:ARG:C	0.46	2.84	11	2
1:A:143:PHE:CD1	1:A:143:PHE:O	0.46	2.68	20	2
1:A:223:LYS:CD	1:A:223:LYS:C	0.46	2.83	4	1
1:A:92:GLU:O	1:A:95:ARG:N	0.46	2.49	12	2
1:A:180:LEU:HD13	1:A:184:ARG:HB2	0.46	1.85	16	4
1:A:167:TYR:CE1	1:A:168:ASN:HB3	0.46	2.45	14	1
1:A:145:ARG:CD	1:A:145:ARG:N	0.46	2.77	1	1
1:A:78:PHE:CD2	1:A:215:TYR:OH	0.46	2.69	3	1
1:A:134:TRP:HB3	1:A:171:ILE:HD13	0.46	1.86	3	1
1:A:151:PHE:CD1	1:A:157:LEU:HG	0.46	2.45	9	1
1:A:167:TYR:CE1	1:A:168:ASN:ND2	0.46	2.84	16	1
1:A:79:LEU:HD11	1:A:110:ILE:CG2	0.46	2.39	3	3
1:A:107:LYS:HA	1:A:108:PRO:C	0.46	2.31	3	20
1:A:77:VAL:HG22	1:A:78:PHE:N	0.46	2.26	3	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:166:LYS:HG3	1:A:167:TYR:CD2	0.46	2.45	14	2
1:A:197:GLU:HA	1:A:202:PHE:CD1	0.46	2.45	6	1
1:A:216:LYS:O	1:A:220:THR:CB	0.46	2.63	15	2
1:A:145:ARG:O	1:A:149:CYS:CB	0.46	2.64	9	14
1:A:154:TYR:CE2	1:A:156:SER:CB	0.46	2.99	1	2
1:A:153:PHE:CE1	1:A:154:TYR:HB2	0.46	2.46	5	1
1:A:82:VAL:CG2	1:A:83:ILE:N	0.46	2.79	18	4
1:A:173:MET:HE3	1:A:195:LEU:HD12	0.46	1.86	19	1
1:A:81:PHE:CE2	1:A:83:ILE:CD1	0.46	2.97	20	1
1:A:96:VAL:C	1:A:98:ASN:N	0.46	2.69	2	13
1:A:212:GLU:O	1:A:215:TYR:N	0.46	2.49	12	17
1:A:197:GLU:OE2	1:A:202:PHE:CE1	0.46	2.68	16	2
1:A:125:LEU:HD13	1:A:157:LEU:CD2	0.46	2.41	16	1
1:A:151:PHE:CE1	1:A:157:LEU:HD23	0.46	2.45	18	1
1:A:151:PHE:CZ	1:A:157:LEU:HG	0.46	2.45	18	1
1:A:144:LEU:CD1	1:A:145:ARG:NH1	0.46	2.78	20	1
1:A:195:LEU:CD2	1:A:209:ILE:CD1	0.46	2.94	20	1
1:A:219:GLN:O	1:A:219:GLN:NE2	0.46	2.49	15	8
1:A:216:LYS:O	1:A:220:THR:N	0.46	2.49	15	4
1:A:167:TYR:CE1	1:A:222:TRP:HB2	0.46	2.46	6	2
1:A:217:THR:O	1:A:220:THR:N	0.46	2.49	8	5
1:A:150:ASN:CG	1:A:151:PHE:N	0.46	2.68	16	1
1:A:112:PHE:CE1	1:A:128:ALA:CB	0.46	2.96	11	2
1:A:194:ALA:O	1:A:205:GLN:NE2	0.45	2.49	11	9
1:A:84:LEU:CD1	1:A:128:ALA:CB	0.45	2.93	7	1
1:A:144:LEU:O	1:A:148:TRP:N	0.45	2.49	10	6
1:A:133:ALA:O	1:A:169:SER:N	0.45	2.49	12	4
1:A:205:GLN:O	1:A:208:ARG:N	0.45	2.49	20	1
1:A:87:GLU:O	1:A:87:GLU:CG	0.45	2.64	2	4
1:A:142:ASN:OD1	1:A:143:PHE:N	0.45	2.50	5	2
1:A:218:GLN:O	1:A:221:ILE:N	0.45	2.50	5	3
1:A:96:VAL:CG2	1:A:173:MET:HE1	0.45	2.40	11	1
1:A:125:LEU:O	1:A:128:ALA:N	0.45	2.50	12	2
1:A:85:HIS:ND1	1:A:90:THR:OG1	0.45	2.49	16	1
1:A:96:VAL:O	1:A:98:ASN:N	0.45	2.49	1	10
1:A:150:ASN:O	1:A:154:TYR:N	0.45	2.49	16	4
1:A:148:TRP:CZ2	1:A:186:PRO:CB	0.45	2.99	7	1
1:A:166:LYS:O	1:A:218:GLN:NE2	0.45	2.49	15	2
1:A:151:PHE:CD1	1:A:151:PHE:N	0.45	2.83	9	1
1:A:86:ALA:O	1:A:89:ASP:N	0.45	2.49	11	1
1:A:89:ASP:N	1:A:89:ASP:OD1	0.45	2.50	17	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:151:PHE:CD2	1:A:157:LEU:HD11	0.45	2.47	12	1
1:A:169:SER:C	1:A:170:VAL:CG1	0.45	2.84	13	1
1:A:212:GLU:HA	1:A:215:TYR:CD2	0.45	2.47	13	1
1:A:85:HIS:NE2	1:A:90:THR:OG1	0.45	2.49	18	4
1:A:94:LEU:HB2	1:A:111:ILE:HG21	0.45	1.88	1	3
1:A:105:GLY:C	1:A:107:LYS:CD	0.45	2.85	13	3
1:A:223:LYS:CB	1:A:223:LYS:NZ	0.45	2.80	3	1
1:A:160:SER:O	1:A:163:ARG:NH1	0.45	2.49	5	1
1:A:83:ILE:HG22	1:A:83:ILE:O	0.45	2.11	7	1
1:A:80:LYS:HZ1	1:A:106:ILE:HD12	0.45	1.70	17	1
1:A:168:ASN:O	1:A:168:ASN:ND2	0.45	2.50	19	2
1:A:150:ASN:O	1:A:153:PHE:N	0.45	2.49	1	2
1:A:182:ARG:CD	1:A:190:GLN:OE1	0.45	2.65	3	1
1:A:100:LEU:HD22	1:A:206:VAL:CG1	0.45	2.38	7	1
1:A:103:ASP:HB3	1:A:104:PHE:CD1	0.45	2.46	9	1
1:A:89:ASP:OD1	1:A:178:ASN:ND2	0.45	2.50	17	2
1:A:176:LEU:HD12	1:A:198:GLU:CB	0.45	2.42	17	1
1:A:162:ASN:CB	1:A:164:GLN:OE1	0.45	2.65	18	1
1:A:83:ILE:HD12	1:A:83:ILE:N	0.45	2.27	9	2
1:A:192:ILE:O	1:A:194:ALA:N	0.45	2.49	13	10
1:A:80:LYS:HG3	1:A:215:TYR:CE1	0.45	2.46	18	1
1:A:89:ASP:OD2	1:A:89:ASP:N	0.45	2.49	20	1
1:A:84:LEU:HD23	1:A:112:PHE:CE1	0.45	2.47	4	1
1:A:218:GLN:CA	1:A:221:ILE:HD12	0.45	2.42	8	3
1:A:205:GLN:O	1:A:209:ILE:N	0.45	2.50	17	3
1:A:134:TRP:NE1	1:A:209:ILE:O	0.45	2.49	20	2
1:A:140:THR:O	1:A:144:LEU:N	0.45	2.49	5	4
1:A:174:ARG:N	1:A:195:LEU:O	0.45	2.49	11	1
1:A:160:SER:O	1:A:163:ARG:N	0.45	2.50	15	1
1:A:193:ASN:O	1:A:193:ASN:ND2	0.45	2.50	15	1
1:A:89:ASP:OD2	1:A:178:ASN:ND2	0.45	2.50	20	3
1:A:211:GLN:HG2	1:A:214:VAL:HG23	0.45	1.89	5	10
1:A:147:THR:O	1:A:151:PHE:N	0.45	2.50	6	6
1:A:125:LEU:HD11	1:A:151:PHE:HE1	0.45	1.72	5	2
1:A:147:THR:HB	1:A:151:PHE:CZ	0.45	2.47	9	2
1:A:203:PRO:O	1:A:206:VAL:HG13	0.45	2.12	18	4
1:A:198:GLU:C	1:A:198:GLU:CD	0.45	2.76	13	1
1:A:214:VAL:O	1:A:217:THR:N	0.45	2.50	13	1
1:A:125:LEU:HD21	1:A:150:ASN:CG	0.45	2.31	19	1
1:A:142:ASN:ND2	1:A:143:PHE:N	0.45	2.65	19	4
1:A:164:GLN:N	1:A:164:GLN:NE2	0.45	2.65	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:219:GLN:O	1:A:222:TRP:N	0.45	2.50	13	1
1:A:83:ILE:O	1:A:83:ILE:HG22	0.45	2.12	19	2
1:A:85:HIS:CE1	1:A:90:THR:HG1	0.44	2.30	17	3
1:A:155:THR:O	1:A:159:ASN:ND2	0.44	2.50	4	3
1:A:96:VAL:CG2	1:A:197:GLU:OE1	0.44	2.65	6	1
1:A:126:ASP:O	1:A:129:VAL:N	0.44	2.50	15	7
1:A:180:LEU:CD2	1:A:184:ARG:CB	0.44	2.95	5	1
1:A:198:GLU:OE2	1:A:199:SER:N	0.44	2.50	9	1
1:A:206:VAL:HA	1:A:210:PHE:CD2	0.44	2.47	17	1
1:A:85:HIS:HB3	1:A:138:LEU:HD22	0.44	1.88	20	1
1:A:127:ASP:O	1:A:130:ASN:N	0.44	2.50	20	1
1:A:218:GLN:NE2	1:A:218:GLN:N	0.44	2.64	12	2
1:A:82:VAL:HG12	1:A:135:THR:HB	0.44	1.88	7	1
1:A:139:LEU:HD11	1:A:172:PRO:CB	0.44	2.42	7	1
1:A:167:TYR:CD1	1:A:168:ASN:HB3	0.44	2.48	14	1
1:A:167:TYR:CZ	1:A:168:ASN:OD1	0.44	2.70	14	1
1:A:151:PHE:O	1:A:154:TYR:N	0.44	2.50	9	5
1:A:142:ASN:CG	1:A:143:PHE:N	0.44	2.71	9	1
1:A:91:ASP:O	1:A:95:ARG:N	0.44	2.50	12	1
1:A:172:PRO:O	1:A:194:ALA:CA	0.44	2.66	13	5
1:A:89:ASP:O	1:A:138:LEU:HD23	0.44	2.13	6	2
1:A:158:MET:HE1	1:A:161:VAL:HG11	0.44	1.89	10	1
1:A:154:TYR:CE2	1:A:156:SER:OG	0.44	2.60	1	1
1:A:82:VAL:C	1:A:83:ILE:HD12	0.44	2.33	8	3
1:A:129:VAL:O	1:A:168:ASN:ND2	0.44	2.51	4	2
1:A:126:ASP:O	1:A:130:ASN:N	0.44	2.50	12	2
1:A:164:GLN:N	1:A:164:GLN:CD	0.44	2.70	18	1
1:A:78:PHE:CE1	1:A:219:GLN:NE2	0.44	2.86	11	1
1:A:168:ASN:ND2	1:A:168:ASN:O	0.44	2.50	14	1
1:A:217:THR:O	1:A:221:ILE:N	0.44	2.50	17	2
1:A:84:LEU:O	1:A:136:ILE:O	0.44	2.36	16	12
1:A:125:LEU:CD1	1:A:157:LEU:CD2	0.44	2.96	4	1
1:A:158:MET:CE	1:A:161:VAL:HG11	0.44	2.42	10	1
1:A:186:PRO:HG3	1:A:189:LEU:HD12	0.44	1.89	18	2
1:A:174:ARG:NH2	1:A:178:ASN:O	0.44	2.50	12	1
1:A:107:LYS:CB	1:A:108:PRO:HA	0.44	2.42	15	1
1:A:166:LYS:HG3	1:A:167:TYR:CD1	0.44	2.48	19	1
1:A:154:TYR:CE1	1:A:156:SER:HB2	0.44	2.48	3	1
1:A:223:LYS:CB	1:A:223:LYS:HZ2	0.44	2.25	3	1
1:A:97:GLN:NE2	1:A:109:GLY:O	0.44	2.51	9	1
1:A:111:ILE:HD11	1:A:114:GLU:HG2	0.44	1.90	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:222:TRP:C	1:A:224:GLU:N	0.44	2.71	11	1
1:A:125:LEU:HD11	1:A:150:ASN:CB	0.44	2.42	12	1
1:A:133:ALA:HB1	1:A:134:TRP:CE3	0.43	2.47	7	1
1:A:89:ASP:CG	1:A:178:ASN:ND2	0.43	2.72	9	2
1:A:170:VAL:CG2	1:A:170:VAL:O	0.43	2.65	13	1
1:A:80:LYS:NZ	1:A:107:LYS:O	0.43	2.49	3	2
1:A:166:LYS:O	1:A:168:ASN:N	0.43	2.51	4	1
1:A:80:LYS:HZ3	1:A:106:ILE:CA	0.43	2.24	6	1
1:A:125:LEU:C	1:A:127:ASP:N	0.43	2.70	13	3
1:A:85:HIS:CD2	1:A:111:ILE:HB	0.43	2.48	16	1
1:A:125:LEU:C	1:A:125:LEU:CD1	0.43	2.86	17	1
1:A:110:ILE:HD11	1:A:114:GLU:O	0.43	2.12	4	1
1:A:177:ASN:HD22	1:A:177:ASN:N	0.43	2.11	4	1
1:A:151:PHE:CE1	1:A:157:LEU:HG	0.43	2.48	18	3
1:A:137:LEU:CD1	1:A:170:VAL:HG13	0.43	2.43	8	1
1:A:176:LEU:CD2	1:A:197:GLU:OE2	0.43	2.63	18	1
1:A:167:TYR:CZ	1:A:222:TRP:HB2	0.43	2.49	6	1
1:A:144:LEU:HD22	1:A:148:TRP:HB2	0.43	1.90	14	1
1:A:150:ASN:OD1	1:A:151:PHE:N	0.43	2.51	16	1
1:A:80:LYS:CE	1:A:107:LYS:N	0.43	2.82	20	1
1:A:96:VAL:HG23	1:A:197:GLU:OE1	0.43	2.13	6	1
1:A:171:ILE:O	1:A:171:ILE:HG22	0.43	2.14	6	1
1:A:129:VAL:CG1	1:A:168:ASN:ND2	0.43	2.81	12	1
1:A:173:MET:HE1	1:A:197:GLU:HB2	0.43	1.90	7	1
1:A:162:ASN:C	1:A:164:GLN:N	0.43	2.71	14	2
1:A:186:PRO:O	1:A:190:GLN:N	0.43	2.52	10	1
1:A:159:ASN:OD1	1:A:160:SER:N	0.43	2.51	19	1
1:A:94:LEU:C	1:A:94:LEU:CD2	0.43	2.79	9	1
1:A:189:LEU:HD23	1:A:192:ILE:CD1	0.43	2.43	10	1
1:A:140:THR:CG2	1:A:178:ASN:ND2	0.43	2.82	1	1
1:A:77:VAL:CG2	1:A:78:PHE:N	0.43	2.82	3	3
1:A:176:LEU:HD22	1:A:176:LEU:H	0.43	1.73	4	2
1:A:81:PHE:CE2	1:A:83:ILE:HG13	0.43	2.49	7	1
1:A:208:ARG:N	1:A:208:ARG:CD	0.43	2.81	12	1
1:A:182:ARG:CG	1:A:183:GLU:N	0.43	2.82	16	1
1:A:153:PHE:O	1:A:153:PHE:CD2	0.43	2.72	20	1
1:A:125:LEU:HD13	1:A:157:LEU:CG	0.43	2.42	1	1
1:A:148:TRP:CZ3	1:A:186:PRO:CB	0.43	3.02	9	1
1:A:171:ILE:HG12	1:A:209:ILE:HD13	0.43	1.90	9	1
1:A:151:PHE:CG	1:A:157:LEU:HD11	0.43	2.49	12	1
1:A:81:PHE:CE2	1:A:136:ILE:HD13	0.42	2.47	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:173:MET:HE2	1:A:197:GLU:HG2	0.42	1.89	13	1
1:A:185:THR:HG23	1:A:186:PRO:HD2	0.42	1.91	13	3
1:A:80:LYS:NZ	1:A:106:ILE:O	0.42	2.52	15	1
1:A:104:PHE:CE1	1:A:206:VAL:CG1	0.42	2.96	4	1
1:A:185:THR:HG22	1:A:186:PRO:HD2	0.42	1.91	5	2
1:A:96:VAL:HG23	1:A:197:GLU:OE2	0.42	2.14	9	1
1:A:187:PHE:CD1	1:A:187:PHE:C	0.42	2.92	10	1
1:A:89:ASP:OD1	1:A:89:ASP:N	0.42	2.50	13	1
1:A:133:ALA:C	1:A:134:TRP:CD2	0.42	2.93	13	2
1:A:182:ARG:CB	1:A:190:GLN:OE1	0.42	2.67	13	1
1:A:100:LEU:O	1:A:106:ILE:N	0.42	2.51	20	1
1:A:137:LEU:HD23	1:A:137:LEU:N	0.42	2.28	4	1
1:A:176:LEU:CD2	1:A:197:GLU:CD	0.42	2.84	6	1
1:A:125:LEU:HD12	1:A:125:LEU:H	0.42	1.73	11	1
1:A:214:VAL:O	1:A:216:LYS:N	0.42	2.52	13	1
1:A:126:ASP:OD2	1:A:127:ASP:N	0.42	2.52	18	1
1:A:158:MET:HA	1:A:158:MET:HE3	0.42	1.90	17	2
1:A:84:LEU:HD13	1:A:125:LEU:HD12	0.42	1.90	9	1
1:A:96:VAL:CG2	1:A:197:GLU:CD	0.42	2.88	9	1
1:A:125:LEU:O	1:A:127:ASP:N	0.42	2.52	13	1
1:A:212:GLU:C	1:A:214:VAL:N	0.42	2.71	16	1
1:A:107:LYS:CB	1:A:107:LYS:NZ	0.42	2.82	20	1
1:A:174:ARG:CZ	1:A:174:ARG:HB2	0.42	2.44	6	1
1:A:92:GLU:CD	1:A:92:GLU:C	0.42	2.78	16	5
1:A:167:TYR:OH	1:A:222:TRP:NE1	0.42	2.49	15	1
1:A:80:LYS:HE2	1:A:106:ILE:HG23	0.42	1.90	17	1
1:A:215:TYR:O	1:A:219:GLN:N	0.42	2.53	20	1
1:A:211:GLN:O	1:A:215:TYR:CD1	0.42	2.72	13	1
1:A:180:LEU:C	1:A:180:LEU:HD13	0.42	2.35	17	1
1:A:205:GLN:O	1:A:206:VAL:C	0.42	2.58	10	3
1:A:157:LEU:O	1:A:160:SER:N	0.42	2.52	11	1
1:A:193:ASN:ND2	1:A:209:ILE:HD11	0.42	2.30	16	1
1:A:153:PHE:C	1:A:154:TYR:CD1	0.42	2.93	18	1
1:A:165:HIS:O	1:A:166:LYS:O	0.42	2.38	1	1
1:A:133:ALA:HB1	1:A:134:TRP:CZ3	0.42	2.50	9	1
1:A:83:ILE:CG1	1:A:136:ILE:HG13	0.42	2.45	12	1
1:A:155:THR:HG23	1:A:159:ASN:OD1	0.42	2.15	13	1
1:A:143:PHE:C	1:A:143:PHE:CD1	0.42	2.93	15	1
1:A:78:PHE:O	1:A:79:LEU:C	0.41	2.59	2	13
1:A:148:TRP:CZ3	1:A:158:MET:HE3	0.41	2.50	2	1
1:A:166:LYS:O	1:A:167:TYR:C	0.41	2.59	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:180:LEU:HD21	1:A:184:ARG:HB3	0.41	1.90	9	1
1:A:212:GLU:HA	1:A:215:TYR:CG	0.41	2.50	13	1
1:A:101:GLN:HB2	1:A:107:LYS:CD	0.41	2.45	15	1
1:A:171:ILE:HG21	1:A:195:LEU:HD23	0.41	1.90	16	1
1:A:163:ARG:CG	1:A:192:ILE:CG2	0.41	2.97	17	1
1:A:154:TYR:C	1:A:156:SER:N	0.41	2.74	18	1
1:A:85:HIS:HB3	1:A:93:ALA:CB	0.41	2.45	13	11
1:A:129:VAL:HG11	1:A:170:VAL:HG22	0.41	1.91	7	1
1:A:205:GLN:C	1:A:207:GLU:N	0.41	2.73	10	3
1:A:195:LEU:HD13	1:A:196:GLU:N	0.41	2.30	11	1
1:A:197:GLU:HA	1:A:202:PHE:CG	0.41	2.50	1	1
1:A:216:LYS:O	1:A:219:GLN:N	0.41	2.53	1	1
1:A:185:THR:CG2	1:A:186:PRO:HD2	0.41	2.46	4	9
1:A:155:THR:O	1:A:158:MET:N	0.41	2.54	19	2
1:A:214:VAL:O	1:A:218:GLN:NE2	0.41	2.53	4	1
1:A:111:ILE:CD1	1:A:113:ALA:HB3	0.41	2.31	7	1
1:A:218:GLN:NE2	1:A:218:GLN:H	0.41	2.14	12	1
1:A:168:ASN:ND2	1:A:168:ASN:C	0.41	2.73	17	1
1:A:84:LEU:HG	1:A:128:ALA:CB	0.41	2.45	3	1
1:A:166:LYS:O	1:A:168:ASN:CG	0.41	2.59	4	1
1:A:186:PRO:HG2	1:A:189:LEU:CG	0.41	2.46	4	3
1:A:92:GLU:C	1:A:92:GLU:CD	0.41	2.78	8	3
1:A:78:PHE:CE2	1:A:108:PRO:HG3	0.41	2.50	7	1
1:A:97:GLN:OE1	1:A:97:GLN:C	0.41	2.59	20	1
1:A:100:LEU:HD23	1:A:104:PHE:HE1	0.41	1.76	4	1
1:A:163:ARG:O	1:A:164:GLN:C	0.41	2.59	4	2
1:A:97:GLN:OE1	1:A:97:GLN:O	0.41	2.38	19	4
1:A:186:PRO:HG2	1:A:189:LEU:CD1	0.41	2.45	18	3
1:A:166:LYS:C	1:A:168:ASN:N	0.41	2.74	4	2
1:A:84:LEU:HD23	1:A:84:LEU:HA	0.41	1.83	6	1
1:A:211:GLN:CG	1:A:214:VAL:HB	0.41	2.45	13	1
1:A:89:ASP:N	1:A:89:ASP:OD2	0.41	2.54	14	1
1:A:84:LEU:HG	1:A:112:PHE:CD1	0.41	2.50	15	1
1:A:160:SER:CB	1:A:170:VAL:CG2	0.41	2.99	11	1
1:A:139:LEU:HD12	1:A:139:LEU:HA	0.41	1.80	12	1
1:A:162:ASN:HD22	1:A:162:ASN:N	0.41	2.14	17	1
1:A:214:VAL:O	1:A:218:GLN:CD	0.41	2.59	4	1
1:A:84:LEU:CD2	1:A:112:PHE:CD1	0.41	3.03	7	1
1:A:180:LEU:CD1	1:A:184:ARG:HB2	0.41	2.46	9	1
1:A:173:MET:CG	1:A:174:ARG:N	0.41	2.84	11	1
1:A:195:LEU:CD2	1:A:205:GLN:HB2	0.41	2.46	14	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:136:ILE:CG2	1:A:173:MET:SD	0.41	3.09	13	1
1:A:137:LEU:O	1:A:139:LEU:HD13	0.41	2.16	13	1
1:A:173:MET:CE	1:A:197:GLU:HG2	0.41	2.46	13	1
1:A:85:HIS:HB2	1:A:138:LEU:CD2	0.41	2.46	14	1
1:A:147:THR:HG23	1:A:151:PHE:CE2	0.41	2.51	14	1
1:A:127:ASP:O	1:A:130:ASN:ND2	0.41	2.53	3	1
1:A:180:LEU:CD2	1:A:184:ARG:HB2	0.41	2.46	5	1
1:A:125:LEU:HD21	1:A:157:LEU:HD11	0.41	1.93	8	1
1:A:163:ARG:O	1:A:164:GLN:O	0.41	2.39	14	3
1:A:188:ALA:O	1:A:191:THR:OG1	0.41	2.39	10	1
1:A:161:VAL:HG13	1:A:192:ILE:HD13	0.41	1.93	11	1
1:A:130:ASN:O	1:A:131:GLY:C	0.41	2.59	13	1
1:A:160:SER:HB2	1:A:170:VAL:CG2	0.41	2.46	14	2
1:A:161:VAL:CG1	1:A:189:LEU:HD21	0.41	2.44	17	1
1:A:167:TYR:CD2	1:A:167:TYR:O	0.41	2.74	18	1
1:A:176:LEU:CG	1:A:198:GLU:HG3	0.41	2.46	18	1
1:A:81:PHE:HE2	1:A:136:ILE:HD11	0.41	1.76	1	1
1:A:128:ALA:O	1:A:135:THR:CG2	0.41	2.68	1	1
1:A:78:PHE:O	1:A:79:LEU:O	0.41	2.39	3	4
1:A:83:ILE:CG1	1:A:136:ILE:HD13	0.41	2.44	6	1
1:A:85:HIS:CG	1:A:90:THR:HA	0.41	2.51	9	1
1:A:104:PHE:CD1	1:A:104:PHE:N	0.41	2.87	9	1
1:A:211:GLN:O	1:A:215:TYR:N	0.41	2.53	10	1
1:A:125:LEU:H	1:A:125:LEU:HD12	0.41	1.76	13	1
1:A:151:PHE:CZ	1:A:157:LEU:CD2	0.41	2.91	13	1
1:A:89:ASP:CG	1:A:138:LEU:HD12	0.41	2.37	15	1
1:A:84:LEU:CG	1:A:128:ALA:HB3	0.41	2.46	17	1
1:A:85:HIS:CD2	1:A:90:THR:O	0.40	2.73	9	1
1:A:97:GLN:HA	1:A:100:LEU:HD12	0.40	1.93	10	1
1:A:163:ARG:CD	1:A:192:ILE:HG12	0.40	2.47	19	1
1:A:81:PHE:CE1	1:A:106:ILE:HG21	0.40	2.51	20	1
1:A:132:SER:O	1:A:167:TYR:O	0.40	2.38	11	4
1:A:134:TRP:CE3	1:A:210:PHE:CD1	0.40	3.10	3	1
1:A:97:GLN:OE1	1:A:101:GLN:OE1	0.40	2.40	6	1
1:A:174:ARG:NE	1:A:180:LEU:O	0.40	2.54	7	1
1:A:147:THR:HB	1:A:151:PHE:CE1	0.40	2.50	11	1
1:A:158:MET:CE	1:A:158:MET:HA	0.40	2.46	1	1
1:A:104:PHE:CD2	1:A:206:VAL:HG11	0.40	2.48	3	1
1:A:163:ARG:NE	1:A:163:ARG:HA	0.40	2.31	5	1
1:A:129:VAL:O	1:A:168:ASN:CG	0.40	2.60	6	1
1:A:166:LYS:O	1:A:218:GLN:OE1	0.40	2.40	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:147:THR:O	1:A:148:TRP:C	0.40	2.60	3	1
1:A:155:THR:O	1:A:159:ASN:CG	0.40	2.60	7	1
1:A:190:GLN:O	1:A:190:GLN:CG	0.40	2.68	7	1
1:A:175:PRO:HG2	1:A:178:ASN:CB	0.40	2.46	8	1
1:A:111:ILE:CG1	1:A:114:GLU:CG	0.40	2.99	9	1
1:A:163:ARG:CD	1:A:192:ILE:HG13	0.40	2.46	10	1
1:A:125:LEU:O	1:A:126:ASP:C	0.40	2.60	12	2
1:A:172:PRO:O	1:A:195:LEU:N	0.40	2.54	13	1
1:A:176:LEU:HD11	1:A:197:GLU:HB2	0.40	1.93	18	1
1:A:159:ASN:OD1	1:A:159:ASN:C	0.40	2.60	19	1
1:A:161:VAL:O	1:A:163:ARG:NE	0.40	2.53	20	1
1:A:168:ASN:O	1:A:168:ASN:OD1	0.40	2.40	11	1
1:A:146:ASP:O	1:A:150:ASN:CG	0.40	2.60	12	1
1:A:174:ARG:NH2	1:A:180:LEU:N	0.40	2.69	12	1
1:A:155:THR:O	1:A:159:ASN:OD1	0.40	2.40	13	1
1:A:195:LEU:HD22	1:A:195:LEU:HA	0.40	1.80	15	2
1:A:128:ALA:O	1:A:135:THR:HG21	0.40	2.16	20	1

6.3 Torsion angles (i)

6.3.1 Protein backbone (i)

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	140/166 (84%)	113±3 (81±2%)	23±3 (17±2%)	4±1 (3±1%)	8	44
All	All	2800/3320 (84%)	2260 (81%)	466 (17%)	74 (3%)	8	44

All 15 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	102	ASP	17
1	A	79	LEU	14
1	A	164	GLN	10
1	A	138	LEU	9
1	A	97	GLN	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	193	ASN	5
1	A	106	ILE	3
1	A	131	GLY	2
1	A	163	ARG	2
1	A	166	LYS	1
1	A	139	LEU	1
1	A	167	TYR	1
1	A	209	ILE	1
1	A	215	TYR	1
1	A	116	PRO	1

6.3.2 Protein sidechains (i)

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles
1	A	129/151 (85%)	99±3 (77±3%)	30±3 (23±3%)	3 28
All	All	2580/3020 (85%)	1979 (77%)	601 (23%)	3 28

All 80 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	90	THR	20
1	A	97	GLN	20
1	A	99	LEU	20
1	A	176	LEU	20
1	A	195	LEU	20
1	A	204	THR	20
1	A	85	HIS	19
1	A	94	LEU	19
1	A	107	LYS	19
1	A	223	LYS	19
1	A	81	PHE	18
1	A	211	GLN	18
1	A	213	SER	16
1	A	202	PHE	15
1	A	180	LEU	14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	160	SER	13
1	A	157	LEU	12
1	A	110	ILE	12
1	A	125	LEU	12
1	A	138	LEU	12
1	A	89	ASP	11
1	A	132	SER	11
1	A	166	LYS	11
1	A	92	GLU	10
1	A	139	LEU	10
1	A	163	ARG	10
1	A	98	ASN	10
1	A	145	ARG	9
1	A	210	PHE	9
1	A	101	GLN	8
1	A	134	TRP	7
1	A	182	ARG	7
1	A	220	THR	7
1	A	150	ASN	6
1	A	198	GLU	6
1	A	154	TYR	5
1	A	174	ARG	5
1	A	126	ASP	5
1	A	91	ASP	5
1	A	148	TRP	5
1	A	168	ASN	5
1	A	87	GLU	5
1	A	199	SER	5
1	A	147	THR	4
1	A	164	GLN	4
1	A	155	THR	4
1	A	95	ARG	4
1	A	96	VAL	4
1	A	165	HIS	4
1	A	197	GLU	4
1	A	218	GLN	4
1	A	127	ASP	4
1	A	162	ASN	3
1	A	104	PHE	3
1	A	137	LEU	3
1	A	80	LYS	3
1	A	153	PHE	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	169	SER	3
1	A	207	GLU	3
1	A	200	ARG	3
1	A	112	PHE	3
1	A	159	ASN	2
1	A	224	GLU	2
1	A	136	ILE	2
1	A	141	GLU	2
1	A	102	ASP	2
1	A	178	ASN	2
1	A	146	ASP	2
1	A	158	MET	2
1	A	170	VAL	2
1	A	142	ASN	1
1	A	156	SER	1
1	A	82	VAL	1
1	A	152	GLN	1
1	A	84	LEU	1
1	A	205	GLN	1
1	A	167	TYR	1
1	A	216	LYS	1
1	A	88	ASP	1
1	A	196	GLU	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 89% for the well-defined parts and 87% 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	2058
Number of shifts mapped to atoms	1853
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	205
Number of shifts with mapping warnings	0
Number of shift outliers (ShiftChecker)	11

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

- No matching atom found in the structure. All 205 occurrences are reported below.

List ID	Chain	Res	Type	Atom	Shift Data		
					Value	Uncertainty	Ambiguity
1	A	71	PRO	HB2	1.942	.	.
1	A	71	PRO	HD2	3.555	.	.
1	A	71	PRO	HG2	2.006	.	.
1	A	72	LEU	HB2	1.613	.	.
1	A	74	SER	HB2	3.85	.	.
1	A	75	GLU	HB2	1.974	.	.
1	A	75	GLU	HG2	2.301	.	.
1	A	76	GLU	HB2	2.061	.	.
1	A	76	GLU	HG2	2.335	.	.
1	A	78	PHE	HB2	2.128	.	.
1	A	79	LEU	HB2	1.172	.	.
1	A	80	LYS	HE2	2.139	.	.
1	A	80	LYS	HG2	0.994	.	.
1	A	80	LYS	HB2	1.554	.	.

Continued on next page...

Continued from previous page...

List ID	Chain	Res	Type	Atom	Shift Data		
					Value	Uncertainty	Ambiguity
1	A	80	LYS	HD2	1.411	.	.
1	A	81	PHE	HB2	2.904	.	.
1	A	83	ILE	HG12	1.952	.	.
1	A	84	LEU	HB2	1.082	.	.
1	A	85	HIS	HB2	2.932	.	.
1	A	87	GLU	HB2	2.11	.	.
1	A	87	GLU	HG2	2.383	.	.
1	A	88	ASP	HB2	2.318	.	.
1	A	89	ASP	HB2	2.891	.	.
1	A	91	ASP	HB2	2.613	.	.
1	A	92	GLU	HB2	1.839	.	.
1	A	92	GLU	HG2	2.252	.	.
1	A	94	LEU	HB2	1.527	.	.
1	A	95	ARG	HB2	1.503	.	.
1	A	95	ARG	HD2	3.462	.	.
1	A	95	ARG	HG2	1.004	.	.
1	A	97	GLN	HB2	1.958	.	.
1	A	97	GLN	HG2	2.097	.	.
1	A	98	ASN	HB2	2.827	.	.
1	A	99	LEU	HB2	1.722	.	.
1	A	100	LEU	HB2	0.775	.	.
1	A	101	GLN	HB2	1.931	.	.
1	A	101	GLN	HG2	2.908	.	.
1	A	102	ASP	HB2	2.615	.	.
1	A	103	ASP	HB2	2.088	.	.
1	A	104	PHE	HB2	3.175	.	.
1	A	106	ILE	HG12	0.932	.	.
1	A	107	LYS	HB2	1.635	.	.
1	A	107	LYS	HD2	1.564	.	.
1	A	107	LYS	HE2	2.878	.	.
1	A	107	LYS	HG2	1.235	.	.
1	A	108	PRO	HB2	1.63	.	.
1	A	108	PRO	HD2	3.528	.	.
1	A	108	PRO	HG2	1.256	.	.
1	A	110	ILE	HG12	1.338	.	.
1	A	111	ILE	HG12	1.417	.	.
1	A	112	PHE	HB2	2.999	.	.
1	A	114	GLU	HG2	2.194	.	.
1	A	114	GLU	HB2	2.304	.	.
1	A	115	MET	HB2	1.686	.	.
1	A	115	MET	HG2	2.373	.	.

Continued on next page...

Continued from previous page...

List ID	Chain	Res	Type	Atom	Shift Data		
					Value	Uncertainty	Ambiguity
1	A	116	PRO	HB2	1.79	.	.
1	A	116	PRO	HD2	3.546	.	.
1	A	116	PRO	HG2	1.97	.	.
1	A	117	HIS	HB2	3.107	.	.
1	A	120	GLN	HG2	2.202	.	.
1	A	120	GLN	HB2	1.889	.	.
1	A	121	HIS	HB2	3.096	.	.
1	A	122	LEU	HB2	1.527	.	.
1	A	123	GLN	HG2	2.069	.	.
1	A	123	GLN	HB2	1.921	.	.
1	A	125	LEU	HB2	0.448	.	.
1	A	126	ASP	HB2	2.572	.	.
1	A	127	ASP	HB2	2.842	.	.
1	A	130	ASN	HB2	3.368	.	.
1	A	132	SER	HB2	3.294	.	.
1	A	134	TRP	HB2	2.979	.	.
1	A	136	ILE	HG12	0.995	.	.
1	A	137	LEU	HB2	1.046	.	.
1	A	138	LEU	HB2	0.992	.	.
1	A	139	LEU	HB2	1.046	.	.
1	A	141	GLU	HB2	1.946	.	.
1	A	141	GLU	HG2	2.246	.	.
1	A	142	ASN	HB2	2.73	.	.
1	A	143	PHE	HB2	3.644	.	.
1	A	144	LEU	HB2	1.661	.	.
1	A	145	ARG	HD2	3.213	.	.
1	A	145	ARG	HB2	1.924	.	.
1	A	145	ARG	HG2	1.767	.	.
1	A	146	ASP	HB2	2.784	.	.
1	A	148	TRP	HB2	2.821	.	.
1	A	149	CYS	HB2	2.939	.	.
1	A	150	ASN	HB2	3.314	.	.
1	A	151	PHE	HB2	2.626	.	.
1	A	152	GLN	HB2	1.513	.	.
1	A	152	GLN	HG2	0.906	.	.
1	A	153	PHE	HB2	2.428	.	.
1	A	154	TYR	HB2	2.549	.	.
1	A	156	SER	HB2	3.902	.	.
1	A	157	LEU	HB2	1.097	.	.
1	A	158	MET	HG2	2.594	.	.
1	A	159	ASN	HB2	2.367	.	.

Continued on next page...

Continued from previous page...

List ID	Chain	Res	Type	Atom	Shift Data		
					Value	Uncertainty	Ambiguity
1	A	160	SER	HB2	3.693	.	.
1	A	162	ASN	HB2	2.808	.	.
1	A	163	ARG	HB2	1.743	.	.
1	A	163	ARG	HG2	2.186	.	.
1	A	163	ARG	HD2	3.339	.	.
1	A	164	GLN	HB2	1.722	.	.
1	A	164	GLN	HG2	2.314	.	.
1	A	165	HIS	HB2	3.59	.	.
1	A	166	LYS	HB2	1.662	.	.
1	A	166	LYS	HG2	1.462	.	.
1	A	166	LYS	HD2	1.659	.	.
1	A	166	LYS	HE2	2.97	.	.
1	A	167	TYR	HB2	2.705	.	.
1	A	168	ASN	HB2	2.544	.	.
1	A	169	SER	HB2	3.7	.	.
1	A	171	ILE	HG12	1.195	.	.
1	A	172	PRO	HD2	3.766	.	.
1	A	172	PRO	HG2	1.76	.	.
1	A	172	PRO	HB2	1.724	.	.
1	A	173	MET	HB2	1.57	.	.
1	A	173	MET	HG2	1.913	.	.
1	A	174	ARG	HB2	1.628	.	.
1	A	174	ARG	HD2	2.859	.	.
1	A	175	PRO	HB2	1.28	.	.
1	A	175	PRO	HD2	3.598	.	.
1	A	175	PRO	HG2	0.777	.	.
1	A	176	LEU	HB2	1.176	.	.
1	A	177	ASN	HB2	2.288	.	.
1	A	178	ASN	HB2	2.812	.	.
1	A	179	PRO	HD2	3.214	.	.
1	A	180	LEU	HB2	0.674	.	.
1	A	181	PRO	HB2	1.606	.	.
1	A	181	PRO	HD2	3.451	.	.
1	A	181	PRO	HG2	2.048	.	.
1	A	182	ARG	HG2	1.503	.	.
1	A	182	ARG	HB2	1.727	.	.
1	A	182	ARG	HD2	3.179	.	.
1	A	183	GLU	HG2	2.264	.	.
1	A	183	GLU	HB2	2.039	.	.
1	A	184	ARG	HB2	1.311	.	.
1	A	184	ARG	HD2	2.988	.	.

Continued on next page...

Continued from previous page...

List ID	Chain	Res	Type	Atom	Shift Data		
					Value	Uncertainty	Ambiguity
1	A	184	ARG	HG2	1.529	.	.
1	A	186	PRO	HD2	2.864	.	.
1	A	186	PRO	HG2	1.627	.	.
1	A	186	PRO	HB2	2.133	.	.
1	A	187	PHE	HB2	3.066	.	.
1	A	189	LEU	HB2	1.295	.	.
1	A	190	GLN	HB2	1.919	.	.
1	A	190	GLN	HG2	2.176	.	.
1	A	192	ILE	HG12	1.049	.	.
1	A	193	ASN	HB2	2.704	.	.
1	A	195	LEU	HB2	1.475	.	.
1	A	196	GLU	HG2	1.99	.	.
1	A	196	GLU	HB2	2.035	.	.
1	A	197	GLU	HG2	0.98	.	.
1	A	197	GLU	HB2	1.291	.	.
1	A	198	GLU	HB2	0.682	.	.
1	A	198	GLU	HG2	2.051	.	.
1	A	199	SER	HB2	4.021	.	.
1	A	200	ARG	HG2	1.797	.	.
1	A	200	ARG	HB2	1.935	.	.
1	A	200	ARG	HD2	3.281	.	.
1	A	202	PHE	HB2	3.22	.	.
1	A	203	PRO	HB2	2.028	.	.
1	A	203	PRO	HD2	3.915	.	.
1	A	203	PRO	HG2	2.25	.	.
1	A	205	GLN	HB2	1.843	.	.
1	A	205	GLN	HG2	2.285	.	.
1	A	207	GLU	HG2	2.22	.	.
1	A	207	GLU	HB2	2.068	.	.
1	A	208	ARG	HB2	1.803	.	.
1	A	208	ARG	HG2	1.621	.	.
1	A	208	ARG	HD2	3.113	.	.
1	A	209	ILE	HG12	0.716	.	.
1	A	210	PHE	HB2	2.48	.	.
1	A	211	GLN	HB2	1.971	.	.
1	A	211	GLN	HG2	2.503	.	.
1	A	212	GLU	HB2	2.146	.	.
1	A	212	GLU	HG2	2.473	.	.
1	A	213	SER	HB2	4.012	.	.
1	A	215	TYR	HB2	3.505	.	.
1	A	216	LYS	HB2	1.946	.	.

Continued on next page...

Continued from previous page...

List ID	Chain	Res	Type	Atom	Shift Data		
					Value	Uncertainty	Ambiguity
1	A	216	LYS	HG2	1.648	.	.
1	A	216	LYS	HD2	1.792	.	.
1	A	216	LYS	HE2	3.103	.	.
1	A	218	GLN	HG2	2.702	.	.
1	A	219	GLN	HB2	1.334	.	.
1	A	219	GLN	HG2	1.924	.	.
1	A	221	ILE	HG12	1.083	.	.
1	A	222	TRP	HB2	1.316	.	.
1	A	223	LYS	HB2	1.781	.	.
1	A	223	LYS	HE2	2.89	.	.
1	A	223	LYS	HG2	1.329	.	.
1	A	223	LYS	HD2	1.606	.	.
1	A	224	GLU	HG2	2.229	.	.
1	A	224	GLU	HB2	2.095	.	.
1	A	226	ARG	HB2	1.328	.	.
1	A	226	ARG	HD2	2.251	.	.
1	A	226	ARG	HG2	0.952	.	.
1	A	227	ASN	HB2	2.687	.	.
1	A	228	MET	HB2	1.978	.	.
1	A	228	MET	HG2	2.5	.	.
1	A	230	GLN	HB2	1.999	.	.
1	A	230	GLN	HG2	2.354	.	.
1	A	231	ARG	HD2	3.213	.	.
1	A	232	GLN	HB2	2.009	.	.
1	A	232	GLN	HG2	2.3	.	.
1	A	233	PHE	HB2	3.0	.	.
1	A	234	ILE	HG12	1.105	.	.

7.1.2 Chemical shift referencing (i)

The following table shows the suggested chemical shift referencing corrections.

Nucleus	# values	Correction ± precision, *ppm*	Suggested action
$^{13}C_{\alpha}$	161	-0.23 ± 0.08	None needed (< 0.5 ppm)
$^{13}C_{\beta}$	154	0.21 ± 0.06	None needed (< 0.5 ppm)
$^{13}C'$	149	0.13 ± 0.11	None needed (< 0.5 ppm)
^{15}N	141	0.14 ± 0.28	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 89%, i.e. 1777 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 2000. 0 out of 23 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	^{1}H	^{13}C	^{15}N
Backbone	663/688 (96%)	271/276 (98%)	270/280 (96%)	122/132 (92%)
Sidechain	1012/1135 (89%)	686/734 (93%)	307/353 (87%)	19/48 (40%)
Aromatic	102/177 (58%)	71/88 (81%)	28/84 (33%)	3/5 (60%)
Overall	1777/2000 (89%)	1028/1098 (94%)	605/717 (84%)	144/185 (78%)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 87%, i.e. 2055 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 2367. 0 out of 26 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	^{1}H	^{13}C	^{15}N
Backbone	769/819 (94%)	318/330 (96%)	310/332 (93%)	141/157 (90%)
Sidechain	1170/1347 (87%)	793/869 (91%)	352/415 (85%)	25/63 (40%)
Aromatic	116/201 (58%)	79/101 (78%)	34/93 (37%)	3/7 (43%)
Overall	2055/2367 (87%)	1190/1300 (92%)	696/840 (83%)	169/227 (74%)

7.1.4 Statistically unusual chemical shifts (i)

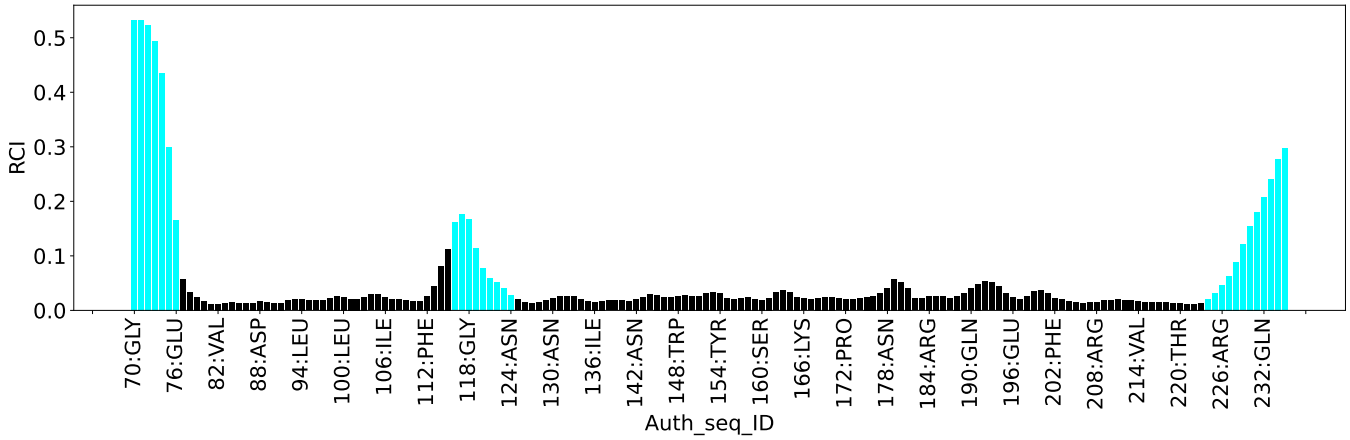
The following table lists the statistically unusual chemical shifts. These are statistical measures, and large deviations from the mean do not necessarily imply incorrect assignments. Molecules containing paramagnetic centres or hemes are expected to give rise to anomalous chemical shifts.

List Id	Chain	Res	Type	Atom	Shift, *ppm*	Expected range, *ppm*	Z-score
1	A	90	THR	HG1	6.53	0.08 – 2.19	25.5
1	A	185	THR	HG1	5.12	0.08 – 2.19	18.9
1	A	109	GLY	HA3	1.32	2.08 – 5.71	-7.1
1	A	198	GLU	HB2	0.68	1.00 – 3.05	-6.5
1	A	197	GLU	HG2	0.98	1.24 – 3.30	-6.2
1	A	222	TRP	HB2	1.32	1.51 – 4.87	-5.6
1	A	174	ARG	CD	38.16	38.57 – 47.75	-5.4
1	A	152	GLN	HG2	0.91	1.01 – 3.62	-5.4
1	A	209	ILE	HG21	-0.60	-0.56 – 2.11	-5.2
1	A	209	ILE	HG22	-0.60	-0.56 – 2.11	-5.2
1	A	209	ILE	HG23	-0.60	-0.56 – 2.11	-5.2

7.1.5 Random Coil Index (RCI) plots (i)

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

Random coil index (RCI) for chain A:



8 NMR restraints analysis (i)

8.1 Conformationally restricting restraints (i)

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

Description	Value
Total distance restraints	2421
Intra-residue (|i-j|=0)	727
Sequential (|i-j|=1)	568
Medium range (|i-j|>1 and |i-j|<5)	482
Long range (|i-j|≥5)	644
Inter-chain	0
Hydrogen bond restraints	0
Disulfide bond restraints	0
Total dihedral-angle restraints	0
Number of unmapped restraints	960
Number of restraints per residue	14.6
Number of long range restraints per residue[1]	3.9

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

8.2 Residual restraint violations (i)

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

8.2.1 Average number of distance violations per model (i)

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

Bins (Å)	Average number of violations per model	Max (Å)
0.1-0.2 (Small)	43.0	0.2
0.2-0.5 (Medium)	94.6	0.5
>0.5 (Large)	110.3	2.69

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

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

9 Distance violation analysis (i)

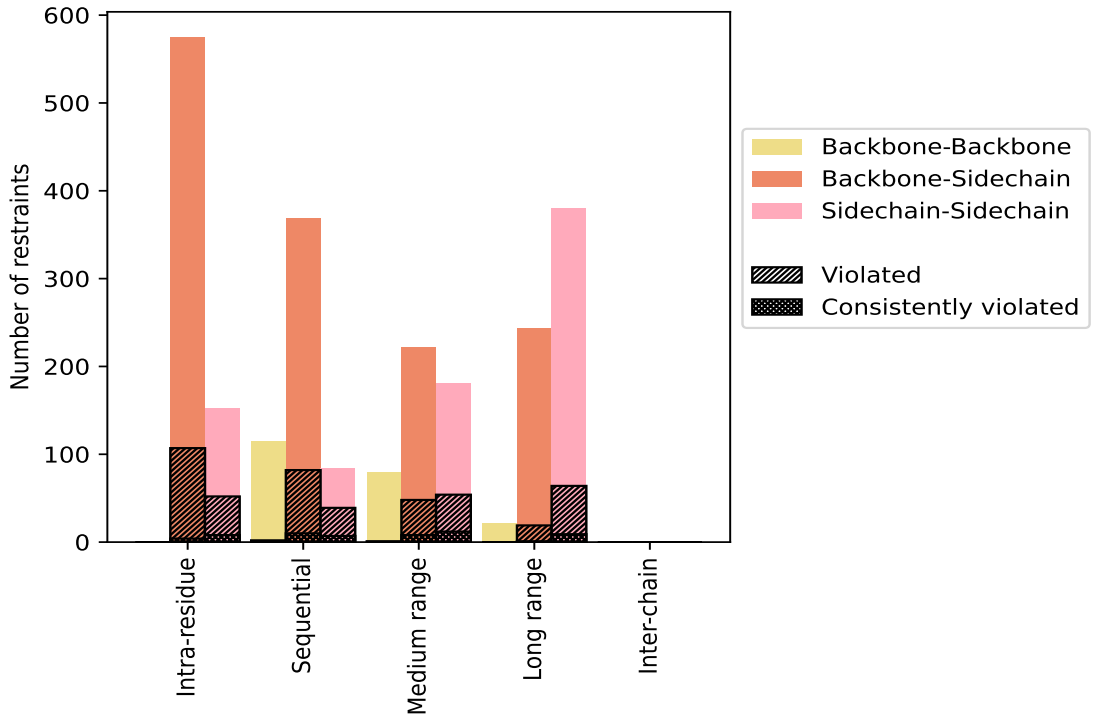
9.1 Summary of distance violations (i)

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

Restraints type	Count	%[1]	Violated[3]			Consistently Violated[4]		
			Count	%[2]	%[1]	Count	%[2]	%[1]
Intra-residue (|i-j|=0)	727	30.0	159	21.9	6.6	12	1.7	0.5
Backbone-Backbone	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	575	23.8	107	18.6	4.4	4	0.7	0.2
Sidechain-Sidechain	152	6.3	52	34.2	2.1	8	5.3	0.3
Sequential (|i-j|=1)	568	23.5	123	21.7	5.1	17	3.0	0.7
Backbone-Backbone	115	4.8	2	1.7	0.1	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	369	15.2	82	22.2	3.4	10	2.7	0.4
Sidechain-Sidechain	84	3.5	39	46.4	1.6	7	8.3	0.3
Medium range (|i-j|>1 & |i-j|<5)	482	19.9	103	21.4	4.3	20	4.1	0.8
Backbone-Backbone	79	3.3	1	1.3	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	222	9.2	48	21.6	2.0	8	3.6	0.3
Sidechain-Sidechain	181	7.5	54	29.8	2.2	12	6.6	0.5
Long range (|i-j|≥5)	644	26.6	83	12.9	3.4	10	1.6	0.4
Backbone-Backbone	21	0.9	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	243	10.0	19	7.8	0.8	1	0.4	0.0
Sidechain-Sidechain	380	15.7	64	16.8	2.6	9	2.4	0.4
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	0	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	2421	100.0	468	19.3	19.3	59	2.4	2.4
Backbone-Backbone	215	8.9	3	1.4	0.1	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	1409	58.2	256	18.2	10.6	23	1.6	1.0
Sidechain-Sidechain	797	32.9	209	26.2	8.6	36	4.5	1.5

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

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



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

9.2 Distance violation statistics for each model (i)

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

Model ID	Number of violations						Mean (Å)	Max (Å)	SD[6] (Å)	Median (Å)
	IR[1]	SQ[2]	MR[3]	LR[4]	IC[5]	Total				
1	78	71	57	30	0	236	0.57	2.32	0.4	0.5
2	71	64	54	36	0	225	0.55	1.75	0.36	0.45
3	93	75	57	35	0	260	0.55	2.36	0.41	0.41
4	86	73	59	39	0	257	0.55	2.22	0.39	0.44
5	90	77	55	40	0	262	0.54	2.15	0.38	0.41
6	86	69	60	43	0	258	0.58	2.54	0.4	0.49
7	80	76	57	43	0	256	0.55	2.02	0.39	0.44
8	84	70	60	39	0	253	0.56	2.45	0.4	0.44
9	81	57	50	37	0	225	0.56	2.46	0.4	0.45
10	93	65	57	45	0	260	0.55	2.16	0.39	0.44
11	88	71	62	34	0	255	0.55	2.69	0.4	0.45

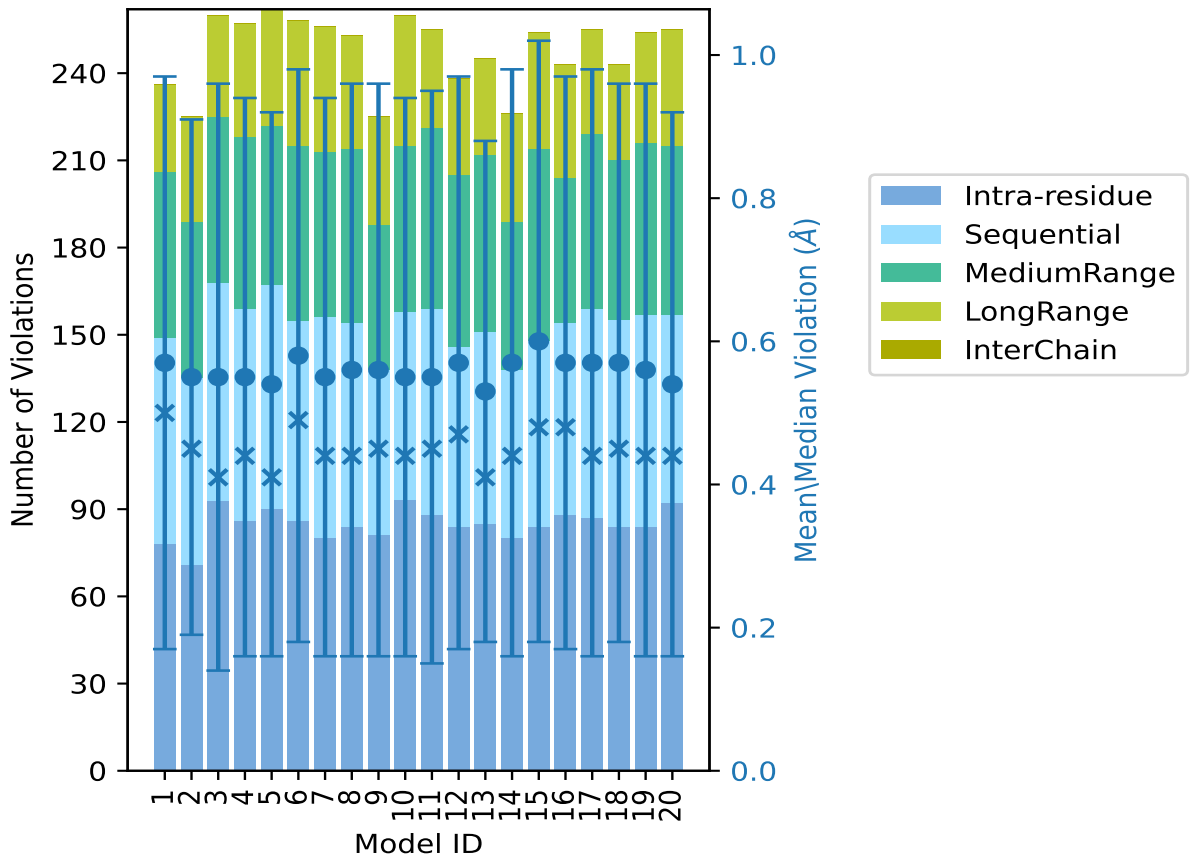
Continued on next page...

Continued from previous page...

Model ID	Number of violations						Mean (Å)	Max (Å)	SD[6] (Å)	Median (Å)
	IR[1]	SQ[2]	MR[3]	LR[4]	IC[5]	Total				
12	84	62	59	33	0	238	0.57	2.28	0.4	0.47
13	85	66	61	33	0	245	0.53	1.9	0.35	0.41
14	80	58	51	37	0	226	0.57	2.4	0.41	0.44
15	84	64	66	40	0	254	0.6	2.26	0.42	0.48
16	88	66	50	39	0	243	0.57	2.36	0.4	0.48
17	87	72	60	36	0	255	0.57	2.46	0.41	0.44
18	84	71	55	33	0	243	0.57	2.45	0.39	0.45
19	84	73	59	38	0	254	0.56	2.57	0.4	0.44
20	92	65	58	40	0	255	0.54	2.29	0.38	0.44

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

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



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

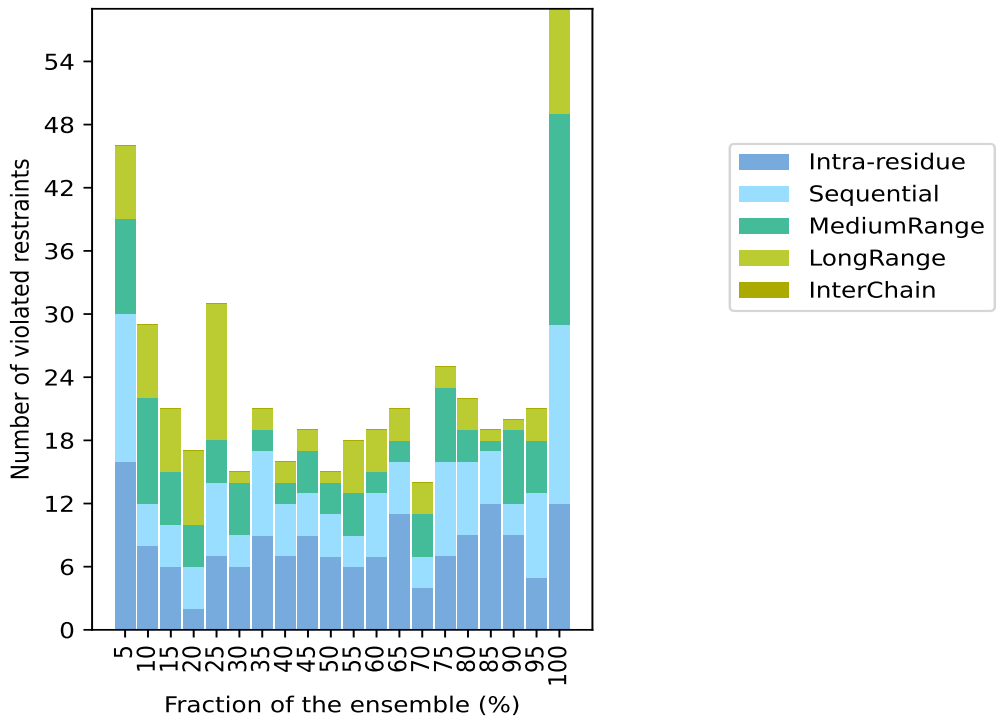
9.3 Distance violation statistics for the ensemble (i)

Violation analysis may find that some restraints are violated in few models and some are violated in most of models. The following table provides this information as number of violated restraints for a given fraction of the ensemble. In total, 1953(IR:568, SQ:445, MR:379, LR:561, 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]	%
16	14	9	7	0	46	1	5.0
8	4	10	7	0	29	2	10.0
6	4	5	6	0	21	3	15.0
2	4	4	7	0	17	4	20.0
7	7	4	13	0	31	5	25.0
6	3	5	1	0	15	6	30.0
9	8	2	2	0	21	7	35.0
7	5	2	2	0	16	8	40.0
9	4	4	2	0	19	9	45.0
7	4	3	1	0	15	10	50.0
6	3	4	5	0	18	11	55.0
7	6	2	4	0	19	12	60.0
11	5	2	3	0	21	13	65.0
4	3	4	3	0	14	14	70.0
7	9	7	2	0	25	15	75.0
9	7	3	3	0	22	16	80.0
12	5	1	1	0	19	17	85.0
9	3	7	1	0	20	18	90.0
5	8	5	3	0	21	19	95.0
12	17	20	10	0	59	20	100.0

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

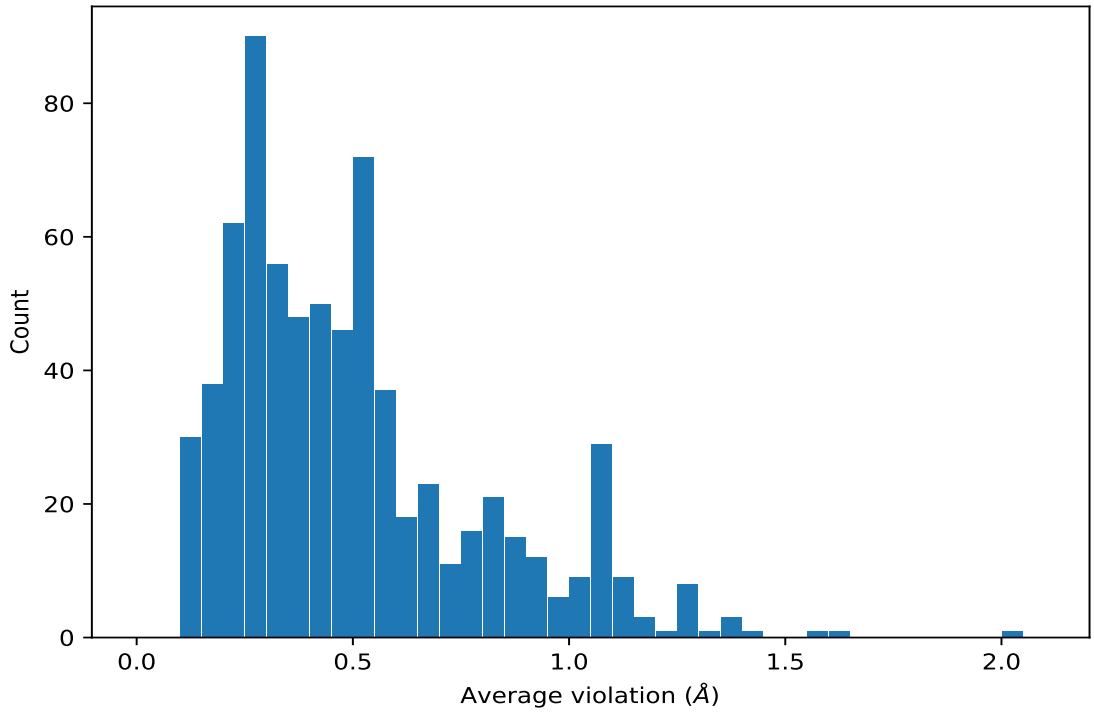
9.3.1 Bar graph : Distance violation statistics for the ensemble (i)



9.4 Most violated distance restraints in the ensemble (i)

9.4.1 Histogram : Distribution of mean distance violations (i)

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



9.4.2 Table: Most violated distance restraints (i)

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

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(1,2197)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:184:ARG:HD3	20	2.05	0.44	2.12
(1,1241)	1:A:206:VAL:HB	1:A:210:PHE:HB3	20	1.6	0.08	1.6
(1,1346)	1:A:145:ARG:HB3	1:A:146:ASP:HB3	20	1.55	0.3	1.58
(1,261)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:185:THR:H	20	1.41	0.23	1.36
(1,1468)	1:A:100:LEU:HA	1:A:104:PHE:HB3	20	1.38	0.1	1.4
(1,2389)	1:A:223:LYS:HE3	1:A:224:GLU:HB3	20	1.29	0.72	1.28
(1,309)	1:A:223:LYS:H	1:A:224:GLU:HB3	20	1.27	0.29	1.42
(1,1268)	1:A:210:PHE:HA	1:A:211:GLN:HG3	20	1.26	0.24	1.34
(1,967)	1:A:204:THR:HG21	1:A:207:GLU:HB3	20	1.25	0.15	1.27
(1,967)	1:A:204:THR:HG22	1:A:207:GLU:HB3	20	1.25	0.15	1.27
(1,967)	1:A:204:THR:HG23	1:A:207:GLU:HB3	20	1.25	0.15	1.27
(1,687)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:HG21	20	1.19	0.09	1.18
(1,687)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:HG22	20	1.19	0.09	1.18
(1,687)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:HG23	20	1.19	0.09	1.18
(1,1359)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HD11	20	1.14	0.43	1.37
(1,1359)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HD12	20	1.14	0.43	1.37

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(1,1359)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HD13	20	1.14	0.43	1.37
(1,2143)	1:A:173:MET:HE1	1:A:202:PHE:HB3	20	1.1	0.2	1.12
(1,2143)	1:A:173:MET:HE2	1:A:202:PHE:HB3	20	1.1	0.2	1.12
(1,2143)	1:A:173:MET:HE3	1:A:202:PHE:HB3	20	1.1	0.2	1.12
(1,688)	1:A:106:ILE:HG21	1:A:108:PRO:HD3	20	1.08	0.06	1.09
(1,688)	1:A:106:ILE:HG22	1:A:108:PRO:HD3	20	1.08	0.06	1.09
(1,688)	1:A:106:ILE:HG23	1:A:108:PRO:HD3	20	1.08	0.06	1.09
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG11	1:A:112:PHE:HB3	20	1.08	0.2	1.15
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG12	1:A:112:PHE:HB3	20	1.08	0.2	1.15
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG13	1:A:112:PHE:HB3	20	1.08	0.2	1.15
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG21	1:A:112:PHE:HB3	20	1.08	0.2	1.15
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG22	1:A:112:PHE:HB3	20	1.08	0.2	1.15
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG23	1:A:112:PHE:HB3	20	1.08	0.2	1.15
(1,802)	1:A:113:ALA:HB1	1:A:114:GLU:HB3	20	1.07	0.1	1.1
(1,802)	1:A:113:ALA:HB2	1:A:114:GLU:HB3	20	1.07	0.1	1.1
(1,802)	1:A:113:ALA:HB3	1:A:114:GLU:HB3	20	1.07	0.1	1.1
(1,1402)	1:A:195:LEU:HA	1:A:196:GLU:HB3	20	1.07	0.02	1.08
(1,753)	1:A:133:ALA:HB1	1:A:215:TYR:HB3	20	1.06	0.28	1.11
(1,753)	1:A:133:ALA:HB2	1:A:215:TYR:HB3	20	1.06	0.28	1.11
(1,753)	1:A:133:ALA:HB3	1:A:215:TYR:HB3	20	1.06	0.28	1.11
(1,198)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:184:ARG:H	20	1.04	0.19	1.08
(1,1229)	1:A:204:THR:HA	1:A:207:GLU:HB3	20	1.04	0.09	1.04
(1,1555)	1:A:202:PHE:HA	1:A:205:GLN:HB3	20	0.97	0.09	1.0
(1,983)	1:A:186:PRO:HB3	1:A:189:LEU:HD21	20	0.91	0.04	0.92
(1,983)	1:A:186:PRO:HB3	1:A:189:LEU:HD22	20	0.91	0.04	0.92
(1,983)	1:A:186:PRO:HB3	1:A:189:LEU:HD23	20	0.91	0.04	0.92
(1,1269)	1:A:208:ARG:HA	1:A:211:GLN:HG3	20	0.9	0.08	0.9
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD11	1:A:104:PHE:HB3	20	0.89	0.11	0.9
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD12	1:A:104:PHE:HB3	20	0.89	0.11	0.9
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD13	1:A:104:PHE:HB3	20	0.89	0.11	0.9
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD21	1:A:104:PHE:HB3	20	0.89	0.11	0.9
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD22	1:A:104:PHE:HB3	20	0.89	0.11	0.9
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD23	1:A:104:PHE:HB3	20	0.89	0.11	0.9
(1,1619)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD1	20	0.86	0.19	0.86
(1,1619)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD2	20	0.86	0.19	0.86
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:108:PRO:HD3	20	0.85	0.25	0.96
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:108:PRO:HD3	20	0.85	0.25	0.96
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:108:PRO:HD3	20	0.85	0.25	0.96
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:108:PRO:HD3	20	0.85	0.25	0.96
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:108:PRO:HD3	20	0.85	0.25	0.96
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:108:PRO:HD3	20	0.85	0.25	0.96
(1,2000)	1:A:141:GLU:HG3	1:A:180:LEU:HB3	20	0.85	0.16	0.91

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(1,2004)	1:A:144:LEU:HA	1:A:148:TRP:HB3	20	0.84	0.52	0.72
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG11	20	0.82	0.09	0.86
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG12	20	0.82	0.09	0.86
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG13	20	0.82	0.09	0.86
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG21	20	0.82	0.09	0.86
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG22	20	0.82	0.09	0.86
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG23	20	0.82	0.09	0.86
(1,2212)	1:A:184:ARG:HG3	1:A:185:THR:H	20	0.78	0.21	0.7
(1,1648)	1:A:76:GLU:HB3	1:A:76:GLU:HG3	20	0.76	0.06	0.79
(1,1360)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HG13	20	0.73	0.26	0.81
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:108:PRO:HG3	20	0.69	0.2	0.72
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:108:PRO:HG3	20	0.69	0.2	0.72
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:108:PRO:HG3	20	0.69	0.2	0.72
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:108:PRO:HG3	20	0.69	0.2	0.72
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:108:PRO:HG3	20	0.69	0.2	0.72
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:108:PRO:HG3	20	0.69	0.2	0.72
(1,2186)	1:A:180:LEU:HG	1:A:181:PRO:HD3	20	0.67	0.03	0.67
(1,1856)	1:A:101:GLN:HG3	1:A:109:GLY:H	20	0.65	0.14	0.69
(1,2277)	1:A:196:GLU:HB3	1:A:196:GLU:HG3	20	0.62	0.09	0.65
(1,856)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG21	20	0.61	0.26	0.62
(1,856)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG22	20	0.61	0.26	0.62
(1,856)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG23	20	0.61	0.26	0.62
(1,628)	1:A:111:ILE:HD11	1:A:114:GLU:HB3	20	0.59	0.15	0.62
(1,628)	1:A:111:ILE:HD12	1:A:114:GLU:HB3	20	0.59	0.15	0.62
(1,628)	1:A:111:ILE:HD13	1:A:114:GLU:HB3	20	0.59	0.15	0.62
(1,2296)	1:A:200:ARG:HG3	1:A:200:ARG:HD3	20	0.58	0.21	0.74
(1,27)	1:A:108:PRO:HD3	1:A:109:GLY:H	20	0.56	0.02	0.56
(1,1231)	1:A:111:ILE:HG21	1:A:114:GLU:HB3	20	0.55	0.3	0.42
(1,1231)	1:A:111:ILE:HG22	1:A:114:GLU:HB3	20	0.55	0.3	0.42
(1,1231)	1:A:111:ILE:HG23	1:A:114:GLU:HB3	20	0.55	0.3	0.42
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD11	1:A:202:PHE:HB3	20	0.52	0.11	0.52
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD12	1:A:202:PHE:HB3	20	0.52	0.11	0.52
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD13	1:A:202:PHE:HB3	20	0.52	0.11	0.52
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD21	1:A:202:PHE:HB3	20	0.52	0.11	0.52
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD22	1:A:202:PHE:HB3	20	0.52	0.11	0.52
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD23	1:A:202:PHE:HB3	20	0.52	0.11	0.52
(1,56)	1:A:203:PRO:HG3	1:A:204:THR:H	20	0.52	0.08	0.5
(1,2279)	1:A:196:GLU:HG3	1:A:197:GLU:H	20	0.51	0.1	0.53
(1,183)	1:A:207:GLU:H	1:A:207:GLU:HB3	20	0.5	0.02	0.5
(1,478)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:182:ARG:H	20	0.43	0.08	0.42
(1,2295)	1:A:200:ARG:HB3	1:A:200:ARG:HG3	20	0.42	0.19	0.3
(1,1618)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD1	20	0.4	0.08	0.39

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(1,1618)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD2	20	0.4	0.08	0.39
(1,13)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:105:GLY:H	20	0.37	0.09	0.35
(1,952)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG11	20	0.36	0.15	0.32
(1,952)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG12	20	0.36	0.15	0.32
(1,952)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG13	20	0.36	0.15	0.32
(1,79)	1:A:98:ASN:HB3	1:A:98:ASN:HD22	20	0.35	0.03	0.34
(1,1646)	1:A:76:GLU:HA	1:A:76:GLU:HB3	20	0.34	0.08	0.39
(1,1894)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:121:HIS:HE1	20	0.3	0.17	0.22
(1,1285)	1:A:75:GLU:H	1:A:75:GLU:HG3	20	0.3	0.08	0.31
(1,449)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:H	20	0.3	0.14	0.26
(1,1282)	1:A:183:GLU:HB3	1:A:183:GLU:HG3	20	0.27	0.01	0.27
(1,2325)	1:A:212:GLU:H	1:A:212:GLU:HG3	20	0.25	0.04	0.26
(1,1366)	1:A:70:GLY:HA2	1:A:71:PRO:HG3	20	0.24	0.07	0.21
(1,1366)	1:A:70:GLY:HA3	1:A:71:PRO:HG3	20	0.24	0.07	0.21
(1,1989)	1:A:140:THR:HG21	1:A:143:PHE:HB3	20	0.18	0.03	0.18
(1,1989)	1:A:140:THR:HG22	1:A:143:PHE:HB3	20	0.18	0.03	0.18
(1,1989)	1:A:140:THR:HG23	1:A:143:PHE:HB3	20	0.18	0.03	0.18
(1,1362)	1:A:208:ARG:HG3	1:A:208:ARG:HD3	20	0.17	0.01	0.17
(1,2202)	1:A:183:GLU:HB3	1:A:184:ARG:HD3	19	1.3	0.56	1.52
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG11	19	1.06	0.4	1.17
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG12	19	1.06	0.4	1.17
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG13	19	1.06	0.4	1.17
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG21	19	1.06	0.4	1.17
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG22	19	1.06	0.4	1.17
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG23	19	1.06	0.4	1.17
(1,2224)	1:A:187:PHE:HB3	1:A:188:ALA:HA	19	1.05	0.31	1.16
(1,955)	1:A:220:THR:HG21	1:A:224:GLU:HB3	19	1.04	0.11	1.05
(1,955)	1:A:220:THR:HG22	1:A:224:GLU:HB3	19	1.04	0.11	1.05
(1,955)	1:A:220:THR:HG23	1:A:224:GLU:HB3	19	1.04	0.11	1.05
(1,1993)	1:A:141:GLU:H	1:A:180:LEU:HB3	19	0.94	0.34	0.98
(1,2392)	1:A:224:GLU:HA	1:A:227:ASN:HB3	19	0.92	0.37	0.85
(1,445)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:H	19	0.59	0.17	0.62
(1,2105)	1:A:167:TYR:H	1:A:221:ILE:HG13	19	0.59	0.37	0.54
(1,2139)	1:A:172:PRO:HD3	1:A:194:ALA:HB1	19	0.56	0.13	0.6
(1,2139)	1:A:172:PRO:HD3	1:A:194:ALA:HB2	19	0.56	0.13	0.6
(1,2139)	1:A:172:PRO:HD3	1:A:194:ALA:HB3	19	0.56	0.13	0.6
(1,2290)	1:A:198:GLU:HB3	1:A:198:GLU:HG3	19	0.54	0.16	0.62
(1,2123)	1:A:171:ILE:HG21	1:A:172:PRO:HD3	19	0.52	0.13	0.57
(1,2123)	1:A:171:ILE:HG22	1:A:172:PRO:HD3	19	0.52	0.13	0.57
(1,2123)	1:A:171:ILE:HG23	1:A:172:PRO:HD3	19	0.52	0.13	0.57
(1,2393)	1:A:224:GLU:HB3	1:A:224:GLU:HG3	19	0.49	0.2	0.61
(1,391)	1:A:230:GLN:H	1:A:230:GLN:HG3	19	0.43	0.08	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG11	1:A:230:GLN:HG3	19	0.43	0.23	0.34
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG12	1:A:230:GLN:HG3	19	0.43	0.23	0.34
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG13	1:A:230:GLN:HG3	19	0.43	0.23	0.34
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG21	1:A:230:GLN:HG3	19	0.43	0.23	0.34
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG22	1:A:230:GLN:HG3	19	0.43	0.23	0.34
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG23	1:A:230:GLN:HG3	19	0.43	0.23	0.34
(1,828)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:HB1	19	0.41	0.22	0.33
(1,828)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:HB2	19	0.41	0.22	0.33
(1,828)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:HB3	19	0.41	0.22	0.33
(1,1312)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:H	19	0.39	0.14	0.37
(1,616)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:83:ILE:HD11	19	0.36	0.13	0.34
(1,616)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:83:ILE:HD12	19	0.36	0.13	0.34
(1,616)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:83:ILE:HD13	19	0.36	0.13	0.34
(1,2208)	1:A:184:ARG:HA	1:A:184:ARG:HG3	19	0.34	0.03	0.35
(1,1998)	1:A:141:GLU:HB3	1:A:142:ASN:H	19	0.32	0.11	0.34
(1,215)	1:A:224:GLU:H	1:A:224:GLU:HB3	19	0.31	0.05	0.33
(1,642)	1:A:209:ILE:HG21	1:A:210:PHE:HB3	19	0.2	0.07	0.19
(1,642)	1:A:209:ILE:HG22	1:A:210:PHE:HB3	19	0.2	0.07	0.19
(1,642)	1:A:209:ILE:HG23	1:A:210:PHE:HB3	19	0.2	0.07	0.19
(1,1634)	1:A:71:PRO:HB3	1:A:74:SER:HA	18	1.1	0.23	1.11
(1,953)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG11	18	0.99	0.01	0.99
(1,953)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG12	18	0.99	0.01	0.99
(1,953)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG13	18	0.99	0.01	0.99
(1,1549)	1:A:107:LYS:HE3	1:A:108:PRO:HA	18	0.96	0.35	1.1
(1,2329)	1:A:212:GLU:HG3	1:A:216:LYS:HG3	18	0.89	0.3	0.97
(1,1392)	1:A:107:LYS:HA	1:A:107:LYS:HE3	18	0.85	0.13	0.86
(1,2396)	1:A:226:ARG:HA	1:A:226:ARG:HD3	18	0.63	0.11	0.68
(1,2381)	1:A:223:LYS:HA	1:A:226:ARG:HB3	18	0.57	0.26	0.54
(1,1936)	1:A:134:TRP:HE1	1:A:169:SER:HB3	18	0.52	0.17	0.58
(1,1270)	1:A:211:GLN:H	1:A:211:GLN:HG3	18	0.51	0.03	0.5
(1,2201)	1:A:183:GLU:HA	1:A:183:GLU:HG3	18	0.44	0.11	0.46
(1,1580)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HA	18	0.41	0.03	0.4
(1,2363)	1:A:219:GLN:HG3	1:A:223:LYS:HG3	18	0.4	0.33	0.27
(1,2172)	1:A:177:ASN:HB3	1:A:178:ASN:H	18	0.38	0.18	0.48
(1,1337)	1:A:216:LYS:HD3	1:A:216:LYS:HE3	18	0.37	0.13	0.45
(1,2096)	1:A:166:LYS:H	1:A:166:LYS:HG3	18	0.32	0.06	0.34
(1,2020)	1:A:145:ARG:HB3	1:A:145:ARG:HD3	18	0.32	0.22	0.18
(1,1316)	1:A:209:ILE:HB	1:A:210:PHE:HB3	18	0.31	0.06	0.32
(1,2205)	1:A:184:ARG:H	1:A:184:ARG:HB3	18	0.23	0.05	0.24
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG11	18	0.23	0.06	0.21
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG12	18	0.23	0.06	0.21
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG13	18	0.23	0.06	0.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG21	18	0.23	0.06	0.21
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG22	18	0.23	0.06	0.21
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG23	18	0.23	0.06	0.21
(1,448)	1:A:214:VAL:H	1:A:214:VAL:HG11	18	0.19	0.02	0.19
(1,448)	1:A:214:VAL:H	1:A:214:VAL:HG12	18	0.19	0.02	0.19
(1,448)	1:A:214:VAL:H	1:A:214:VAL:HG13	18	0.19	0.02	0.19
(1,2152)	1:A:176:LEU:HA	1:A:198:GLU:HG3	17	1.27	0.25	1.23
(1,2337)	1:A:214:VAL:HA	1:A:216:LYS:HG3	17	0.75	0.14	0.8
(1,1213)	1:A:165:HIS:HA	1:A:166:LYS:HD3	17	0.68	0.58	0.31
(1,2085)	1:A:163:ARG:HB3	1:A:163:ARG:HD3	17	0.62	0.2	0.61
(1,2225)	1:A:187:PHE:HB3	1:A:188:ALA:HB1	17	0.62	0.04	0.62
(1,2225)	1:A:187:PHE:HB3	1:A:188:ALA:HB2	17	0.62	0.04	0.62
(1,2225)	1:A:187:PHE:HB3	1:A:188:ALA:HB3	17	0.62	0.04	0.62
(1,1325)	1:A:166:LYS:H	1:A:166:LYS:HE3	17	0.58	0.26	0.57
(1,2352)	1:A:216:LYS:HG3	1:A:217:THR:H	17	0.51	0.15	0.48
(1,2126)	1:A:171:ILE:HD11	1:A:172:PRO:HG3	17	0.49	0.16	0.58
(1,2126)	1:A:171:ILE:HD12	1:A:172:PRO:HG3	17	0.49	0.16	0.58
(1,2126)	1:A:171:ILE:HD13	1:A:172:PRO:HG3	17	0.49	0.16	0.58
(1,2082)	1:A:163:ARG:H	1:A:163:ARG:HB3	17	0.44	0.08	0.47
(1,1521)	1:A:182:ARG:HA	1:A:182:ARG:HD3	17	0.37	0.24	0.24
(1,2415)	1:A:232:GLN:HG3	1:A:232:GLN:HE22	17	0.35	0.13	0.32
(1,1886)	1:A:115:MET:HB3	1:A:115:MET:HE1	17	0.34	0.12	0.3
(1,1886)	1:A:115:MET:HB3	1:A:115:MET:HE2	17	0.34	0.12	0.3
(1,1886)	1:A:115:MET:HB3	1:A:115:MET:HE3	17	0.34	0.12	0.3
(1,2206)	1:A:184:ARG:H	1:A:184:ARG:HG3	17	0.34	0.19	0.28
(1,1643)	1:A:75:GLU:HB3	1:A:76:GLU:H	17	0.33	0.18	0.3
(1,1871)	1:A:107:LYS:HA	1:A:107:LYS:HD3	17	0.27	0.05	0.25
(1,2035)	1:A:152:GLN:H	1:A:152:GLN:HG3	17	0.26	0.08	0.28
(1,471)	1:A:196:GLU:H	1:A:196:GLU:HB3	17	0.22	0.09	0.19
(1,211)	1:A:210:PHE:H	1:A:210:PHE:HB3	17	0.18	0.03	0.18
(1,1301)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:87:GLU:HG3	17	0.15	0.02	0.16
(1,442)	1:A:106:ILE:H	1:A:107:LYS:HG3	16	0.91	0.19	0.96
(1,2330)	1:A:212:GLU:HG3	1:A:216:LYS:HD3	16	0.83	0.29	0.84
(1,1535)	1:A:77:VAL:HA	1:A:78:PHE:HB3	16	0.76	0.44	0.79
(1,1326)	1:A:107:LYS:HG3	1:A:107:LYS:HE3	16	0.75	0.06	0.73
(1,1350)	1:A:200:ARG:HB3	1:A:200:ARG:HD3	16	0.73	0.39	0.78
(1,2379)	1:A:223:LYS:H	1:A:223:LYS:HE3	16	0.65	0.4	0.6
(1,2344)	1:A:215:TYR:HD1	1:A:216:LYS:HG3	16	0.62	0.23	0.6
(1,2344)	1:A:215:TYR:HD2	1:A:216:LYS:HG3	16	0.62	0.23	0.6
(1,1750)	1:A:91:ASP:H	1:A:91:ASP:HB3	16	0.62	0.03	0.62
(1,2349)	1:A:216:LYS:HB3	1:A:216:LYS:HE3	16	0.57	0.14	0.57
(1,1650)	1:A:76:GLU:HB3	1:A:222:TRP:HZ2	16	0.56	0.16	0.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(1,1893)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:121:HIS:HD2	16	0.53	0.07	0.54
(1,2280)	1:A:196:GLU:HG3	1:A:199:SER:HB3	16	0.52	0.27	0.52
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG11	1:A:207:GLU:HB3	16	0.51	0.05	0.5
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG12	1:A:207:GLU:HB3	16	0.51	0.05	0.5
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG13	1:A:207:GLU:HB3	16	0.51	0.05	0.5
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG21	1:A:207:GLU:HB3	16	0.51	0.05	0.5
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG22	1:A:207:GLU:HB3	16	0.51	0.05	0.5
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG23	1:A:207:GLU:HB3	16	0.51	0.05	0.5
(1,595)	1:A:158:MET:HG3	1:A:158:MET:HE1	16	0.42	0.05	0.4
(1,595)	1:A:158:MET:HG3	1:A:158:MET:HE2	16	0.42	0.05	0.4
(1,595)	1:A:158:MET:HG3	1:A:158:MET:HE3	16	0.42	0.05	0.4
(1,2159)	1:A:176:LEU:HG	1:A:198:GLU:HG3	16	0.42	0.15	0.46
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG11	16	0.4	0.13	0.42
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG12	16	0.4	0.13	0.42
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG13	16	0.4	0.13	0.42
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG21	16	0.4	0.13	0.42
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG22	16	0.4	0.13	0.42
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG23	16	0.4	0.13	0.42
(1,103)	1:A:197:GLU:HB3	1:A:199:SER:H	16	0.36	0.19	0.3
(1,100)	1:A:145:ARG:HB3	1:A:146:ASP:H	16	0.31	0.09	0.29
(1,2350)	1:A:216:LYS:HB3	1:A:217:THR:H	16	0.28	0.15	0.22
(1,2199)	1:A:182:ARG:HA	1:A:182:ARG:HG3	16	0.27	0.15	0.22
(1,1486)	1:A:145:ARG:HA	1:A:145:ARG:HG3	16	0.26	0.06	0.24
(1,1999)	1:A:141:GLU:HG3	1:A:142:ASN:H	16	0.22	0.08	0.2
(1,2369)	1:A:219:GLN:HE21	1:A:223:LYS:HE3	15	1.05	0.46	1.2
(1,2369)	1:A:219:GLN:HE22	1:A:223:LYS:HE3	15	1.05	0.46	1.2
(1,2204)	1:A:183:GLU:HG3	1:A:184:ARG:HG3	15	0.84	0.71	0.6
(1,320)	1:A:144:LEU:H	1:A:145:ARG:HG3	15	0.76	0.29	0.75
(1,2321)	1:A:208:ARG:HG3	1:A:211:GLN:HE22	15	0.74	0.13	0.71
(1,1501)	1:A:101:GLN:HA	1:A:107:LYS:HG3	15	0.7	0.06	0.7
(1,1595)	1:A:220:THR:HA	1:A:223:LYS:HD3	15	0.69	0.42	0.58
(1,2368)	1:A:219:GLN:HE21	1:A:223:LYS:HD3	15	0.59	0.25	0.68
(1,2368)	1:A:219:GLN:HE22	1:A:223:LYS:HD3	15	0.59	0.25	0.68
(1,2098)	1:A:166:LYS:HB3	1:A:166:LYS:HE3	15	0.58	0.38	0.37
(1,2386)	1:A:223:LYS:HG3	1:A:223:LYS:HE3	15	0.57	0.29	0.61
(1,1875)	1:A:107:LYS:HD3	1:A:108:PRO:HA	15	0.56	0.02	0.56
(1,2388)	1:A:223:LYS:HD3	1:A:223:LYS:HE3	15	0.56	0.07	0.56
(1,1361)	1:A:204:THR:HG21	1:A:208:ARG:HD3	15	0.54	0.17	0.56
(1,1361)	1:A:204:THR:HG22	1:A:208:ARG:HD3	15	0.54	0.17	0.56
(1,1361)	1:A:204:THR:HG23	1:A:208:ARG:HD3	15	0.54	0.17	0.56
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD11	1:A:158:MET:HG3	15	0.53	0.31	0.46
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD12	1:A:158:MET:HG3	15	0.53	0.31	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD13	1:A:158:MET:HG3	15	0.53	0.31	0.46
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD21	1:A:158:MET:HG3	15	0.53	0.31	0.46
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD22	1:A:158:MET:HG3	15	0.53	0.31	0.46
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD23	1:A:158:MET:HG3	15	0.53	0.31	0.46
(1,1883)	1:A:113:ALA:HB1	1:A:114:GLU:HG3	15	0.49	0.14	0.45
(1,1883)	1:A:113:ALA:HB2	1:A:114:GLU:HG3	15	0.49	0.14	0.45
(1,1883)	1:A:113:ALA:HB3	1:A:114:GLU:HG3	15	0.49	0.14	0.45
(1,147)	1:A:208:ARG:H	1:A:208:ARG:HD3	15	0.44	0.13	0.46
(1,1885)	1:A:114:GLU:HG3	1:A:115:MET:H	15	0.44	0.12	0.39
(1,1363)	1:A:205:GLN:HA	1:A:208:ARG:HD3	15	0.42	0.11	0.4
(1,1852)	1:A:101:GLN:HB3	1:A:107:LYS:HG3	15	0.34	0.15	0.34
(1,1220)	1:A:216:LYS:HD3	1:A:217:THR:H	15	0.33	0.21	0.31
(1,2377)	1:A:222:TRP:HE1	1:A:226:ARG:HD3	15	0.33	0.37	0.16
(1,1364)	1:A:208:ARG:HA	1:A:208:ARG:HD3	15	0.32	0.06	0.34
(1,1855)	1:A:101:GLN:HG3	1:A:102:ASP:H	15	0.27	0.15	0.22
(1,1884)	1:A:114:GLU:HA	1:A:114:GLU:HG3	15	0.26	0.04	0.24
(1,1469)	1:A:200:ARG:HA	1:A:200:ARG:HB3	15	0.22	0.01	0.22
(1,1800)	1:A:97:GLN:HB3	1:A:98:ASN:H	15	0.15	0.04	0.14
(1,1224)	1:A:223:LYS:HD3	1:A:224:GLU:HB3	14	1.39	0.73	1.38
(1,2147)	1:A:175:PRO:HA	1:A:197:GLU:HG3	14	1.03	0.36	1.03
(1,413)	1:A:218:GLN:HG3	1:A:221:ILE:H	14	0.88	0.5	1.12
(1,922)	1:A:217:THR:HG21	1:A:218:GLN:HG3	14	0.62	0.33	0.53
(1,922)	1:A:217:THR:HG22	1:A:218:GLN:HG3	14	0.62	0.33	0.53
(1,922)	1:A:217:THR:HG23	1:A:218:GLN:HG3	14	0.62	0.33	0.53
(1,750)	1:A:80:LYS:HB3	1:A:133:ALA:HB1	14	0.6	0.24	0.7
(1,750)	1:A:80:LYS:HB3	1:A:133:ALA:HB2	14	0.6	0.24	0.7
(1,750)	1:A:80:LYS:HB3	1:A:133:ALA:HB3	14	0.6	0.24	0.7
(1,1227)	1:A:223:LYS:H	1:A:223:LYS:HD3	14	0.53	0.38	0.36
(1,2394)	1:A:224:GLU:HG3	1:A:225:THR:H	14	0.49	0.21	0.47
(1,1218)	1:A:213:SER:HA	1:A:216:LYS:HD3	14	0.49	0.13	0.5
(1,2293)	1:A:199:SER:HB3	1:A:202:PHE:HB3	14	0.44	0.21	0.38
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD11	1:A:151:PHE:HB3	14	0.41	0.12	0.4
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD12	1:A:151:PHE:HB3	14	0.41	0.12	0.4
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD13	1:A:151:PHE:HB3	14	0.41	0.12	0.4
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD21	1:A:151:PHE:HB3	14	0.41	0.12	0.4
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD22	1:A:151:PHE:HB3	14	0.41	0.12	0.4
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD23	1:A:151:PHE:HB3	14	0.41	0.12	0.4
(1,2248)	1:A:194:ALA:HB1	1:A:196:GLU:HG3	14	0.29	0.14	0.27
(1,2248)	1:A:194:ALA:HB2	1:A:196:GLU:HG3	14	0.29	0.14	0.27
(1,2248)	1:A:194:ALA:HB3	1:A:196:GLU:HG3	14	0.29	0.14	0.27
(1,1955)	1:A:138:LEU:H	1:A:138:LEU:HB3	14	0.25	0.05	0.26
(1,1336)	1:A:223:LYS:HD3	1:A:223:LYS:HE3	14	0.2	0.02	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(1,1135)	1:A:216:LYS:HG3	1:A:216:LYS:HD3	14	0.16	0.02	0.18
(1,1209)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:221:ILE:HD11	13	1.05	0.41	1.16
(1,1209)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:221:ILE:HD12	13	1.05	0.41	1.16
(1,1209)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:221:ILE:HD13	13	1.05	0.41	1.16
(1,1300)	1:A:86:ALA:HB1	1:A:87:GLU:HG3	13	0.93	0.06	0.93
(1,1300)	1:A:86:ALA:HB2	1:A:87:GLU:HG3	13	0.93	0.06	0.93
(1,1300)	1:A:86:ALA:HB3	1:A:87:GLU:HG3	13	0.93	0.06	0.93
(1,246)	1:A:87:GLU:HG3	1:A:88:ASP:H	13	0.89	0.1	0.92
(1,1355)	1:A:182:ARG:HD3	1:A:190:GLN:HE22	13	0.79	0.47	0.8
(1,863)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG11	13	0.69	0.4	0.75
(1,863)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG12	13	0.69	0.4	0.75
(1,863)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG13	13	0.69	0.4	0.75
(1,1343)	1:A:216:LYS:H	1:A:216:LYS:HE3	13	0.66	0.31	0.77
(1,2101)	1:A:166:LYS:HG3	1:A:166:LYS:HE3	13	0.62	0.2	0.62
(1,1653)	1:A:76:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG11	13	0.53	0.19	0.45
(1,1653)	1:A:76:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG12	13	0.53	0.19	0.45
(1,1653)	1:A:76:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG13	13	0.53	0.19	0.45
(1,1321)	1:A:166:LYS:HE3	1:A:221:ILE:HG21	13	0.49	0.22	0.41
(1,1321)	1:A:166:LYS:HE3	1:A:221:ILE:HG22	13	0.49	0.22	0.41
(1,1321)	1:A:166:LYS:HE3	1:A:221:ILE:HG23	13	0.49	0.22	0.41
(1,1304)	1:A:87:GLU:H	1:A:87:GLU:HG3	13	0.47	0.05	0.47
(1,1645)	1:A:76:GLU:H	1:A:76:GLU:HG3	13	0.46	0.1	0.48
(1,1652)	1:A:76:GLU:HG3	1:A:77:VAL:H	13	0.45	0.09	0.45
(1,1889)	1:A:117:HIS:HB3	1:A:117:HIS:HD2	13	0.41	0.1	0.44
(1,1641)	1:A:74:SER:HA	1:A:74:SER:HB3	13	0.39	0.11	0.46
(1,1526)	1:A:192:ILE:HA	1:A:193:ASN:HB3	13	0.37	0.25	0.25
(1,1743)	1:A:89:ASP:H	1:A:89:ASP:HB3	13	0.35	0.09	0.37
(1,2411)	1:A:230:GLN:HB3	1:A:230:GLN:HE21	13	0.32	0.13	0.3
(1,2411)	1:A:230:GLN:HB3	1:A:230:GLN:HE22	13	0.32	0.13	0.3
(1,2370)	1:A:220:THR:HA	1:A:223:LYS:HB3	13	0.31	0.38	0.19
(1,2413)	1:A:232:GLN:H	1:A:232:GLN:HG3	13	0.29	0.18	0.18
(1,2397)	1:A:226:ARG:HB3	1:A:226:ARG:HD3	13	0.21	0.13	0.15
(1,1647)	1:A:76:GLU:HA	1:A:76:GLU:HG3	13	0.21	0.11	0.17
(1,2384)	1:A:223:LYS:HB3	1:A:224:GLU:HG3	12	1.22	0.74	1.25
(1,1342)	1:A:215:TYR:HD1	1:A:216:LYS:HE3	12	1.04	0.45	1.0
(1,1342)	1:A:215:TYR:HD2	1:A:216:LYS:HE3	12	1.04	0.45	1.0
(1,2021)	1:A:145:ARG:HD3	1:A:146:ASP:H	12	0.91	0.47	0.84
(1,179)	1:A:95:ARG:HD3	1:A:98:ASN:H	12	0.87	0.37	1.04
(1,2218)	1:A:185:THR:HG21	1:A:190:GLN:HG3	12	0.85	0.02	0.84
(1,2218)	1:A:185:THR:HG22	1:A:190:GLN:HG3	12	0.85	0.02	0.84
(1,2218)	1:A:185:THR:HG23	1:A:190:GLN:HG3	12	0.85	0.02	0.84
(1,2215)	1:A:185:THR:HB	1:A:190:GLN:HG3	12	0.77	0.03	0.76

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(1,2081)	1:A:162:ASN:HB3	1:A:164:GLN:HE21	12	0.74	0.59	0.42
(1,2081)	1:A:162:ASN:HB3	1:A:164:GLN:HE22	12	0.74	0.59	0.42
(1,43)	1:A:182:ARG:HB3	1:A:190:GLN:HE22	12	0.74	0.41	0.72
(1,2083)	1:A:163:ARG:H	1:A:163:ARG:HG3	12	0.54	0.25	0.57
(1,1354)	1:A:182:ARG:HB3	1:A:182:ARG:HD3	12	0.54	0.21	0.54
(1,1351)	1:A:200:ARG:HA	1:A:200:ARG:HD3	12	0.5	0.27	0.45
(1,1895)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:122:LEU:HD11	12	0.47	0.29	0.36
(1,1895)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:122:LEU:HD12	12	0.47	0.29	0.36
(1,1895)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:122:LEU:HD13	12	0.47	0.29	0.36
(1,1895)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:122:LEU:HD21	12	0.47	0.29	0.36
(1,1895)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:122:LEU:HD22	12	0.47	0.29	0.36
(1,1895)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:122:LEU:HD23	12	0.47	0.29	0.36
(1,1649)	1:A:76:GLU:HB3	1:A:77:VAL:H	12	0.38	0.06	0.4
(1,1324)	1:A:166:LYS:HA	1:A:166:LYS:HE3	12	0.29	0.1	0.27
(1,1870)	1:A:107:LYS:H	1:A:107:LYS:HB3	12	0.27	0.14	0.22
(1,2383)	1:A:223:LYS:HB3	1:A:223:LYS:HD3	12	0.26	0.13	0.18
(1,1291)	1:A:224:GLU:HB3	1:A:224:GLU:HG3	12	0.24	0.04	0.24
(1,2404)	1:A:228:MET:HG3	1:A:229:VAL:H	12	0.18	0.04	0.18
(1,1782)	1:A:94:LEU:HD11	1:A:114:GLU:HG3	12	0.16	0.03	0.15
(1,1782)	1:A:94:LEU:HD12	1:A:114:GLU:HG3	12	0.16	0.03	0.15
(1,1782)	1:A:94:LEU:HD13	1:A:114:GLU:HG3	12	0.16	0.03	0.15
(1,1782)	1:A:94:LEU:HD21	1:A:114:GLU:HG3	12	0.16	0.03	0.15
(1,1782)	1:A:94:LEU:HD22	1:A:114:GLU:HG3	12	0.16	0.03	0.15
(1,1782)	1:A:94:LEU:HD23	1:A:114:GLU:HG3	12	0.16	0.03	0.15
(1,1635)	1:A:71:PRO:HB3	1:A:74:SER:HB3	11	1.13	0.78	0.95
(1,1210)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:221:ILE:HG21	11	0.79	0.29	0.73
(1,1210)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:221:ILE:HG22	11	0.79	0.29	0.73
(1,1210)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:221:ILE:HG23	11	0.79	0.29	0.73
(1,1372)	1:A:163:ARG:HD3	1:A:164:GLN:H	11	0.77	0.34	0.83
(1,2149)	1:A:176:LEU:H	1:A:197:GLU:HG3	11	0.54	0.41	0.39
(1,1882)	1:A:112:PHE:HA	1:A:115:MET:HG3	11	0.42	0.22	0.39
(1,1284)	1:A:75:GLU:HB3	1:A:75:GLU:HG3	11	0.41	0.08	0.43
(1,2391)	1:A:224:GLU:HA	1:A:224:GLU:HG3	11	0.39	0.13	0.43
(1,2419)	1:A:234:ILE:HA	1:A:234:ILE:HG13	11	0.38	0.09	0.37
(1,1349)	1:A:200:ARG:HG3	1:A:200:ARG:HD3	11	0.37	0.01	0.37
(1,2006)	1:A:144:LEU:HB3	1:A:180:LEU:HD11	11	0.36	0.17	0.32
(1,2006)	1:A:144:LEU:HB3	1:A:180:LEU:HD12	11	0.36	0.17	0.32
(1,2006)	1:A:144:LEU:HB3	1:A:180:LEU:HD13	11	0.36	0.17	0.32
(1,2006)	1:A:144:LEU:HB3	1:A:180:LEU:HD21	11	0.36	0.17	0.32
(1,2006)	1:A:144:LEU:HB3	1:A:180:LEU:HD22	11	0.36	0.17	0.32
(1,2006)	1:A:144:LEU:HB3	1:A:180:LEU:HD23	11	0.36	0.17	0.32
(1,1603)	1:A:146:ASP:HB3	1:A:147:THR:HB	11	0.35	0.27	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(1,1323)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:166:LYS:HE3	11	0.32	0.11	0.36
(1,1499)	1:A:223:LYS:HA	1:A:223:LYS:HD3	11	0.31	0.11	0.31
(1,1968)	1:A:139:LEU:HB3	1:A:189:LEU:HD11	11	0.31	0.15	0.26
(1,1968)	1:A:139:LEU:HB3	1:A:189:LEU:HD12	11	0.31	0.15	0.26
(1,1968)	1:A:139:LEU:HB3	1:A:189:LEU:HD13	11	0.31	0.15	0.26
(1,1968)	1:A:139:LEU:HB3	1:A:189:LEU:HD21	11	0.31	0.15	0.26
(1,1968)	1:A:139:LEU:HB3	1:A:189:LEU:HD22	11	0.31	0.15	0.26
(1,1968)	1:A:139:LEU:HB3	1:A:189:LEU:HD23	11	0.31	0.15	0.26
(1,810)	1:A:173:MET:HE1	1:A:197:GLU:HB3	11	0.28	0.12	0.28
(1,810)	1:A:173:MET:HE2	1:A:197:GLU:HB3	11	0.28	0.12	0.28
(1,810)	1:A:173:MET:HE3	1:A:197:GLU:HB3	11	0.28	0.12	0.28
(1,262)	1:A:183:GLU:HB3	1:A:185:THR:H	11	0.25	0.11	0.27
(1,1992)	1:A:141:GLU:H	1:A:144:LEU:HB3	11	0.24	0.1	0.21
(1,438)	1:A:180:LEU:H	1:A:181:PRO:HG3	11	0.2	0.07	0.19
(1,2331)	1:A:212:GLU:HG3	1:A:216:LYS:HE3	10	0.96	0.51	0.94
(1,1682)	1:A:80:LYS:HE3	1:A:81:PHE:HB3	10	0.87	0.31	0.87
(1,2390)	1:A:224:GLU:H	1:A:224:GLU:HG3	10	0.6	0.26	0.66
(1,2351)	1:A:216:LYS:HG3	1:A:216:LYS:HE3	10	0.57	0.38	0.42
(1,2084)	1:A:163:ARG:HA	1:A:163:ARG:HG3	10	0.51	0.16	0.47
(1,1341)	1:A:213:SER:HA	1:A:216:LYS:HE3	10	0.48	0.36	0.46
(1,1333)	1:A:107:LYS:H	1:A:107:LYS:HE3	10	0.38	0.17	0.32
(1,1303)	1:A:87:GLU:HG3	1:A:88:ASP:HA	10	0.35	0.15	0.31
(1,1914)	1:A:125:LEU:HD11	1:A:157:LEU:HB3	10	0.34	0.26	0.25
(1,1914)	1:A:125:LEU:HD12	1:A:157:LEU:HB3	10	0.34	0.26	0.25
(1,1914)	1:A:125:LEU:HD13	1:A:157:LEU:HB3	10	0.34	0.26	0.25
(1,1914)	1:A:125:LEU:HD21	1:A:157:LEU:HB3	10	0.34	0.26	0.25
(1,1914)	1:A:125:LEU:HD22	1:A:157:LEU:HB3	10	0.34	0.26	0.25
(1,1914)	1:A:125:LEU:HD23	1:A:157:LEU:HB3	10	0.34	0.26	0.25
(1,2210)	1:A:184:ARG:HB3	1:A:185:THR:H	10	0.3	0.13	0.36
(1,145)	1:A:207:GLU:HB3	1:A:208:ARG:H	10	0.28	0.12	0.32
(1,1988)	1:A:140:THR:HG21	1:A:142:ASN:HB3	10	0.28	0.04	0.3
(1,1988)	1:A:140:THR:HG22	1:A:142:ASN:HB3	10	0.28	0.04	0.3
(1,1988)	1:A:140:THR:HG23	1:A:142:ASN:HB3	10	0.28	0.04	0.3
(1,2292)	1:A:199:SER:H	1:A:199:SER:HB3	10	0.25	0.08	0.26
(1,821)	1:A:173:MET:H	1:A:173:MET:HE1	10	0.13	0.02	0.12
(1,821)	1:A:173:MET:H	1:A:173:MET:HE2	10	0.13	0.02	0.12
(1,821)	1:A:173:MET:H	1:A:173:MET:HE3	10	0.13	0.02	0.12
(1,2087)	1:A:164:GLN:H	1:A:164:GLN:HB3	10	0.13	0.01	0.12
(1,553)	1:A:218:GLN:HG3	1:A:221:ILE:HD11	9	0.77	0.23	0.68
(1,553)	1:A:218:GLN:HG3	1:A:221:ILE:HD12	9	0.77	0.23	0.68
(1,553)	1:A:218:GLN:HG3	1:A:221:ILE:HD13	9	0.77	0.23	0.68
(1,2041)	1:A:156:SER:H	1:A:157:LEU:HB3	9	0.67	0.37	0.69

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(1,1276)	1:A:212:GLU:HG3	1:A:216:LYS:HD3	9	0.47	0.22	0.32
(1,2193)	1:A:180:LEU:HD11	1:A:184:ARG:HD3	9	0.46	0.28	0.4
(1,2193)	1:A:180:LEU:HD12	1:A:184:ARG:HD3	9	0.46	0.28	0.4
(1,2193)	1:A:180:LEU:HD13	1:A:184:ARG:HD3	9	0.46	0.28	0.4
(1,2193)	1:A:180:LEU:HD21	1:A:184:ARG:HD3	9	0.46	0.28	0.4
(1,2193)	1:A:180:LEU:HD22	1:A:184:ARG:HD3	9	0.46	0.28	0.4
(1,2193)	1:A:180:LEU:HD23	1:A:184:ARG:HD3	9	0.46	0.28	0.4
(1,1644)	1:A:76:GLU:H	1:A:76:GLU:HB3	9	0.4	0.22	0.48
(1,1215)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:167:TYR:H	9	0.4	0.27	0.26
(1,1879)	1:A:110:ILE:HD11	1:A:115:MET:HG3	9	0.39	0.2	0.31
(1,1879)	1:A:110:ILE:HD12	1:A:115:MET:HG3	9	0.39	0.2	0.31
(1,1879)	1:A:110:ILE:HD13	1:A:115:MET:HG3	9	0.39	0.2	0.31
(1,387)	1:A:80:LYS:HD3	1:A:107:LYS:H	9	0.37	0.22	0.34
(1,1679)	1:A:80:LYS:HG3	1:A:80:LYS:HE3	9	0.34	0.11	0.29
(1,1887)	1:A:115:MET:HG3	1:A:115:MET:HE1	9	0.27	0.04	0.3
(1,1887)	1:A:115:MET:HG3	1:A:115:MET:HE2	9	0.27	0.04	0.3
(1,1887)	1:A:115:MET:HG3	1:A:115:MET:HE3	9	0.27	0.04	0.3
(1,1322)	1:A:166:LYS:HG3	1:A:166:LYS:HE3	9	0.26	0.19	0.21
(1,2418)	1:A:234:ILE:H	1:A:234:ILE:HG13	9	0.26	0.15	0.21
(1,480)	1:A:182:ARG:H	1:A:182:ARG:HD3	9	0.25	0.13	0.2
(1,1765)	1:A:93:ALA:HA	1:A:95:ARG:HB3	9	0.21	0.06	0.2
(1,1230)	1:A:200:ARG:HB3	1:A:200:ARG:HG3	9	0.21	0.02	0.21
(1,2320)	1:A:208:ARG:HA	1:A:208:ARG:HG3	9	0.18	0.03	0.18
(1,257)	1:A:205:GLN:HB3	1:A:206:VAL:H	9	0.17	0.06	0.16
(1,2417)	1:A:233:PHE:HB3	1:A:234:ILE:H	9	0.15	0.03	0.15
(1,168)	1:A:145:ARG:H	1:A:145:ARG:HB3	9	0.12	0.0	0.12
(1,2223)	1:A:187:PHE:HA	1:A:190:GLN:HG3	8	1.08	0.06	1.08
(1,1566)	1:A:71:PRO:HG3	1:A:74:SER:HB3	8	0.73	0.44	0.77
(1,2214)	1:A:185:THR:HB	1:A:190:GLN:HB3	8	0.72	0.01	0.72
(1,2236)	1:A:190:GLN:H	1:A:190:GLN:HG3	8	0.61	0.04	0.6
(1,1675)	1:A:80:LYS:H	1:A:80:LYS:HE3	8	0.59	0.31	0.44
(1,84)	1:A:197:GLU:HB3	1:A:198:GLU:H	8	0.54	0.16	0.6
(1,1680)	1:A:80:LYS:HG3	1:A:81:PHE:H	8	0.54	0.08	0.55
(1,2086)	1:A:163:ARG:HG3	1:A:164:GLN:H	8	0.52	0.18	0.56
(1,135)	1:A:163:ARG:H	1:A:163:ARG:HD3	8	0.49	0.19	0.48
(1,1898)	1:A:123:GLN:H	1:A:123:GLN:HG3	8	0.42	0.12	0.47
(1,2037)	1:A:152:GLN:HG3	1:A:153:PHE:H	8	0.34	0.18	0.29
(1,2283)	1:A:197:GLU:HA	1:A:197:GLU:HG3	8	0.3	0.18	0.24
(1,2240)	1:A:190:GLN:HG3	1:A:191:THR:HG21	8	0.29	0.15	0.2
(1,2240)	1:A:190:GLN:HG3	1:A:191:THR:HG22	8	0.29	0.15	0.2
(1,2240)	1:A:190:GLN:HG3	1:A:191:THR:HG23	8	0.29	0.15	0.2
(1,1880)	1:A:110:ILE:HD11	1:A:116:PRO:HG3	8	0.21	0.09	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(1,1880)	1:A:110:ILE:HD12	1:A:116:PRO:HG3	8	0.21	0.09	0.2
(1,1880)	1:A:110:ILE:HD13	1:A:116:PRO:HG3	8	0.21	0.09	0.2
(1,1674)	1:A:80:LYS:H	1:A:80:LYS:HG3	8	0.19	0.08	0.16
(1,1302)	1:A:87:GLU:HA	1:A:87:GLU:HG3	8	0.18	0.03	0.19
(1,2387)	1:A:223:LYS:HG3	1:A:224:GLU:H	7	0.57	0.15	0.51
(1,2378)	1:A:223:LYS:H	1:A:223:LYS:HG3	7	0.52	0.06	0.5
(1,1529)	1:A:80:LYS:HA	1:A:80:LYS:HD3	7	0.49	0.24	0.66
(1,2385)	1:A:223:LYS:HB3	1:A:226:ARG:HE	7	0.48	0.18	0.55
(1,3)	1:A:80:LYS:HD3	1:A:81:PHE:H	7	0.44	0.37	0.28
(1,332)	1:A:95:ARG:H	1:A:95:ARG:HD3	7	0.41	0.18	0.51
(1,2019)	1:A:145:ARG:HA	1:A:145:ARG:HD3	7	0.41	0.1	0.39
(1,1739)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:88:ASP:H	7	0.39	0.05	0.38
(1,1681)	1:A:80:LYS:HG3	1:A:106:ILE:HG21	7	0.33	0.11	0.38
(1,1681)	1:A:80:LYS:HG3	1:A:106:ILE:HG22	7	0.33	0.11	0.38
(1,1681)	1:A:80:LYS:HG3	1:A:106:ILE:HG23	7	0.33	0.11	0.38
(1,2297)	1:A:200:ARG:HG3	1:A:201:GLY:H	7	0.32	0.09	0.35
(1,1263)	1:A:230:GLN:HA	1:A:230:GLN:HG3	7	0.3	0.05	0.29
(1,1219)	1:A:215:TYR:HD1	1:A:216:LYS:HD3	7	0.28	0.18	0.24
(1,1219)	1:A:215:TYR:HD2	1:A:216:LYS:HD3	7	0.28	0.18	0.24
(1,1676)	1:A:80:LYS:HA	1:A:80:LYS:HG3	7	0.26	0.09	0.23
(1,1751)	1:A:91:ASP:H	1:A:92:GLU:HB3	7	0.26	0.11	0.27
(1,2244)	1:A:192:ILE:HG13	1:A:193:ASN:H	7	0.26	0.1	0.26
(1,1734)	1:A:85:HIS:HB3	1:A:111:ILE:HD11	7	0.25	0.1	0.26
(1,1734)	1:A:85:HIS:HB3	1:A:111:ILE:HD12	7	0.25	0.1	0.26
(1,1734)	1:A:85:HIS:HB3	1:A:111:ILE:HD13	7	0.25	0.1	0.26
(1,2216)	1:A:185:THR:HG21	1:A:189:LEU:HB3	7	0.24	0.07	0.26
(1,2216)	1:A:185:THR:HG22	1:A:189:LEU:HB3	7	0.24	0.07	0.26
(1,2216)	1:A:185:THR:HG23	1:A:189:LEU:HB3	7	0.24	0.07	0.26
(1,2036)	1:A:152:GLN:HG3	1:A:152:GLN:HE21	7	0.21	0.05	0.23
(1,2036)	1:A:152:GLN:HG3	1:A:152:GLN:HE22	7	0.21	0.05	0.23
(1,1340)	1:A:216:LYS:HA	1:A:216:LYS:HE3	7	0.19	0.12	0.15
(1,2289)	1:A:198:GLU:HA	1:A:198:GLU:HG3	7	0.13	0.02	0.12
(1,2188)	1:A:180:LEU:HD11	1:A:181:PRO:HG3	7	0.12	0.01	0.11
(1,2188)	1:A:180:LEU:HD12	1:A:181:PRO:HG3	7	0.12	0.01	0.11
(1,2188)	1:A:180:LEU:HD13	1:A:181:PRO:HG3	7	0.12	0.01	0.11
(1,2188)	1:A:180:LEU:HD21	1:A:181:PRO:HG3	7	0.12	0.01	0.11
(1,2188)	1:A:180:LEU:HD22	1:A:181:PRO:HG3	7	0.12	0.01	0.11
(1,2188)	1:A:180:LEU:HD23	1:A:181:PRO:HG3	7	0.12	0.01	0.11
(1,1358)	1:A:231:ARG:HA	1:A:231:ARG:HD3	6	0.74	0.1	0.75
(1,1214)	1:A:166:LYS:H	1:A:166:LYS:HD3	6	0.74	0.35	0.76
(1,1339)	1:A:212:GLU:HG3	1:A:216:LYS:HE3	6	0.7	0.32	0.74
(1,1226)	1:A:223:LYS:HD3	1:A:224:GLU:H	6	0.53	0.12	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(1,2057)	1:A:159:ASN:HA	1:A:162:ASN:HB3	6	0.4	0.14	0.4
(1,2414)	1:A:232:GLN:HA	1:A:232:GLN:HG3	6	0.39	0.08	0.43
(1,1747)	1:A:89:ASP:HB3	1:A:93:ALA:H	6	0.38	0.15	0.36
(1,734)	1:A:192:ILE:HG21	1:A:193:ASN:HB3	6	0.37	0.21	0.28
(1,734)	1:A:192:ILE:HG22	1:A:193:ASN:HB3	6	0.37	0.21	0.28
(1,734)	1:A:192:ILE:HG23	1:A:193:ASN:HB3	6	0.37	0.21	0.28
(1,1212)	1:A:166:LYS:HA	1:A:166:LYS:HD3	6	0.36	0.13	0.36
(1,2298)	1:A:200:ARG:HG3	1:A:202:PHE:H	6	0.33	0.16	0.3
(1,1709)	1:A:83:ILE:HA	1:A:136:ILE:HG13	6	0.32	0.15	0.29
(1,1892)	1:A:120:GLN:HG3	1:A:120:GLN:HE21	6	0.31	0.1	0.34
(1,1892)	1:A:120:GLN:HG3	1:A:120:GLN:HE22	6	0.31	0.1	0.34
(1,2091)	1:A:164:GLN:HB3	1:A:164:GLN:HE21	6	0.28	0.09	0.3
(1,2091)	1:A:164:GLN:HB3	1:A:164:GLN:HE22	6	0.28	0.09	0.3
(1,1934)	1:A:132:SER:HB3	1:A:134:TRP:H	6	0.26	0.12	0.24
(1,1878)	1:A:110:ILE:HG13	1:A:111:ILE:H	6	0.18	0.04	0.19
(1,2309)	1:A:205:GLN:HA	1:A:208:ARG:HG3	5	1.25	0.07	1.23
(1,1329)	1:A:101:GLN:HA	1:A:107:LYS:HE3	5	0.88	0.47	1.12
(1,1330)	1:A:102:ASP:HA	1:A:107:LYS:HE3	5	0.86	0.5	0.87
(1,2319)	1:A:207:GLU:H	1:A:208:ARG:HG3	5	0.82	0.19	0.77
(1,532)	1:A:171:ILE:HD11	1:A:193:ASN:HB3	5	0.58	0.24	0.68
(1,532)	1:A:171:ILE:HD12	1:A:193:ASN:HB3	5	0.58	0.24	0.68
(1,532)	1:A:171:ILE:HD13	1:A:193:ASN:HB3	5	0.58	0.24	0.68
(1,1890)	1:A:117:HIS:HE1	1:A:122:LEU:HB3	5	0.56	0.29	0.58
(1,2009)	1:A:144:LEU:HD11	1:A:145:ARG:HD3	5	0.54	0.02	0.55
(1,2009)	1:A:144:LEU:HD12	1:A:145:ARG:HD3	5	0.54	0.02	0.55
(1,2009)	1:A:144:LEU:HD13	1:A:145:ARG:HD3	5	0.54	0.02	0.55
(1,2009)	1:A:144:LEU:HD21	1:A:145:ARG:HD3	5	0.54	0.02	0.55
(1,2009)	1:A:144:LEU:HD22	1:A:145:ARG:HD3	5	0.54	0.02	0.55
(1,2009)	1:A:144:LEU:HD23	1:A:145:ARG:HD3	5	0.54	0.02	0.55
(1,1371)	1:A:163:ARG:HA	1:A:163:ARG:HD3	5	0.52	0.4	0.21
(1,1365)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:211:GLN:HE21	5	0.52	0.11	0.56
(1,1365)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:211:GLN:HE22	5	0.52	0.11	0.56
(1,1721)	1:A:84:LEU:HD11	1:A:112:PHE:HB3	5	0.51	0.29	0.66
(1,1721)	1:A:84:LEU:HD12	1:A:112:PHE:HB3	5	0.51	0.29	0.66
(1,1721)	1:A:84:LEU:HD13	1:A:112:PHE:HB3	5	0.51	0.29	0.66
(1,1721)	1:A:84:LEU:HD21	1:A:112:PHE:HB3	5	0.51	0.29	0.66
(1,1721)	1:A:84:LEU:HD22	1:A:112:PHE:HB3	5	0.51	0.29	0.66
(1,1721)	1:A:84:LEU:HD23	1:A:112:PHE:HB3	5	0.51	0.29	0.66
(1,1655)	1:A:76:GLU:HG3	1:A:222:TRP:HH2	5	0.51	0.14	0.59
(1,1683)	1:A:80:LYS:HE3	1:A:106:ILE:HG21	5	0.47	0.06	0.47
(1,1683)	1:A:80:LYS:HE3	1:A:106:ILE:HG22	5	0.47	0.06	0.47
(1,1683)	1:A:80:LYS:HE3	1:A:106:ILE:HG23	5	0.47	0.06	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(1,2158)	1:A:176:LEU:HB3	1:A:197:GLU:HG3	5	0.45	0.23	0.52
(1,2108)	1:A:167:TYR:HB3	1:A:221:ILE:HD11	5	0.45	0.17	0.39
(1,2108)	1:A:167:TYR:HB3	1:A:221:ILE:HD12	5	0.45	0.17	0.39
(1,2108)	1:A:167:TYR:HB3	1:A:221:ILE:HD13	5	0.45	0.17	0.39
(1,1849)	1:A:101:GLN:HB3	1:A:101:GLN:HE21	5	0.36	0.24	0.25
(1,1849)	1:A:101:GLN:HB3	1:A:101:GLN:HE22	5	0.36	0.24	0.25
(1,2250)	1:A:195:LEU:H	1:A:196:GLU:HG3	5	0.32	0.28	0.17
(1,1754)	1:A:91:ASP:HB3	1:A:94:LEU:HD11	5	0.3	0.01	0.3
(1,1754)	1:A:91:ASP:HB3	1:A:94:LEU:HD12	5	0.3	0.01	0.3
(1,1754)	1:A:91:ASP:HB3	1:A:94:LEU:HD13	5	0.3	0.01	0.3
(1,1754)	1:A:91:ASP:HB3	1:A:94:LEU:HD21	5	0.3	0.01	0.3
(1,1754)	1:A:91:ASP:HB3	1:A:94:LEU:HD22	5	0.3	0.01	0.3
(1,1754)	1:A:91:ASP:HB3	1:A:94:LEU:HD23	5	0.3	0.01	0.3
(1,1748)	1:A:89:ASP:HB3	1:A:138:LEU:HD11	5	0.28	0.09	0.25
(1,1748)	1:A:89:ASP:HB3	1:A:138:LEU:HD12	5	0.28	0.09	0.25
(1,1748)	1:A:89:ASP:HB3	1:A:138:LEU:HD13	5	0.28	0.09	0.25
(1,1748)	1:A:89:ASP:HB3	1:A:138:LEU:HD21	5	0.28	0.09	0.25
(1,1748)	1:A:89:ASP:HB3	1:A:138:LEU:HD22	5	0.28	0.09	0.25
(1,1748)	1:A:89:ASP:HB3	1:A:138:LEU:HD23	5	0.28	0.09	0.25
(1,2132)	1:A:172:PRO:HG3	1:A:192:ILE:HG21	5	0.28	0.12	0.26
(1,2132)	1:A:172:PRO:HG3	1:A:192:ILE:HG22	5	0.28	0.12	0.26
(1,2132)	1:A:172:PRO:HG3	1:A:192:ILE:HG23	5	0.28	0.12	0.26
(1,2059)	1:A:159:ASN:HB3	1:A:160:SER:H	5	0.26	0.11	0.23
(1,1370)	1:A:163:ARG:HB3	1:A:163:ARG:HD3	5	0.26	0.04	0.26
(1,2421)	1:A:234:ILE:HG13	1:A:235:ALA:H	5	0.24	0.05	0.22
(1,161)	1:A:158:MET:H	1:A:158:MET:HG3	5	0.23	0.03	0.23
(1,1221)	1:A:216:LYS:H	1:A:216:LYS:HD3	5	0.21	0.08	0.25
(1,1899)	1:A:123:GLN:HB3	1:A:123:GLN:HE21	5	0.21	0.06	0.25
(1,1899)	1:A:123:GLN:HB3	1:A:123:GLN:HE22	5	0.21	0.06	0.25
(1,2110)	1:A:169:SER:H	1:A:169:SER:HB3	5	0.17	0.05	0.16
(1,104)	1:A:196:GLU:HB3	1:A:199:SER:H	5	0.17	0.05	0.17
(1,1431)	1:A:197:GLU:HB3	1:A:198:GLU:HA	5	0.16	0.02	0.17
(1,1820)	1:A:100:LEU:HB3	1:A:210:PHE:HD1	5	0.16	0.01	0.16
(1,1820)	1:A:100:LEU:HB3	1:A:210:PHE:HD2	5	0.16	0.01	0.16
(1,2232)	1:A:189:LEU:HB3	1:A:190:GLN:H	5	0.15	0.03	0.14
(1,509)	1:A:148:TRP:HE1	1:A:186:PRO:HB3	5	0.14	0.02	0.15
(1,2106)	1:A:167:TYR:HB3	1:A:221:ILE:H	4	1.37	0.61	1.68
(1,1334)	1:A:102:ASP:H	1:A:107:LYS:HE3	4	1.11	0.28	1.2
(1,1331)	1:A:105:GLY:H	1:A:107:LYS:HE3	4	1.0	0.5	1.21
(1,444)	1:A:106:ILE:H	1:A:107:LYS:HE3	4	0.92	0.48	1.12
(1,2151)	1:A:176:LEU:HA	1:A:198:GLU:HB3	4	0.42	0.47	0.15
(1,1853)	1:A:101:GLN:HB3	1:A:108:PRO:HA	4	0.42	0.09	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(1,2402)	1:A:227:ASN:HB3	1:A:228:MET:H	4	0.33	0.13	0.34
(1,1587)	1:A:203:PRO:HA	1:A:206:VAL:HB	4	0.3	0.01	0.3
(1,2065)	1:A:160:SER:HB3	1:A:161:VAL:HG11	4	0.28	0.05	0.29
(1,2065)	1:A:160:SER:HB3	1:A:161:VAL:HG12	4	0.28	0.05	0.29
(1,2065)	1:A:160:SER:HB3	1:A:161:VAL:HG13	4	0.28	0.05	0.29
(1,2065)	1:A:160:SER:HB3	1:A:161:VAL:HG21	4	0.28	0.05	0.29
(1,2065)	1:A:160:SER:HB3	1:A:161:VAL:HG22	4	0.28	0.05	0.29
(1,2065)	1:A:160:SER:HB3	1:A:161:VAL:HG23	4	0.28	0.05	0.29
(1,2103)	1:A:166:LYS:HG3	1:A:167:TYR:HA	4	0.26	0.03	0.26
(1,2403)	1:A:228:MET:HA	1:A:228:MET:HG3	4	0.24	0.19	0.14
(1,686)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:106:ILE:HG21	4	0.23	0.07	0.22
(1,686)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:106:ILE:HG22	4	0.23	0.07	0.22
(1,686)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:106:ILE:HG23	4	0.23	0.07	0.22
(1,1338)	1:A:216:LYS:HB3	1:A:216:LYS:HE3	4	0.23	0.06	0.24
(1,1881)	1:A:111:ILE:HG13	1:A:114:GLU:HG3	4	0.21	0.07	0.21
(1,1774)	1:A:94:LEU:HD11	1:A:97:GLN:HB3	4	0.2	0.11	0.16
(1,1774)	1:A:94:LEU:HD12	1:A:97:GLN:HB3	4	0.2	0.11	0.16
(1,1774)	1:A:94:LEU:HD13	1:A:97:GLN:HB3	4	0.2	0.11	0.16
(1,1774)	1:A:94:LEU:HD21	1:A:97:GLN:HB3	4	0.2	0.11	0.16
(1,1774)	1:A:94:LEU:HD22	1:A:97:GLN:HB3	4	0.2	0.11	0.16
(1,1774)	1:A:94:LEU:HD23	1:A:97:GLN:HB3	4	0.2	0.11	0.16
(1,2100)	1:A:166:LYS:HB3	1:A:221:ILE:HG21	4	0.2	0.08	0.18
(1,2100)	1:A:166:LYS:HB3	1:A:221:ILE:HG22	4	0.2	0.08	0.18
(1,2100)	1:A:166:LYS:HB3	1:A:221:ILE:HG23	4	0.2	0.08	0.18
(1,2284)	1:A:197:GLU:HA	1:A:202:PHE:HB3	4	0.18	0.05	0.18
(1,1857)	1:A:102:ASP:H	1:A:102:ASP:HB3	3	0.65	0.05	0.64
(1,2079)	1:A:162:ASN:H	1:A:164:GLN:HG3	3	0.64	0.15	0.73
(1,1677)	1:A:80:LYS:HA	1:A:80:LYS:HE3	3	0.59	0.34	0.74
(1,2203)	1:A:183:GLU:HG3	1:A:184:ARG:H	3	0.56	0.2	0.69
(1,2093)	1:A:164:GLN:HG3	1:A:164:GLN:HE21	3	0.53	0.02	0.54
(1,2093)	1:A:164:GLN:HG3	1:A:164:GLN:HE22	3	0.53	0.02	0.54
(1,1225)	1:A:223:LYS:HD3	1:A:226:ARG:HE	3	0.53	0.14	0.44
(1,751)	1:A:133:ALA:HB1	1:A:218:GLN:HG3	3	0.51	0.07	0.51
(1,751)	1:A:133:ALA:HB2	1:A:218:GLN:HG3	3	0.51	0.07	0.51
(1,751)	1:A:133:ALA:HB3	1:A:218:GLN:HG3	3	0.51	0.07	0.51
(1,2252)	1:A:195:LEU:HA	1:A:196:GLU:HG3	3	0.47	0.49	0.13
(1,1368)	1:A:163:ARG:HD3	1:A:192:ILE:HD11	3	0.46	0.36	0.3
(1,1368)	1:A:163:ARG:HD3	1:A:192:ILE:HD12	3	0.46	0.36	0.3
(1,1368)	1:A:163:ARG:HD3	1:A:192:ILE:HD13	3	0.46	0.36	0.3
(1,1332)	1:A:101:GLN:HE21	1:A:107:LYS:HE3	3	0.37	0.14	0.44
(1,1332)	1:A:101:GLN:HE22	1:A:107:LYS:HE3	3	0.37	0.14	0.44
(1,1327)	1:A:107:LYS:HD3	1:A:107:LYS:HE3	3	0.36	0.01	0.36

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(1,1805)	1:A:98:ASN:HA	1:A:101:GLN:HG3	3	0.35	0.18	0.33
(1,1816)	1:A:100:LEU:HB3	1:A:101:GLN:H	3	0.33	0.02	0.31
(1,1572)	1:A:221:ILE:HA	1:A:224:GLU:HB3	3	0.29	0.11	0.3
(1,2115)	1:A:169:SER:HB3	1:A:209:ILE:HG21	3	0.25	0.07	0.23
(1,2115)	1:A:169:SER:HB3	1:A:209:ILE:HG22	3	0.25	0.07	0.23
(1,2115)	1:A:169:SER:HB3	1:A:209:ILE:HG23	3	0.25	0.07	0.23
(1,1217)	1:A:216:LYS:HA	1:A:216:LYS:HD3	3	0.22	0.1	0.16
(1,1854)	1:A:101:GLN:HB3	1:A:109:GLY:H	3	0.22	0.07	0.26
(1,2380)	1:A:223:LYS:HA	1:A:223:LYS:HG3	3	0.17	0.01	0.17
(1,1245)	1:A:80:LYS:HB3	1:A:106:ILE:HG21	3	0.15	0.02	0.15
(1,1245)	1:A:80:LYS:HB3	1:A:106:ILE:HG22	3	0.15	0.02	0.15
(1,1245)	1:A:80:LYS:HB3	1:A:106:ILE:HG23	3	0.15	0.02	0.15
(1,1514)	1:A:95:ARG:HA	1:A:98:ASN:HB3	3	0.14	0.04	0.12
(1,2173)	1:A:178:ASN:H	1:A:179:PRO:HD3	3	0.14	0.03	0.12
(1,1888)	1:A:115:MET:HG3	1:A:116:PRO:HD3	2	0.76	0.01	0.76
(1,1848)	1:A:101:GLN:HA	1:A:107:LYS:HB3	2	0.71	0.2	0.71
(1,2382)	1:A:223:LYS:HA	1:A:226:ARG:HG3	2	0.68	0.09	0.68
(1,683)	1:A:80:LYS:HD3	1:A:106:ILE:HG21	2	0.68	0.43	0.68
(1,683)	1:A:80:LYS:HD3	1:A:106:ILE:HG22	2	0.68	0.43	0.68
(1,683)	1:A:80:LYS:HD3	1:A:106:ILE:HG23	2	0.68	0.43	0.68
(1,2294)	1:A:200:ARG:HA	1:A:200:ARG:HG3	2	0.57	0.03	0.57
(1,567)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:209:ILE:HD11	2	0.5	0.16	0.5
(1,567)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:209:ILE:HD12	2	0.5	0.16	0.5
(1,567)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:209:ILE:HD13	2	0.5	0.16	0.5
(1,673)	1:A:115:MET:HA	1:A:115:MET:HE1	2	0.45	0.0	0.45
(1,673)	1:A:115:MET:HA	1:A:115:MET:HE2	2	0.45	0.0	0.45
(1,673)	1:A:115:MET:HA	1:A:115:MET:HE3	2	0.45	0.0	0.45
(1,1422)	1:A:211:GLN:HA	1:A:211:GLN:HG3	2	0.36	0.01	0.36
(1,2322)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG11	2	0.36	0.06	0.36
(1,2322)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG12	2	0.36	0.06	0.36
(1,2322)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG13	2	0.36	0.06	0.36
(1,2322)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG21	2	0.36	0.06	0.36
(1,2322)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG22	2	0.36	0.06	0.36
(1,2322)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG23	2	0.36	0.06	0.36
(1,2135)	1:A:172:PRO:HD3	1:A:192:ILE:HB	2	0.34	0.06	0.34
(1,1866)	1:A:105:GLY:HA2	1:A:107:LYS:HE3	2	0.32	0.09	0.32
(1,1866)	1:A:105:GLY:HA3	1:A:107:LYS:HE3	2	0.32	0.09	0.32
(1,1703)	1:A:82:VAL:HG11	1:A:132:SER:HB3	2	0.29	0.01	0.29
(1,1703)	1:A:82:VAL:HG12	1:A:132:SER:HB3	2	0.29	0.01	0.29
(1,1703)	1:A:82:VAL:HG13	1:A:132:SER:HB3	2	0.29	0.01	0.29
(1,1703)	1:A:82:VAL:HG21	1:A:132:SER:HB3	2	0.29	0.01	0.29
(1,1703)	1:A:82:VAL:HG22	1:A:132:SER:HB3	2	0.29	0.01	0.29

Continued on next page...

Continued from previous page...

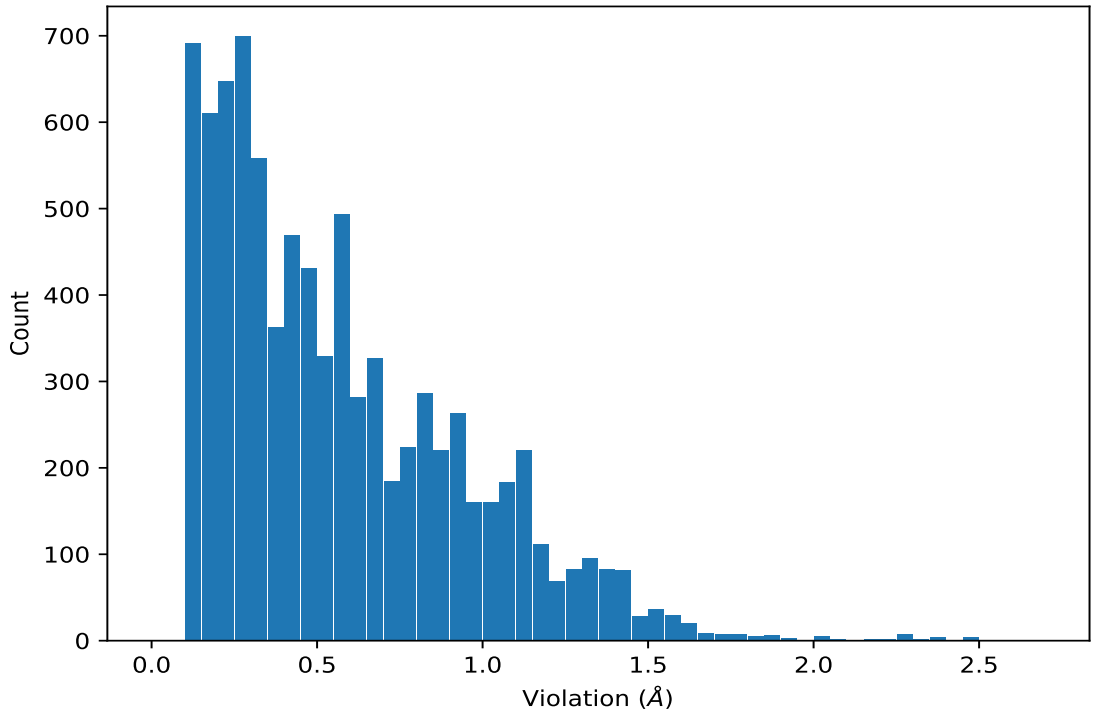
Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(1,1703)	1:A:82:VAL:HG23	1:A:132:SER:HB3	2	0.29	0.01	0.29
(1,1475)	1:A:74:SER:HA	1:A:75:GLU:H	2	0.28	0.0	0.28
(1,2113)	1:A:169:SER:HB3	1:A:170:VAL:H	2	0.27	0.16	0.27
(1,2278)	1:A:196:GLU:HB3	1:A:199:SER:HB3	2	0.25	0.04	0.25
(1,1540)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:213:SER:HA	2	0.24	0.0	0.24
(1,2114)	1:A:169:SER:HB3	1:A:171:ILE:HD11	2	0.24	0.1	0.24
(1,2114)	1:A:169:SER:HB3	1:A:171:ILE:HD12	2	0.24	0.1	0.24
(1,2114)	1:A:169:SER:HB3	1:A:171:ILE:HD13	2	0.24	0.1	0.24
(1,1490)	1:A:183:GLU:HA	1:A:183:GLU:HB3	2	0.23	0.0	0.23
(1,2348)	1:A:216:LYS:HB3	1:A:216:LYS:HD3	2	0.22	0.01	0.22
(1,2133)	1:A:172:PRO:HG3	1:A:192:ILE:HD11	2	0.2	0.06	0.2
(1,2133)	1:A:172:PRO:HG3	1:A:192:ILE:HD12	2	0.2	0.06	0.2
(1,2133)	1:A:172:PRO:HG3	1:A:192:ILE:HD13	2	0.2	0.06	0.2
(1,2398)	1:A:226:ARG:HB3	1:A:227:ASN:HD21	2	0.17	0.05	0.17
(1,2398)	1:A:226:ARG:HB3	1:A:227:ASN:HD22	2	0.17	0.05	0.17
(1,1017)	1:A:122:LEU:HA	1:A:122:LEU:HD11	2	0.16	0.01	0.16
(1,1017)	1:A:122:LEU:HA	1:A:122:LEU:HD12	2	0.16	0.01	0.16
(1,1017)	1:A:122:LEU:HA	1:A:122:LEU:HD13	2	0.16	0.01	0.16
(1,1732)	1:A:85:HIS:HB3	1:A:93:ALA:HA	2	0.16	0.06	0.16
(1,789)	1:A:186:PRO:HB3	1:A:188:ALA:HB1	2	0.16	0.0	0.16
(1,789)	1:A:186:PRO:HB3	1:A:188:ALA:HB2	2	0.16	0.0	0.16
(1,789)	1:A:186:PRO:HB3	1:A:188:ALA:HB3	2	0.16	0.0	0.16
(1,2200)	1:A:183:GLU:H	1:A:183:GLU:HG3	2	0.15	0.0	0.15
(1,1505)	1:A:212:GLU:HA	1:A:215:TYR:HA	2	0.12	0.01	0.12
(1,1518)	1:A:104:PHE:HD1	1:A:106:ILE:HA	2	0.12	0.01	0.12
(1,1518)	1:A:104:PHE:HD2	1:A:106:ILE:HA	2	0.12	0.01	0.12
(1,1588)	1:A:96:VAL:HA	1:A:99:LEU:HD11	2	0.12	0.0	0.12
(1,1588)	1:A:96:VAL:HA	1:A:99:LEU:HD12	2	0.12	0.0	0.12
(1,1588)	1:A:96:VAL:HA	1:A:99:LEU:HD13	2	0.12	0.0	0.12
(1,73)	1:A:104:PHE:H	1:A:104:PHE:HB3	2	0.11	0.0	0.11

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

9.5 All violated distance restraints (i)

9.5.1 Histogram : Distribution of distance violations (i)

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



9.5.2 Table : All distance violations (i)

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

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1224)	1:A:223:LYS:HD3	1:A:224:GLU:HB3	11	2.69
(1,2204)	1:A:183:GLU:HG3	1:A:184:ARG:HG3	19	2.57
(1,2197)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:184:ARG:HD3	6	2.54
(1,1635)	1:A:71:PRO:HB3	1:A:74:SER:HB3	9	2.46
(1,1224)	1:A:223:LYS:HD3	1:A:224:GLU:HB3	17	2.46
(1,2204)	1:A:183:GLU:HG3	1:A:184:ARG:HG3	8	2.45
(1,1635)	1:A:71:PRO:HB3	1:A:74:SER:HB3	18	2.45
(1,2197)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:184:ARG:HD3	14	2.4
(1,2389)	1:A:223:LYS:HE3	1:A:224:GLU:HB3	16	2.36
(1,2197)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:184:ARG:HD3	3	2.36
(1,2197)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:184:ARG:HD3	8	2.35
(1,2197)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:184:ARG:HD3	1	2.32
(1,2384)	1:A:223:LYS:HB3	1:A:224:GLU:HG3	11	2.31
(1,2389)	1:A:223:LYS:HE3	1:A:224:GLU:HB3	1	2.3
(1,2197)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:184:ARG:HD3	20	2.29
(1,2389)	1:A:223:LYS:HE3	1:A:224:GLU:HB3	14	2.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2197)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:184:ARG:HD3	12	2.28
(1,2389)	1:A:223:LYS:HE3	1:A:224:GLU:HB3	12	2.26
(1,2197)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:184:ARG:HD3	15	2.26
(1,2389)	1:A:223:LYS:HE3	1:A:224:GLU:HB3	9	2.25
(1,2197)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:184:ARG:HD3	17	2.24
(1,2202)	1:A:183:GLU:HB3	1:A:184:ARG:HD3	4	2.22
(1,1346)	1:A:145:ARG:HB3	1:A:146:ASP:HB3	10	2.16
(1,2197)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:184:ARG:HD3	5	2.15
(1,2197)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:184:ARG:HD3	4	2.1
(1,2384)	1:A:223:LYS:HB3	1:A:224:GLU:HG3	1	2.09
(1,2197)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:184:ARG:HD3	19	2.06
(1,2384)	1:A:223:LYS:HB3	1:A:224:GLU:HG3	14	2.02
(1,2197)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:184:ARG:HD3	7	2.02
(1,2197)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:184:ARG:HD3	10	2.02
(1,1224)	1:A:223:LYS:HD3	1:A:224:GLU:HB3	5	2.02
(1,1635)	1:A:71:PRO:HB3	1:A:74:SER:HB3	7	2.01
(1,2202)	1:A:183:GLU:HB3	1:A:184:ARG:HD3	20	1.97
(1,2197)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:184:ARG:HD3	9	1.92
(1,2197)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:184:ARG:HD3	16	1.92
(1,1213)	1:A:165:HIS:HA	1:A:166:LYS:HD3	18	1.91
(1,2197)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:184:ARG:HD3	13	1.9
(1,2384)	1:A:223:LYS:HB3	1:A:224:GLU:HG3	12	1.89
(1,2392)	1:A:224:GLU:HA	1:A:227:ASN:HB3	11	1.88
(1,2389)	1:A:223:LYS:HE3	1:A:224:GLU:HB3	3	1.87
(1,1346)	1:A:145:ARG:HB3	1:A:146:ASP:HB3	15	1.87
(1,1224)	1:A:223:LYS:HD3	1:A:224:GLU:HB3	20	1.87
(1,2106)	1:A:167:TYR:HB3	1:A:221:ILE:H	6	1.81
(1,1346)	1:A:145:ARG:HB3	1:A:146:ASP:HB3	19	1.81
(1,1346)	1:A:145:ARG:HB3	1:A:146:ASP:HB3	14	1.8
(1,1241)	1:A:206:VAL:HB	1:A:210:PHE:HB3	1	1.8
(1,1224)	1:A:223:LYS:HD3	1:A:224:GLU:HB3	3	1.8
(1,1346)	1:A:145:ARG:HB3	1:A:146:ASP:HB3	4	1.78
(1,2004)	1:A:144:LEU:HA	1:A:148:TRP:HB3	10	1.77
(1,2202)	1:A:183:GLU:HB3	1:A:184:ARG:HD3	12	1.76
(1,2197)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:184:ARG:HD3	11	1.76
(1,261)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:185:THR:H	17	1.75
(1,2202)	1:A:183:GLU:HB3	1:A:184:ARG:HD3	7	1.75
(1,2197)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:184:ARG:HD3	2	1.75
(1,261)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:185:THR:H	12	1.74
(1,261)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:185:THR:H	15	1.73
(1,2202)	1:A:183:GLU:HB3	1:A:184:ARG:HD3	6	1.73
(1,1346)	1:A:145:ARG:HB3	1:A:146:ASP:HB3	11	1.73

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,261)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:185:THR:H	6	1.72
(1,2202)	1:A:183:GLU:HB3	1:A:184:ARG:HD3	15	1.72
(1,1342)	1:A:215:TYR:HD1	1:A:216:LYS:HE3	17	1.72
(1,1342)	1:A:215:TYR:HD2	1:A:216:LYS:HE3	17	1.72
(1,2106)	1:A:167:TYR:HB3	1:A:221:ILE:H	12	1.7
(1,1241)	1:A:206:VAL:HB	1:A:210:PHE:HB3	2	1.7
(1,1346)	1:A:145:ARG:HB3	1:A:146:ASP:HB3	17	1.69
(1,1241)	1:A:206:VAL:HB	1:A:210:PHE:HB3	15	1.69
(1,1241)	1:A:206:VAL:HB	1:A:210:PHE:HB3	20	1.69
(1,1330)	1:A:102:ASP:HA	1:A:107:LYS:HE3	15	1.68
(1,2331)	1:A:212:GLU:HG3	1:A:216:LYS:HE3	14	1.67
(1,2106)	1:A:167:TYR:HB3	1:A:221:ILE:H	15	1.66
(1,1346)	1:A:145:ARG:HB3	1:A:146:ASP:HB3	8	1.66
(1,2202)	1:A:183:GLU:HB3	1:A:184:ARG:HD3	17	1.65
(1,2152)	1:A:176:LEU:HA	1:A:198:GLU:HG3	16	1.65
(1,1346)	1:A:145:ARG:HB3	1:A:146:ASP:HB3	9	1.65
(1,261)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:185:THR:H	3	1.64
(1,1342)	1:A:215:TYR:HD1	1:A:216:LYS:HE3	2	1.64
(1,1342)	1:A:215:TYR:HD2	1:A:216:LYS:HE3	2	1.64
(1,1241)	1:A:206:VAL:HB	1:A:210:PHE:HB3	8	1.64
(1,2370)	1:A:220:THR:HA	1:A:223:LYS:HB3	3	1.63
(1,1346)	1:A:145:ARG:HB3	1:A:146:ASP:HB3	5	1.63
(1,261)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:185:THR:H	8	1.62
(1,1241)	1:A:206:VAL:HB	1:A:210:PHE:HB3	5	1.62
(1,1241)	1:A:206:VAL:HB	1:A:210:PHE:HB3	16	1.62
(1,1213)	1:A:165:HIS:HA	1:A:166:LYS:HD3	16	1.62
(1,2331)	1:A:212:GLU:HG3	1:A:216:LYS:HE3	3	1.61
(1,2147)	1:A:175:PRO:HA	1:A:197:GLU:HG3	17	1.61
(1,1241)	1:A:206:VAL:HB	1:A:210:PHE:HB3	17	1.61
(1,1224)	1:A:223:LYS:HD3	1:A:224:GLU:HB3	10	1.61
(1,2152)	1:A:176:LEU:HA	1:A:198:GLU:HG3	3	1.6
(1,1241)	1:A:206:VAL:HB	1:A:210:PHE:HB3	9	1.6
(1,1241)	1:A:206:VAL:HB	1:A:210:PHE:HB3	13	1.6
(1,2147)	1:A:175:PRO:HA	1:A:197:GLU:HG3	9	1.59
(1,2081)	1:A:162:ASN:HB3	1:A:164:GLN:HE21	12	1.59
(1,2081)	1:A:162:ASN:HB3	1:A:164:GLN:HE22	12	1.59
(1,1342)	1:A:215:TYR:HD1	1:A:216:LYS:HE3	6	1.59
(1,1342)	1:A:215:TYR:HD2	1:A:216:LYS:HE3	6	1.59
(1,1241)	1:A:206:VAL:HB	1:A:210:PHE:HB3	3	1.59
(1,2331)	1:A:212:GLU:HG3	1:A:216:LYS:HE3	18	1.58
(1,2202)	1:A:183:GLU:HB3	1:A:184:ARG:HD3	3	1.58
(1,2152)	1:A:176:LEU:HA	1:A:198:GLU:HG3	2	1.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2152)	1:A:176:LEU:HA	1:A:198:GLU:HG3	7	1.58
(1,2004)	1:A:144:LEU:HA	1:A:148:TRP:HB3	15	1.58
(1,1468)	1:A:100:LEU:HA	1:A:104:PHE:HB3	15	1.58
(1,1241)	1:A:206:VAL:HB	1:A:210:PHE:HB3	4	1.58
(1,1241)	1:A:206:VAL:HB	1:A:210:PHE:HB3	6	1.58
(1,1241)	1:A:206:VAL:HB	1:A:210:PHE:HB3	7	1.58
(1,261)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:185:THR:H	1	1.57
(1,2384)	1:A:223:LYS:HB3	1:A:224:GLU:HG3	7	1.57
(1,1213)	1:A:165:HIS:HA	1:A:166:LYS:HD3	19	1.57
(1,1209)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:221:ILE:HD11	7	1.57
(1,1209)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:221:ILE:HD12	7	1.57
(1,1209)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:221:ILE:HD13	7	1.57
(1,2202)	1:A:183:GLU:HB3	1:A:184:ARG:HD3	14	1.56
(1,1241)	1:A:206:VAL:HB	1:A:210:PHE:HB3	19	1.56
(1,2389)	1:A:223:LYS:HE3	1:A:224:GLU:HB3	11	1.55
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG11	3	1.55
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG12	3	1.55
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG13	3	1.55
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG21	3	1.55
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG22	3	1.55
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG23	3	1.55
(1,2379)	1:A:223:LYS:H	1:A:223:LYS:HE3	6	1.54
(1,1346)	1:A:145:ARG:HB3	1:A:146:ASP:HB3	6	1.54
(1,1346)	1:A:145:ARG:HB3	1:A:146:ASP:HB3	12	1.54
(1,2147)	1:A:175:PRO:HA	1:A:197:GLU:HG3	19	1.53
(1,2081)	1:A:162:ASN:HB3	1:A:164:GLN:HE21	13	1.53
(1,2081)	1:A:162:ASN:HB3	1:A:164:GLN:HE22	13	1.53
(1,2004)	1:A:144:LEU:HA	1:A:148:TRP:HB3	7	1.53
(1,1346)	1:A:145:ARG:HB3	1:A:146:ASP:HB3	3	1.53
(1,2202)	1:A:183:GLU:HB3	1:A:184:ARG:HD3	1	1.52
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG11	4	1.52
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG12	4	1.52
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG13	4	1.52
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG21	4	1.52
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG22	4	1.52
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG23	4	1.52
(1,1231)	1:A:111:ILE:HG21	1:A:114:GLU:HB3	5	1.52
(1,1231)	1:A:111:ILE:HG22	1:A:114:GLU:HB3	5	1.52
(1,1231)	1:A:111:ILE:HG23	1:A:114:GLU:HB3	5	1.52
(1,2384)	1:A:223:LYS:HB3	1:A:224:GLU:HG3	17	1.51
(1,2369)	1:A:219:GLN:HE21	1:A:223:LYS:HE3	4	1.51
(1,2369)	1:A:219:GLN:HE22	1:A:223:LYS:HE3	4	1.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2369)	1:A:219:GLN:HE21	1:A:223:LYS:HE3	13	1.51
(1,2369)	1:A:219:GLN:HE22	1:A:223:LYS:HE3	13	1.51
(1,2369)	1:A:219:GLN:HE21	1:A:223:LYS:HE3	15	1.51
(1,2369)	1:A:219:GLN:HE22	1:A:223:LYS:HE3	15	1.51
(1,2004)	1:A:144:LEU:HA	1:A:148:TRP:HB3	8	1.51
(1,1468)	1:A:100:LEU:HA	1:A:104:PHE:HB3	9	1.51
(1,1346)	1:A:145:ARG:HB3	1:A:146:ASP:HB3	13	1.51
(1,1241)	1:A:206:VAL:HB	1:A:210:PHE:HB3	12	1.51
(1,309)	1:A:223:LYS:H	1:A:224:GLU:HB3	5	1.5
(1,1468)	1:A:100:LEU:HA	1:A:104:PHE:HB3	3	1.5
(1,1241)	1:A:206:VAL:HB	1:A:210:PHE:HB3	11	1.5
(1,1241)	1:A:206:VAL:HB	1:A:210:PHE:HB3	14	1.5
(1,1241)	1:A:206:VAL:HB	1:A:210:PHE:HB3	18	1.5
(1,1209)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:221:ILE:HD11	16	1.5
(1,1209)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:221:ILE:HD12	16	1.5
(1,1209)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:221:ILE:HD13	16	1.5
(1,309)	1:A:223:LYS:H	1:A:224:GLU:HB3	15	1.49
(1,309)	1:A:223:LYS:H	1:A:224:GLU:HB3	20	1.49
(1,2004)	1:A:144:LEU:HA	1:A:148:TRP:HB3	16	1.49
(1,1355)	1:A:182:ARG:HD3	1:A:190:GLN:HE22	6	1.49
(1,1241)	1:A:206:VAL:HB	1:A:210:PHE:HB3	10	1.49
(1,309)	1:A:223:LYS:H	1:A:224:GLU:HB3	9	1.48
(1,309)	1:A:223:LYS:H	1:A:224:GLU:HB3	18	1.48
(1,261)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:185:THR:H	5	1.48
(1,2389)	1:A:223:LYS:HE3	1:A:224:GLU:HB3	17	1.48
(1,2330)	1:A:212:GLU:HG3	1:A:216:LYS:HD3	12	1.48
(1,261)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:185:THR:H	14	1.47
(1,2389)	1:A:223:LYS:HE3	1:A:224:GLU:HB3	8	1.47
(1,2152)	1:A:176:LEU:HA	1:A:198:GLU:HG3	10	1.47
(1,2081)	1:A:162:ASN:HB3	1:A:164:GLN:HE21	15	1.47
(1,2081)	1:A:162:ASN:HB3	1:A:164:GLN:HE22	15	1.47
(1,1359)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HD11	18	1.47
(1,1359)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HD12	18	1.47
(1,1359)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HD13	18	1.47
(1,1346)	1:A:145:ARG:HB3	1:A:146:ASP:HB3	18	1.47
(1,309)	1:A:223:LYS:H	1:A:224:GLU:HB3	1	1.46
(1,2081)	1:A:162:ASN:HB3	1:A:164:GLN:HE21	4	1.46
(1,2081)	1:A:162:ASN:HB3	1:A:164:GLN:HE22	4	1.46
(1,1595)	1:A:220:THR:HA	1:A:223:LYS:HD3	6	1.46
(1,1595)	1:A:220:THR:HA	1:A:223:LYS:HD3	20	1.46
(1,1468)	1:A:100:LEU:HA	1:A:104:PHE:HB3	10	1.46
(1,1359)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HD11	3	1.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1359)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HD12	3	1.46
(1,1359)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HD13	3	1.46
(1,309)	1:A:223:LYS:H	1:A:224:GLU:HB3	11	1.45
(1,1468)	1:A:100:LEU:HA	1:A:104:PHE:HB3	16	1.45
(1,967)	1:A:204:THR:HG21	1:A:207:GLU:HB3	5	1.44
(1,967)	1:A:204:THR:HG22	1:A:207:GLU:HB3	5	1.44
(1,967)	1:A:204:THR:HG23	1:A:207:GLU:HB3	5	1.44
(1,2392)	1:A:224:GLU:HA	1:A:227:ASN:HB3	4	1.44
(1,2152)	1:A:176:LEU:HA	1:A:198:GLU:HG3	19	1.44
(1,2021)	1:A:145:ARG:HD3	1:A:146:ASP:H	8	1.44
(1,1595)	1:A:220:THR:HA	1:A:223:LYS:HD3	10	1.44
(1,1468)	1:A:100:LEU:HA	1:A:104:PHE:HB3	14	1.44
(1,1359)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HD11	9	1.44
(1,1359)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HD12	9	1.44
(1,1359)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HD13	9	1.44
(1,1331)	1:A:105:GLY:H	1:A:107:LYS:HE3	15	1.44
(1,967)	1:A:204:THR:HG21	1:A:207:GLU:HB3	3	1.43
(1,967)	1:A:204:THR:HG22	1:A:207:GLU:HB3	3	1.43
(1,967)	1:A:204:THR:HG23	1:A:207:GLU:HB3	3	1.43
(1,413)	1:A:218:GLN:HG3	1:A:221:ILE:H	1	1.43
(1,413)	1:A:218:GLN:HG3	1:A:221:ILE:H	14	1.43
(1,309)	1:A:223:LYS:H	1:A:224:GLU:HB3	2	1.43
(1,309)	1:A:223:LYS:H	1:A:224:GLU:HB3	4	1.43
(1,309)	1:A:223:LYS:H	1:A:224:GLU:HB3	19	1.43
(1,2202)	1:A:183:GLU:HB3	1:A:184:ARG:HD3	10	1.43
(1,2143)	1:A:173:MET:HE1	1:A:202:PHE:HB3	6	1.43
(1,2143)	1:A:173:MET:HE2	1:A:202:PHE:HB3	6	1.43
(1,2143)	1:A:173:MET:HE3	1:A:202:PHE:HB3	6	1.43
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG11	6	1.43
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG12	6	1.43
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG13	6	1.43
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG21	6	1.43
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG22	6	1.43
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG23	6	1.43
(1,2021)	1:A:145:ARG:HD3	1:A:146:ASP:H	4	1.43
(1,2021)	1:A:145:ARG:HD3	1:A:146:ASP:H	17	1.43
(1,2004)	1:A:144:LEU:HA	1:A:148:TRP:HB3	19	1.43
(1,1993)	1:A:141:GLU:H	1:A:180:LEU:HB3	3	1.43
(1,1993)	1:A:141:GLU:H	1:A:180:LEU:HB3	8	1.43
(1,1359)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HD11	5	1.43
(1,1359)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HD12	5	1.43
(1,1359)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HD13	5	1.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,967)	1:A:204:THR:HG21	1:A:207:GLU:HB3	16	1.42
(1,967)	1:A:204:THR:HG22	1:A:207:GLU:HB3	16	1.42
(1,967)	1:A:204:THR:HG23	1:A:207:GLU:HB3	16	1.42
(1,863)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG11	20	1.42
(1,863)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG12	20	1.42
(1,863)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG13	20	1.42
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG11	15	1.42
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG12	15	1.42
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG13	15	1.42
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG21	15	1.42
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG22	15	1.42
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG23	15	1.42
(1,1468)	1:A:100:LEU:HA	1:A:104:PHE:HB3	4	1.42
(1,1468)	1:A:100:LEU:HA	1:A:104:PHE:HB3	12	1.42
(1,1468)	1:A:100:LEU:HA	1:A:104:PHE:HB3	17	1.42
(1,1359)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HD11	11	1.42
(1,1359)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HD12	11	1.42
(1,1359)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HD13	11	1.42
(1,1359)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HD11	14	1.42
(1,1359)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HD12	14	1.42
(1,1359)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HD13	14	1.42
(1,967)	1:A:204:THR:HG21	1:A:207:GLU:HB3	4	1.41
(1,967)	1:A:204:THR:HG22	1:A:207:GLU:HB3	4	1.41
(1,967)	1:A:204:THR:HG23	1:A:207:GLU:HB3	4	1.41
(1,967)	1:A:204:THR:HG21	1:A:207:GLU:HB3	11	1.41
(1,967)	1:A:204:THR:HG22	1:A:207:GLU:HB3	11	1.41
(1,967)	1:A:204:THR:HG23	1:A:207:GLU:HB3	11	1.41
(1,753)	1:A:133:ALA:HB1	1:A:215:TYR:HB3	16	1.41
(1,753)	1:A:133:ALA:HB2	1:A:215:TYR:HB3	16	1.41
(1,753)	1:A:133:ALA:HB3	1:A:215:TYR:HB3	16	1.41
(1,309)	1:A:223:LYS:H	1:A:224:GLU:HB3	7	1.41
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG11	1	1.41
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG12	1	1.41
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG13	1	1.41
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG21	1	1.41
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG22	1	1.41
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG23	1	1.41
(1,2021)	1:A:145:ARG:HD3	1:A:146:ASP:H	7	1.41
(1,1468)	1:A:100:LEU:HA	1:A:104:PHE:HB3	13	1.41
(1,1372)	1:A:163:ARG:HD3	1:A:164:GLN:H	18	1.41
(1,1355)	1:A:182:ARG:HD3	1:A:190:GLN:HE22	15	1.41
(1,1224)	1:A:223:LYS:HD3	1:A:224:GLU:HB3	7	1.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2377)	1:A:222:TRP:HE1	1:A:226:ARG:HD3	5	1.4
(1,1993)	1:A:141:GLU:H	1:A:180:LEU:HB3	16	1.4
(1,1535)	1:A:77:VAL:HA	1:A:78:PHE:HB3	6	1.4
(1,1468)	1:A:100:LEU:HA	1:A:104:PHE:HB3	5	1.4
(1,1468)	1:A:100:LEU:HA	1:A:104:PHE:HB3	19	1.4
(1,1342)	1:A:215:TYR:HD1	1:A:216:LYS:HE3	13	1.4
(1,1342)	1:A:215:TYR:HD2	1:A:216:LYS:HE3	13	1.4
(1,1329)	1:A:101:GLN:HA	1:A:107:LYS:HE3	17	1.4
(1,1209)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:221:ILE:HD11	19	1.4
(1,1209)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:221:ILE:HD12	19	1.4
(1,1209)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:221:ILE:HD13	19	1.4
(1,2149)	1:A:176:LEU:H	1:A:197:GLU:HG3	9	1.39
(1,1535)	1:A:77:VAL:HA	1:A:78:PHE:HB3	20	1.39
(1,1359)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HD11	6	1.39
(1,1359)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HD12	6	1.39
(1,1359)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HD13	6	1.39
(1,1359)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HD11	13	1.39
(1,1359)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HD12	13	1.39
(1,1359)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HD13	13	1.39
(1,309)	1:A:223:LYS:H	1:A:224:GLU:HB3	3	1.38
(1,2021)	1:A:145:ARG:HD3	1:A:146:ASP:H	9	1.38
(1,1355)	1:A:182:ARG:HD3	1:A:190:GLN:HE22	16	1.38
(1,1268)	1:A:210:PHE:HA	1:A:211:GLN:HG3	4	1.38
(1,1268)	1:A:210:PHE:HA	1:A:211:GLN:HG3	6	1.38
(1,967)	1:A:204:THR:HG21	1:A:207:GLU:HB3	6	1.37
(1,967)	1:A:204:THR:HG22	1:A:207:GLU:HB3	6	1.37
(1,967)	1:A:204:THR:HG23	1:A:207:GLU:HB3	6	1.37
(1,753)	1:A:133:ALA:HB1	1:A:215:TYR:HB3	19	1.37
(1,753)	1:A:133:ALA:HB2	1:A:215:TYR:HB3	19	1.37
(1,753)	1:A:133:ALA:HB3	1:A:215:TYR:HB3	19	1.37
(1,2309)	1:A:205:GLN:HA	1:A:208:ARG:HG3	12	1.37
(1,1682)	1:A:80:LYS:HE3	1:A:81:PHE:HB3	8	1.37
(1,1535)	1:A:77:VAL:HA	1:A:78:PHE:HB3	13	1.37
(1,1535)	1:A:77:VAL:HA	1:A:78:PHE:HB3	19	1.37
(1,1359)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HD11	10	1.37
(1,1359)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HD12	10	1.37
(1,1359)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HD13	10	1.37
(1,1359)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HD11	17	1.37
(1,1359)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HD12	17	1.37
(1,1359)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HD13	17	1.37
(1,1359)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HD11	20	1.37
(1,1359)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HD12	20	1.37

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1359)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HD13	20	1.37
(1,1268)	1:A:210:PHE:HA	1:A:211:GLN:HG3	2	1.37
(1,1268)	1:A:210:PHE:HA	1:A:211:GLN:HG3	7	1.37
(1,967)	1:A:204:THR:HG21	1:A:207:GLU:HB3	8	1.36
(1,967)	1:A:204:THR:HG22	1:A:207:GLU:HB3	8	1.36
(1,967)	1:A:204:THR:HG23	1:A:207:GLU:HB3	8	1.36
(1,967)	1:A:204:THR:HG21	1:A:207:GLU:HB3	20	1.36
(1,967)	1:A:204:THR:HG22	1:A:207:GLU:HB3	20	1.36
(1,967)	1:A:204:THR:HG23	1:A:207:GLU:HB3	20	1.36
(1,687)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:HG21	16	1.36
(1,687)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:HG22	16	1.36
(1,687)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:HG23	16	1.36
(1,413)	1:A:218:GLN:HG3	1:A:221:ILE:H	6	1.36
(1,261)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:185:THR:H	18	1.36
(1,261)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:185:THR:H	20	1.36
(1,2363)	1:A:219:GLN:HG3	1:A:223:LYS:HG3	17	1.36
(1,1350)	1:A:200:ARG:HB3	1:A:200:ARG:HD3	9	1.36
(1,1346)	1:A:145:ARG:HB3	1:A:146:ASP:HB3	2	1.36
(1,1224)	1:A:223:LYS:HD3	1:A:224:GLU:HB3	2	1.36
(1,753)	1:A:133:ALA:HB1	1:A:215:TYR:HB3	6	1.35
(1,753)	1:A:133:ALA:HB2	1:A:215:TYR:HB3	6	1.35
(1,753)	1:A:133:ALA:HB3	1:A:215:TYR:HB3	6	1.35
(1,444)	1:A:106:ILE:H	1:A:107:LYS:HE3	17	1.35
(1,43)	1:A:182:ARG:HB3	1:A:190:GLN:HE22	15	1.35
(1,2204)	1:A:183:GLU:HG3	1:A:184:ARG:HG3	18	1.35
(1,2143)	1:A:173:MET:HE1	1:A:202:PHE:HB3	9	1.35
(1,2143)	1:A:173:MET:HE2	1:A:202:PHE:HB3	9	1.35
(1,2143)	1:A:173:MET:HE3	1:A:202:PHE:HB3	9	1.35
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG11	10	1.35
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG12	10	1.35
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG13	10	1.35
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG21	10	1.35
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG22	10	1.35
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG23	10	1.35
(1,1359)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HD11	8	1.35
(1,1359)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HD12	8	1.35
(1,1359)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HD13	8	1.35
(1,1346)	1:A:145:ARG:HB3	1:A:146:ASP:HB3	16	1.35
(1,1334)	1:A:102:ASP:H	1:A:107:LYS:HE3	17	1.35
(1,1334)	1:A:102:ASP:H	1:A:107:LYS:HE3	19	1.35
(1,1268)	1:A:210:PHE:HA	1:A:211:GLN:HG3	1	1.35
(1,753)	1:A:133:ALA:HB1	1:A:215:TYR:HB3	12	1.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,753)	1:A:133:ALA:HB2	1:A:215:TYR:HB3	12	1.34
(1,753)	1:A:133:ALA:HB3	1:A:215:TYR:HB3	12	1.34
(1,413)	1:A:218:GLN:HG3	1:A:221:ILE:H	8	1.34
(1,2143)	1:A:173:MET:HE1	1:A:202:PHE:HB3	13	1.34
(1,2143)	1:A:173:MET:HE2	1:A:202:PHE:HB3	13	1.34
(1,2143)	1:A:173:MET:HE3	1:A:202:PHE:HB3	13	1.34
(1,1634)	1:A:71:PRO:HB3	1:A:74:SER:HA	4	1.34
(1,1634)	1:A:71:PRO:HB3	1:A:74:SER:HA	5	1.34
(1,1634)	1:A:71:PRO:HB3	1:A:74:SER:HA	6	1.34
(1,1549)	1:A:107:LYS:HE3	1:A:108:PRO:HA	4	1.34
(1,1468)	1:A:100:LEU:HA	1:A:104:PHE:HB3	8	1.34
(1,1468)	1:A:100:LEU:HA	1:A:104:PHE:HB3	18	1.34
(1,1359)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HD11	16	1.34
(1,1359)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HD12	16	1.34
(1,1359)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HD13	16	1.34
(1,1268)	1:A:210:PHE:HA	1:A:211:GLN:HG3	3	1.34
(1,1268)	1:A:210:PHE:HA	1:A:211:GLN:HG3	8	1.34
(1,1268)	1:A:210:PHE:HA	1:A:211:GLN:HG3	15	1.34
(1,1268)	1:A:210:PHE:HA	1:A:211:GLN:HG3	18	1.34
(1,1268)	1:A:210:PHE:HA	1:A:211:GLN:HG3	19	1.34
(1,1209)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:221:ILE:HD11	1	1.34
(1,1209)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:221:ILE:HD12	1	1.34
(1,1209)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:221:ILE:HD13	1	1.34
(1,261)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:185:THR:H	11	1.33
(1,1634)	1:A:71:PRO:HB3	1:A:74:SER:HA	16	1.33
(1,1566)	1:A:71:PRO:HG3	1:A:74:SER:HB3	18	1.33
(1,1468)	1:A:100:LEU:HA	1:A:104:PHE:HB3	11	1.33
(1,1359)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HD11	19	1.33
(1,1359)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HD12	19	1.33
(1,1359)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HD13	19	1.33
(1,1268)	1:A:210:PHE:HA	1:A:211:GLN:HG3	5	1.33
(1,1268)	1:A:210:PHE:HA	1:A:211:GLN:HG3	9	1.33
(1,1268)	1:A:210:PHE:HA	1:A:211:GLN:HG3	12	1.33
(1,1268)	1:A:210:PHE:HA	1:A:211:GLN:HG3	14	1.33
(1,1268)	1:A:210:PHE:HA	1:A:211:GLN:HG3	20	1.33
(1,1210)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:221:ILE:HG21	10	1.33
(1,1210)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:221:ILE:HG22	10	1.33
(1,1210)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:221:ILE:HG23	10	1.33
(1,687)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:HG21	8	1.32
(1,687)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:HG22	8	1.32
(1,687)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:HG23	8	1.32
(1,261)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:185:THR:H	9	1.32

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2369)	1:A:219:GLN:HE21	1:A:223:LYS:HE3	7	1.32
(1,2369)	1:A:219:GLN:HE22	1:A:223:LYS:HE3	7	1.32
(1,2351)	1:A:216:LYS:HG3	1:A:216:LYS:HE3	12	1.32
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG11	12	1.32
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG12	12	1.32
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG13	12	1.32
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG21	12	1.32
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG22	12	1.32
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG23	12	1.32
(1,1634)	1:A:71:PRO:HB3	1:A:74:SER:HA	10	1.32
(1,1634)	1:A:71:PRO:HB3	1:A:74:SER:HA	15	1.32
(1,1268)	1:A:210:PHE:HA	1:A:211:GLN:HG3	10	1.32
(1,1268)	1:A:210:PHE:HA	1:A:211:GLN:HG3	11	1.32
(1,1209)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:221:ILE:HD11	10	1.32
(1,1209)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:221:ILE:HD12	10	1.32
(1,1209)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:221:ILE:HD13	10	1.32
(1,753)	1:A:133:ALA:HB1	1:A:215:TYR:HB3	15	1.31
(1,753)	1:A:133:ALA:HB2	1:A:215:TYR:HB3	15	1.31
(1,753)	1:A:133:ALA:HB3	1:A:215:TYR:HB3	15	1.31
(1,687)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:HG21	19	1.31
(1,687)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:HG22	19	1.31
(1,687)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:HG23	19	1.31
(1,413)	1:A:218:GLN:HG3	1:A:221:ILE:H	16	1.31
(1,3)	1:A:80:LYS:HD3	1:A:81:PHE:H	4	1.31
(1,1993)	1:A:141:GLU:H	1:A:180:LEU:HB3	10	1.31
(1,1468)	1:A:100:LEU:HA	1:A:104:PHE:HB3	2	1.31
(1,1359)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HD11	4	1.31
(1,1359)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HD12	4	1.31
(1,1359)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HD13	4	1.31
(1,1350)	1:A:200:ARG:HB3	1:A:200:ARG:HD3	16	1.31
(1,1268)	1:A:210:PHE:HA	1:A:211:GLN:HG3	17	1.31
(1,261)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:185:THR:H	13	1.3
(1,2389)	1:A:223:LYS:HE3	1:A:224:GLU:HB3	20	1.3
(1,2330)	1:A:212:GLU:HG3	1:A:216:LYS:HD3	15	1.3
(1,2329)	1:A:212:GLU:HG3	1:A:216:LYS:HG3	2	1.3
(1,2143)	1:A:173:MET:HE1	1:A:202:PHE:HB3	5	1.3
(1,2143)	1:A:173:MET:HE2	1:A:202:PHE:HB3	5	1.3
(1,2143)	1:A:173:MET:HE3	1:A:202:PHE:HB3	5	1.3
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG11	17	1.3
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG12	17	1.3
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG13	17	1.3
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG21	17	1.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG22	17	1.3
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG23	17	1.3
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG11	1:A:112:PHE:HB3	16	1.3
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG12	1:A:112:PHE:HB3	16	1.3
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG13	1:A:112:PHE:HB3	16	1.3
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG21	1:A:112:PHE:HB3	16	1.3
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG22	1:A:112:PHE:HB3	16	1.3
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG23	1:A:112:PHE:HB3	16	1.3
(1,1682)	1:A:80:LYS:HE3	1:A:81:PHE:HB3	5	1.3
(1,1634)	1:A:71:PRO:HB3	1:A:74:SER:HA	8	1.3
(1,1350)	1:A:200:ARG:HB3	1:A:200:ARG:HD3	11	1.3
(1,967)	1:A:204:THR:HG21	1:A:207:GLU:HB3	17	1.29
(1,967)	1:A:204:THR:HG22	1:A:207:GLU:HB3	17	1.29
(1,967)	1:A:204:THR:HG23	1:A:207:GLU:HB3	17	1.29
(1,753)	1:A:133:ALA:HB1	1:A:215:TYR:HB3	3	1.29
(1,753)	1:A:133:ALA:HB2	1:A:215:TYR:HB3	3	1.29
(1,753)	1:A:133:ALA:HB3	1:A:215:TYR:HB3	3	1.29
(1,687)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:HG21	13	1.29
(1,687)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:HG22	13	1.29
(1,687)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:HG23	13	1.29
(1,687)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:HG21	17	1.29
(1,687)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:HG22	17	1.29
(1,687)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:HG23	17	1.29
(1,309)	1:A:223:LYS:H	1:A:224:GLU:HB3	8	1.29
(1,2392)	1:A:224:GLU:HA	1:A:227:ASN:HB3	5	1.29
(1,2152)	1:A:176:LEU:HA	1:A:198:GLU:HG3	11	1.29
(1,2143)	1:A:173:MET:HE1	1:A:202:PHE:HB3	1	1.29
(1,2143)	1:A:173:MET:HE2	1:A:202:PHE:HB3	1	1.29
(1,2143)	1:A:173:MET:HE3	1:A:202:PHE:HB3	1	1.29
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG11	1:A:112:PHE:HB3	14	1.29
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG12	1:A:112:PHE:HB3	14	1.29
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG13	1:A:112:PHE:HB3	14	1.29
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG21	1:A:112:PHE:HB3	14	1.29
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG22	1:A:112:PHE:HB3	14	1.29
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG23	1:A:112:PHE:HB3	14	1.29
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG11	1:A:112:PHE:HB3	18	1.29
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG12	1:A:112:PHE:HB3	18	1.29
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG13	1:A:112:PHE:HB3	18	1.29
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG21	1:A:112:PHE:HB3	18	1.29
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG22	1:A:112:PHE:HB3	18	1.29
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG23	1:A:112:PHE:HB3	18	1.29
(1,1634)	1:A:71:PRO:HB3	1:A:74:SER:HA	20	1.29

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1468)	1:A:100:LEU:HA	1:A:104:PHE:HB3	1	1.29
(1,1468)	1:A:100:LEU:HA	1:A:104:PHE:HB3	20	1.29
(1,1214)	1:A:166:LYS:H	1:A:166:LYS:HD3	16	1.29
(1,967)	1:A:204:THR:HG21	1:A:207:GLU:HB3	13	1.28
(1,967)	1:A:204:THR:HG22	1:A:207:GLU:HB3	13	1.28
(1,967)	1:A:204:THR:HG23	1:A:207:GLU:HB3	13	1.28
(1,687)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:HG21	20	1.28
(1,687)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:HG22	20	1.28
(1,687)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:HG23	20	1.28
(1,2392)	1:A:224:GLU:HA	1:A:227:ASN:HB3	12	1.28
(1,2309)	1:A:205:GLN:HA	1:A:208:ARG:HG3	1	1.28
(1,198)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:184:ARG:H	6	1.28
(1,179)	1:A:95:ARG:HD3	1:A:98:ASN:H	14	1.28
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG11	1:A:112:PHE:HB3	13	1.28
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG12	1:A:112:PHE:HB3	13	1.28
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG13	1:A:112:PHE:HB3	13	1.28
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG21	1:A:112:PHE:HB3	13	1.28
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG22	1:A:112:PHE:HB3	13	1.28
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG23	1:A:112:PHE:HB3	13	1.28
(1,1331)	1:A:105:GLY:H	1:A:107:LYS:HE3	17	1.28
(1,1213)	1:A:165:HIS:HA	1:A:166:LYS:HD3	7	1.28
(1,967)	1:A:204:THR:HG21	1:A:207:GLU:HB3	9	1.27
(1,967)	1:A:204:THR:HG22	1:A:207:GLU:HB3	9	1.27
(1,967)	1:A:204:THR:HG23	1:A:207:GLU:HB3	9	1.27
(1,2344)	1:A:215:TYR:HD1	1:A:216:LYS:HG3	13	1.27
(1,2344)	1:A:215:TYR:HD2	1:A:216:LYS:HG3	13	1.27
(1,198)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:184:ARG:H	3	1.27
(1,753)	1:A:133:ALA:HB1	1:A:215:TYR:HB3	1	1.26
(1,753)	1:A:133:ALA:HB2	1:A:215:TYR:HB3	1	1.26
(1,753)	1:A:133:ALA:HB3	1:A:215:TYR:HB3	1	1.26
(1,43)	1:A:182:ARG:HB3	1:A:190:GLN:HE22	2	1.26
(1,2389)	1:A:223:LYS:HE3	1:A:224:GLU:HB3	10	1.26
(1,2329)	1:A:212:GLU:HG3	1:A:216:LYS:HG3	13	1.26
(1,2152)	1:A:176:LEU:HA	1:A:198:GLU:HG3	6	1.26
(1,198)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:184:ARG:H	15	1.26
(1,1227)	1:A:223:LYS:H	1:A:223:LYS:HD3	20	1.26
(1,1209)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:221:ILE:HD11	8	1.26
(1,1209)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:221:ILE:HD12	8	1.26
(1,1209)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:221:ILE:HD13	8	1.26
(1,922)	1:A:217:THR:HG21	1:A:218:GLN:HG3	4	1.25
(1,922)	1:A:217:THR:HG22	1:A:218:GLN:HG3	4	1.25
(1,922)	1:A:217:THR:HG23	1:A:218:GLN:HG3	4	1.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,413)	1:A:218:GLN:HG3	1:A:221:ILE:H	15	1.25
(1,2369)	1:A:219:GLN:HE21	1:A:223:LYS:HE3	2	1.25
(1,2369)	1:A:219:GLN:HE22	1:A:223:LYS:HE3	2	1.25
(1,2143)	1:A:173:MET:HE1	1:A:202:PHE:HB3	12	1.25
(1,2143)	1:A:173:MET:HE2	1:A:202:PHE:HB3	12	1.25
(1,2143)	1:A:173:MET:HE3	1:A:202:PHE:HB3	12	1.25
(1,198)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:184:ARG:H	13	1.25
(1,1355)	1:A:182:ARG:HD3	1:A:190:GLN:HE22	7	1.25
(1,1227)	1:A:223:LYS:H	1:A:223:LYS:HD3	6	1.25
(1,1224)	1:A:223:LYS:HD3	1:A:224:GLU:HB3	18	1.25
(1,753)	1:A:133:ALA:HB1	1:A:215:TYR:HB3	8	1.24
(1,753)	1:A:133:ALA:HB2	1:A:215:TYR:HB3	8	1.24
(1,753)	1:A:133:ALA:HB3	1:A:215:TYR:HB3	8	1.24
(1,309)	1:A:223:LYS:H	1:A:224:GLU:HB3	14	1.24
(1,2151)	1:A:176:LEU:HA	1:A:198:GLU:HB3	18	1.24
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG11	14	1.24
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG12	14	1.24
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG13	14	1.24
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG21	14	1.24
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG22	14	1.24
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG23	14	1.24
(1,198)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:184:ARG:H	1	1.24
(1,179)	1:A:95:ARG:HD3	1:A:98:ASN:H	19	1.24
(1,179)	1:A:95:ARG:HD3	1:A:98:ASN:H	20	1.24
(1,1549)	1:A:107:LYS:HE3	1:A:108:PRO:HA	1	1.24
(1,1372)	1:A:163:ARG:HD3	1:A:164:GLN:H	11	1.24
(1,1329)	1:A:101:GLN:HA	1:A:107:LYS:HE3	19	1.24
(1,967)	1:A:204:THR:HG21	1:A:207:GLU:HB3	14	1.23
(1,967)	1:A:204:THR:HG22	1:A:207:GLU:HB3	14	1.23
(1,967)	1:A:204:THR:HG23	1:A:207:GLU:HB3	14	1.23
(1,955)	1:A:220:THR:HG21	1:A:224:GLU:HB3	17	1.23
(1,955)	1:A:220:THR:HG22	1:A:224:GLU:HB3	17	1.23
(1,955)	1:A:220:THR:HG23	1:A:224:GLU:HB3	17	1.23
(1,43)	1:A:182:ARG:HB3	1:A:190:GLN:HE22	16	1.23
(1,398)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:76:GLU:H	10	1.23
(1,2392)	1:A:224:GLU:HA	1:A:227:ASN:HB3	6	1.23
(1,2309)	1:A:205:GLN:HA	1:A:208:ARG:HG3	15	1.23
(1,2152)	1:A:176:LEU:HA	1:A:198:GLU:HG3	17	1.23
(1,2143)	1:A:173:MET:HE1	1:A:202:PHE:HB3	4	1.23
(1,2143)	1:A:173:MET:HE2	1:A:202:PHE:HB3	4	1.23
(1,2143)	1:A:173:MET:HE3	1:A:202:PHE:HB3	4	1.23
(1,2143)	1:A:173:MET:HE1	1:A:202:PHE:HB3	18	1.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2143)	1:A:173:MET:HE2	1:A:202:PHE:HB3	18	1.23
(1,2143)	1:A:173:MET:HE3	1:A:202:PHE:HB3	18	1.23
(1,198)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:184:ARG:H	18	1.23
(1,1468)	1:A:100:LEU:HA	1:A:104:PHE:HB3	6	1.23
(1,687)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:HG21	5	1.22
(1,687)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:HG22	5	1.22
(1,687)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:HG23	5	1.22
(1,687)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:HG21	14	1.22
(1,687)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:HG22	14	1.22
(1,687)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:HG23	14	1.22
(1,309)	1:A:223:LYS:H	1:A:224:GLU:HB3	12	1.22
(1,2369)	1:A:219:GLN:HE21	1:A:223:LYS:HE3	11	1.22
(1,2369)	1:A:219:GLN:HE22	1:A:223:LYS:HE3	11	1.22
(1,2309)	1:A:205:GLN:HA	1:A:208:ARG:HG3	7	1.22
(1,2101)	1:A:166:LYS:HG3	1:A:166:LYS:HE3	3	1.22
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG11	1:A:112:PHE:HB3	10	1.22
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG12	1:A:112:PHE:HB3	10	1.22
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG13	1:A:112:PHE:HB3	10	1.22
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG21	1:A:112:PHE:HB3	10	1.22
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG22	1:A:112:PHE:HB3	10	1.22
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG23	1:A:112:PHE:HB3	10	1.22
(1,1635)	1:A:71:PRO:HB3	1:A:74:SER:HB3	15	1.22
(1,1566)	1:A:71:PRO:HG3	1:A:74:SER:HB3	15	1.22
(1,1549)	1:A:107:LYS:HE3	1:A:108:PRO:HA	11	1.22
(1,1224)	1:A:223:LYS:HD3	1:A:224:GLU:HB3	19	1.22
(1,967)	1:A:204:THR:HG21	1:A:207:GLU:HB3	19	1.21
(1,967)	1:A:204:THR:HG22	1:A:207:GLU:HB3	19	1.21
(1,967)	1:A:204:THR:HG23	1:A:207:GLU:HB3	19	1.21
(1,2152)	1:A:176:LEU:HA	1:A:198:GLU:HG3	20	1.21
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG11	1:A:112:PHE:HB3	1	1.21
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG12	1:A:112:PHE:HB3	1	1.21
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG13	1:A:112:PHE:HB3	1	1.21
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG21	1:A:112:PHE:HB3	1	1.21
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG22	1:A:112:PHE:HB3	1	1.21
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG23	1:A:112:PHE:HB3	1	1.21
(1,1549)	1:A:107:LYS:HE3	1:A:108:PRO:HA	2	1.21
(1,1229)	1:A:204:THR:HA	1:A:207:GLU:HB3	20	1.21
(1,687)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:HG21	3	1.2
(1,687)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:HG22	3	1.2
(1,687)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:HG23	3	1.2
(1,687)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:HG21	9	1.2
(1,687)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:HG22	9	1.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,687)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:HG23	9	1.2
(1,444)	1:A:106:ILE:H	1:A:107:LYS:HE3	19	1.2
(1,261)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:185:THR:H	4	1.2
(1,261)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:185:THR:H	16	1.2
(1,2369)	1:A:219:GLN:HE21	1:A:223:LYS:HE3	6	1.2
(1,2369)	1:A:219:GLN:HE22	1:A:223:LYS:HE3	6	1.2
(1,2369)	1:A:219:GLN:HE21	1:A:223:LYS:HE3	18	1.2
(1,2369)	1:A:219:GLN:HE22	1:A:223:LYS:HE3	18	1.2
(1,2280)	1:A:196:GLU:HG3	1:A:199:SER:HB3	3	1.2
(1,1993)	1:A:141:GLU:H	1:A:180:LEU:HB3	15	1.2
(1,1634)	1:A:71:PRO:HB3	1:A:74:SER:HA	12	1.2
(1,2369)	1:A:219:GLN:HE21	1:A:223:LYS:HE3	8	1.19
(1,2369)	1:A:219:GLN:HE22	1:A:223:LYS:HE3	8	1.19
(1,2202)	1:A:183:GLU:HB3	1:A:184:ARG:HD3	16	1.19
(1,2152)	1:A:176:LEU:HA	1:A:198:GLU:HG3	8	1.19
(1,2143)	1:A:173:MET:HE1	1:A:202:PHE:HB3	10	1.19
(1,2143)	1:A:173:MET:HE2	1:A:202:PHE:HB3	10	1.19
(1,2143)	1:A:173:MET:HE3	1:A:202:PHE:HB3	10	1.19
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG11	1:A:112:PHE:HB3	4	1.19
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG12	1:A:112:PHE:HB3	4	1.19
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG13	1:A:112:PHE:HB3	4	1.19
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG21	1:A:112:PHE:HB3	4	1.19
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG22	1:A:112:PHE:HB3	4	1.19
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG23	1:A:112:PHE:HB3	4	1.19
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG11	1:A:112:PHE:HB3	9	1.19
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG12	1:A:112:PHE:HB3	9	1.19
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG13	1:A:112:PHE:HB3	9	1.19
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG21	1:A:112:PHE:HB3	9	1.19
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG22	1:A:112:PHE:HB3	9	1.19
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG23	1:A:112:PHE:HB3	9	1.19
(1,1227)	1:A:223:LYS:H	1:A:223:LYS:HD3	10	1.19
(1,2369)	1:A:219:GLN:HE21	1:A:223:LYS:HE3	5	1.18
(1,2369)	1:A:219:GLN:HE22	1:A:223:LYS:HE3	5	1.18
(1,2330)	1:A:212:GLU:HG3	1:A:216:LYS:HD3	4	1.18
(1,2105)	1:A:167:TYR:H	1:A:221:ILE:HG13	11	1.18
(1,1346)	1:A:145:ARG:HB3	1:A:146:ASP:HB3	7	1.18
(1,1229)	1:A:204:THR:HA	1:A:207:GLU:HB3	3	1.18
(1,863)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG11	15	1.17
(1,863)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG12	15	1.17
(1,863)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG13	15	1.17
(1,802)	1:A:113:ALA:HB1	1:A:114:GLU:HB3	19	1.17
(1,802)	1:A:113:ALA:HB2	1:A:114:GLU:HB3	19	1.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,802)	1:A:113:ALA:HB3	1:A:114:GLU:HB3	19	1.17
(1,688)	1:A:106:ILE:HG21	1:A:108:PRO:HD3	17	1.17
(1,688)	1:A:106:ILE:HG22	1:A:108:PRO:HD3	17	1.17
(1,688)	1:A:106:ILE:HG23	1:A:108:PRO:HD3	17	1.17
(1,688)	1:A:106:ILE:HG21	1:A:108:PRO:HD3	19	1.17
(1,688)	1:A:106:ILE:HG22	1:A:108:PRO:HD3	19	1.17
(1,688)	1:A:106:ILE:HG23	1:A:108:PRO:HD3	19	1.17
(1,687)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:HG21	4	1.17
(1,687)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:HG22	4	1.17
(1,687)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:HG23	4	1.17
(1,2319)	1:A:207:GLU:H	1:A:208:ARG:HG3	12	1.17
(1,2252)	1:A:195:LEU:HA	1:A:196:GLU:HG3	5	1.17
(1,2224)	1:A:187:PHE:HB3	1:A:188:ALA:HA	2	1.17
(1,2224)	1:A:187:PHE:HB3	1:A:188:ALA:HA	6	1.17
(1,2224)	1:A:187:PHE:HB3	1:A:188:ALA:HA	9	1.17
(1,2224)	1:A:187:PHE:HB3	1:A:188:ALA:HA	11	1.17
(1,2224)	1:A:187:PHE:HB3	1:A:188:ALA:HA	14	1.17
(1,2224)	1:A:187:PHE:HB3	1:A:188:ALA:HA	18	1.17
(1,2223)	1:A:187:PHE:HA	1:A:190:GLN:HG3	13	1.17
(1,2212)	1:A:184:ARG:HG3	1:A:185:THR:H	12	1.17
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG11	19	1.17
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG12	19	1.17
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG13	19	1.17
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG21	19	1.17
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG22	19	1.17
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG23	19	1.17
(1,2098)	1:A:166:LYS:HB3	1:A:166:LYS:HE3	10	1.17
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG11	1:A:112:PHE:HB3	19	1.17
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG12	1:A:112:PHE:HB3	19	1.17
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG13	1:A:112:PHE:HB3	19	1.17
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG21	1:A:112:PHE:HB3	19	1.17
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG22	1:A:112:PHE:HB3	19	1.17
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG23	1:A:112:PHE:HB3	19	1.17
(1,1675)	1:A:80:LYS:H	1:A:80:LYS:HE3	18	1.17
(1,1549)	1:A:107:LYS:HE3	1:A:108:PRO:HA	18	1.17
(1,967)	1:A:204:THR:HG21	1:A:207:GLU:HB3	1	1.16
(1,967)	1:A:204:THR:HG22	1:A:207:GLU:HB3	1	1.16
(1,967)	1:A:204:THR:HG23	1:A:207:GLU:HB3	1	1.16
(1,688)	1:A:106:ILE:HG21	1:A:108:PRO:HD3	8	1.16
(1,688)	1:A:106:ILE:HG22	1:A:108:PRO:HD3	8	1.16
(1,688)	1:A:106:ILE:HG23	1:A:108:PRO:HD3	8	1.16
(1,688)	1:A:106:ILE:HG21	1:A:108:PRO:HD3	15	1.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,688)	1:A:106:ILE:HG22	1:A:108:PRO:HD3	15	1.16
(1,688)	1:A:106:ILE:HG23	1:A:108:PRO:HD3	15	1.16
(1,320)	1:A:144:LEU:H	1:A:145:ARG:HG3	13	1.16
(1,2379)	1:A:223:LYS:H	1:A:223:LYS:HE3	4	1.16
(1,2329)	1:A:212:GLU:HG3	1:A:216:LYS:HG3	7	1.16
(1,2224)	1:A:187:PHE:HB3	1:A:188:ALA:HA	4	1.16
(1,2224)	1:A:187:PHE:HB3	1:A:188:ALA:HA	5	1.16
(1,2224)	1:A:187:PHE:HB3	1:A:188:ALA:HA	8	1.16
(1,2224)	1:A:187:PHE:HB3	1:A:188:ALA:HA	15	1.16
(1,2224)	1:A:187:PHE:HB3	1:A:188:ALA:HA	16	1.16
(1,2212)	1:A:184:ARG:HG3	1:A:185:THR:H	17	1.16
(1,2152)	1:A:176:LEU:HA	1:A:198:GLU:HG3	5	1.16
(1,2152)	1:A:176:LEU:HA	1:A:198:GLU:HG3	15	1.16
(1,2021)	1:A:145:ARG:HD3	1:A:146:ASP:H	20	1.16
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG11	1:A:112:PHE:HB3	7	1.16
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG12	1:A:112:PHE:HB3	7	1.16
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG13	1:A:112:PHE:HB3	7	1.16
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG21	1:A:112:PHE:HB3	7	1.16
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG22	1:A:112:PHE:HB3	7	1.16
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG23	1:A:112:PHE:HB3	7	1.16
(1,1209)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:221:ILE:HD11	18	1.16
(1,1209)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:221:ILE:HD12	18	1.16
(1,1209)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:221:ILE:HD13	18	1.16
(1,967)	1:A:204:THR:HG21	1:A:207:GLU:HB3	10	1.15
(1,967)	1:A:204:THR:HG22	1:A:207:GLU:HB3	10	1.15
(1,967)	1:A:204:THR:HG23	1:A:207:GLU:HB3	10	1.15
(1,955)	1:A:220:THR:HG21	1:A:224:GLU:HB3	14	1.15
(1,955)	1:A:220:THR:HG22	1:A:224:GLU:HB3	14	1.15
(1,955)	1:A:220:THR:HG23	1:A:224:GLU:HB3	14	1.15
(1,863)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG11	16	1.15
(1,863)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG12	16	1.15
(1,863)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG13	16	1.15
(1,802)	1:A:113:ALA:HB1	1:A:114:GLU:HB3	8	1.15
(1,802)	1:A:113:ALA:HB2	1:A:114:GLU:HB3	8	1.15
(1,802)	1:A:113:ALA:HB3	1:A:114:GLU:HB3	8	1.15
(1,802)	1:A:113:ALA:HB1	1:A:114:GLU:HB3	17	1.15
(1,802)	1:A:113:ALA:HB2	1:A:114:GLU:HB3	17	1.15
(1,802)	1:A:113:ALA:HB3	1:A:114:GLU:HB3	17	1.15
(1,309)	1:A:223:LYS:H	1:A:224:GLU:HB3	16	1.15
(1,261)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:185:THR:H	19	1.15
(1,2331)	1:A:212:GLU:HG3	1:A:216:LYS:HE3	2	1.15
(1,2309)	1:A:205:GLN:HA	1:A:208:ARG:HG3	2	1.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2224)	1:A:187:PHE:HB3	1:A:188:ALA:HA	12	1.15
(1,2223)	1:A:187:PHE:HA	1:A:190:GLN:HG3	20	1.15
(1,2143)	1:A:173:MET:HE1	1:A:202:PHE:HB3	14	1.15
(1,2143)	1:A:173:MET:HE2	1:A:202:PHE:HB3	14	1.15
(1,2143)	1:A:173:MET:HE3	1:A:202:PHE:HB3	14	1.15
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG11	9	1.15
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG12	9	1.15
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG13	9	1.15
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG21	9	1.15
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG22	9	1.15
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG23	9	1.15
(1,179)	1:A:95:ARG:HD3	1:A:98:ASN:H	6	1.15
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG11	1:A:112:PHE:HB3	15	1.15
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG12	1:A:112:PHE:HB3	15	1.15
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG13	1:A:112:PHE:HB3	15	1.15
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG21	1:A:112:PHE:HB3	15	1.15
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG22	1:A:112:PHE:HB3	15	1.15
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG23	1:A:112:PHE:HB3	15	1.15
(1,1549)	1:A:107:LYS:HE3	1:A:108:PRO:HA	7	1.15
(1,1549)	1:A:107:LYS:HE3	1:A:108:PRO:HA	8	1.15
(1,1468)	1:A:100:LEU:HA	1:A:104:PHE:HB3	7	1.15
(1,1360)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HG13	18	1.15
(1,1331)	1:A:105:GLY:H	1:A:107:LYS:HE3	19	1.15
(1,1231)	1:A:111:ILE:HG21	1:A:114:GLU:HB3	7	1.15
(1,1231)	1:A:111:ILE:HG22	1:A:114:GLU:HB3	7	1.15
(1,1231)	1:A:111:ILE:HG23	1:A:114:GLU:HB3	7	1.15
(1,1229)	1:A:204:THR:HA	1:A:207:GLU:HB3	5	1.15
(1,1229)	1:A:204:THR:HA	1:A:207:GLU:HB3	14	1.15
(1,856)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG21	20	1.14
(1,856)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG22	20	1.14
(1,856)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG23	20	1.14
(1,753)	1:A:133:ALA:HB1	1:A:215:TYR:HB3	18	1.14
(1,753)	1:A:133:ALA:HB2	1:A:215:TYR:HB3	18	1.14
(1,753)	1:A:133:ALA:HB3	1:A:215:TYR:HB3	18	1.14
(1,687)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:HG21	12	1.14
(1,687)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:HG22	12	1.14
(1,687)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:HG23	12	1.14
(1,553)	1:A:218:GLN:HG3	1:A:221:ILE:HD11	4	1.14
(1,553)	1:A:218:GLN:HG3	1:A:221:ILE:HD12	4	1.14
(1,553)	1:A:218:GLN:HG3	1:A:221:ILE:HD13	4	1.14
(1,2386)	1:A:223:LYS:HG3	1:A:223:LYS:HE3	3	1.14
(1,2381)	1:A:223:LYS:HA	1:A:226:ARG:HB3	5	1.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2224)	1:A:187:PHE:HB3	1:A:188:ALA:HA	1	1.14
(1,2224)	1:A:187:PHE:HB3	1:A:188:ALA:HA	3	1.14
(1,2224)	1:A:187:PHE:HB3	1:A:188:ALA:HA	7	1.14
(1,2224)	1:A:187:PHE:HB3	1:A:188:ALA:HA	13	1.14
(1,2224)	1:A:187:PHE:HB3	1:A:188:ALA:HA	17	1.14
(1,2149)	1:A:176:LEU:H	1:A:197:GLU:HG3	17	1.14
(1,198)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:184:ARG:H	5	1.14
(1,198)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:184:ARG:H	10	1.14
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:108:PRO:HD3	3	1.14
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:108:PRO:HD3	3	1.14
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:108:PRO:HD3	3	1.14
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:108:PRO:HD3	3	1.14
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:108:PRO:HD3	3	1.14
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:108:PRO:HD3	3	1.14
(1,1549)	1:A:107:LYS:HE3	1:A:108:PRO:HA	6	1.14
(1,967)	1:A:204:THR:HG21	1:A:207:GLU:HB3	2	1.13
(1,967)	1:A:204:THR:HG22	1:A:207:GLU:HB3	2	1.13
(1,967)	1:A:204:THR:HG23	1:A:207:GLU:HB3	2	1.13
(1,955)	1:A:220:THR:HG21	1:A:224:GLU:HB3	1	1.13
(1,955)	1:A:220:THR:HG22	1:A:224:GLU:HB3	1	1.13
(1,955)	1:A:220:THR:HG23	1:A:224:GLU:HB3	1	1.13
(1,955)	1:A:220:THR:HG21	1:A:224:GLU:HB3	16	1.13
(1,955)	1:A:220:THR:HG22	1:A:224:GLU:HB3	16	1.13
(1,955)	1:A:220:THR:HG23	1:A:224:GLU:HB3	16	1.13
(1,802)	1:A:113:ALA:HB1	1:A:114:GLU:HB3	14	1.13
(1,802)	1:A:113:ALA:HB2	1:A:114:GLU:HB3	14	1.13
(1,802)	1:A:113:ALA:HB3	1:A:114:GLU:HB3	14	1.13
(1,802)	1:A:113:ALA:HB1	1:A:114:GLU:HB3	16	1.13
(1,802)	1:A:113:ALA:HB2	1:A:114:GLU:HB3	16	1.13
(1,802)	1:A:113:ALA:HB3	1:A:114:GLU:HB3	16	1.13
(1,688)	1:A:106:ILE:HG21	1:A:108:PRO:HD3	4	1.13
(1,688)	1:A:106:ILE:HG22	1:A:108:PRO:HD3	4	1.13
(1,688)	1:A:106:ILE:HG23	1:A:108:PRO:HD3	4	1.13
(1,688)	1:A:106:ILE:HG21	1:A:108:PRO:HD3	5	1.13
(1,688)	1:A:106:ILE:HG22	1:A:108:PRO:HD3	5	1.13
(1,688)	1:A:106:ILE:HG23	1:A:108:PRO:HD3	5	1.13
(1,688)	1:A:106:ILE:HG21	1:A:108:PRO:HD3	6	1.13
(1,688)	1:A:106:ILE:HG22	1:A:108:PRO:HD3	6	1.13
(1,688)	1:A:106:ILE:HG23	1:A:108:PRO:HD3	6	1.13
(1,687)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:HG21	18	1.13
(1,687)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:HG22	18	1.13
(1,687)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:HG23	18	1.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,413)	1:A:218:GLN:HG3	1:A:221:ILE:H	5	1.13
(1,2329)	1:A:212:GLU:HG3	1:A:216:LYS:HG3	18	1.13
(1,2223)	1:A:187:PHE:HA	1:A:190:GLN:HG3	3	1.13
(1,2212)	1:A:184:ARG:HG3	1:A:185:THR:H	15	1.13
(1,2041)	1:A:156:SER:H	1:A:157:LEU:HB3	11	1.13
(1,1993)	1:A:141:GLU:H	1:A:180:LEU:HB3	13	1.13
(1,179)	1:A:95:ARG:HD3	1:A:98:ASN:H	1	1.13
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:108:PRO:HD3	6	1.13
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:108:PRO:HD3	6	1.13
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:108:PRO:HD3	6	1.13
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:108:PRO:HD3	6	1.13
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:108:PRO:HD3	6	1.13
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:108:PRO:HD3	6	1.13
(1,1342)	1:A:215:TYR:HD1	1:A:216:LYS:HE3	11	1.13
(1,1342)	1:A:215:TYR:HD2	1:A:216:LYS:HE3	11	1.13
(1,955)	1:A:220:THR:HG21	1:A:224:GLU:HB3	3	1.12
(1,955)	1:A:220:THR:HG22	1:A:224:GLU:HB3	3	1.12
(1,955)	1:A:220:THR:HG23	1:A:224:GLU:HB3	3	1.12
(1,802)	1:A:113:ALA:HB1	1:A:114:GLU:HB3	2	1.12
(1,802)	1:A:113:ALA:HB2	1:A:114:GLU:HB3	2	1.12
(1,802)	1:A:113:ALA:HB3	1:A:114:GLU:HB3	2	1.12
(1,802)	1:A:113:ALA:HB1	1:A:114:GLU:HB3	10	1.12
(1,802)	1:A:113:ALA:HB2	1:A:114:GLU:HB3	10	1.12
(1,802)	1:A:113:ALA:HB3	1:A:114:GLU:HB3	10	1.12
(1,753)	1:A:133:ALA:HB1	1:A:215:TYR:HB3	4	1.12
(1,753)	1:A:133:ALA:HB2	1:A:215:TYR:HB3	4	1.12
(1,753)	1:A:133:ALA:HB3	1:A:215:TYR:HB3	4	1.12
(1,688)	1:A:106:ILE:HG21	1:A:108:PRO:HD3	20	1.12
(1,688)	1:A:106:ILE:HG22	1:A:108:PRO:HD3	20	1.12
(1,688)	1:A:106:ILE:HG23	1:A:108:PRO:HD3	20	1.12
(1,687)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:HG21	15	1.12
(1,687)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:HG22	15	1.12
(1,687)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:HG23	15	1.12
(1,198)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:184:ARG:H	8	1.12
(1,1619)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD1	3	1.12
(1,1619)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD2	3	1.12
(1,1619)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD1	11	1.12
(1,1619)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD2	11	1.12
(1,1619)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD1	15	1.12
(1,1619)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD2	15	1.12
(1,1549)	1:A:107:LYS:HE3	1:A:108:PRO:HA	12	1.12
(1,1360)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HG13	10	1.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1329)	1:A:101:GLN:HA	1:A:107:LYS:HE3	15	1.12
(1,955)	1:A:220:THR:HG21	1:A:224:GLU:HB3	12	1.11
(1,955)	1:A:220:THR:HG22	1:A:224:GLU:HB3	12	1.11
(1,955)	1:A:220:THR:HG23	1:A:224:GLU:HB3	12	1.11
(1,802)	1:A:113:ALA:HB1	1:A:114:GLU:HB3	9	1.11
(1,802)	1:A:113:ALA:HB2	1:A:114:GLU:HB3	9	1.11
(1,802)	1:A:113:ALA:HB3	1:A:114:GLU:HB3	9	1.11
(1,802)	1:A:113:ALA:HB1	1:A:114:GLU:HB3	13	1.11
(1,802)	1:A:113:ALA:HB2	1:A:114:GLU:HB3	13	1.11
(1,802)	1:A:113:ALA:HB3	1:A:114:GLU:HB3	13	1.11
(1,688)	1:A:106:ILE:HG21	1:A:108:PRO:HD3	12	1.11
(1,688)	1:A:106:ILE:HG22	1:A:108:PRO:HD3	12	1.11
(1,688)	1:A:106:ILE:HG23	1:A:108:PRO:HD3	12	1.11
(1,688)	1:A:106:ILE:HG21	1:A:108:PRO:HD3	16	1.11
(1,688)	1:A:106:ILE:HG22	1:A:108:PRO:HD3	16	1.11
(1,688)	1:A:106:ILE:HG23	1:A:108:PRO:HD3	16	1.11
(1,553)	1:A:218:GLN:HG3	1:A:221:ILE:HD11	15	1.11
(1,553)	1:A:218:GLN:HG3	1:A:221:ILE:HD12	15	1.11
(1,553)	1:A:218:GLN:HG3	1:A:221:ILE:HD13	15	1.11
(1,413)	1:A:218:GLN:HG3	1:A:221:ILE:H	2	1.11
(1,2379)	1:A:223:LYS:H	1:A:223:LYS:HE3	8	1.11
(1,2329)	1:A:212:GLU:HG3	1:A:216:LYS:HG3	15	1.11
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG11	20	1.11
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG12	20	1.11
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG13	20	1.11
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG21	20	1.11
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG22	20	1.11
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG23	20	1.11
(1,2105)	1:A:167:TYR:H	1:A:221:ILE:HG13	7	1.11
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG11	1:A:112:PHE:HB3	5	1.11
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG12	1:A:112:PHE:HB3	5	1.11
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG13	1:A:112:PHE:HB3	5	1.11
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG21	1:A:112:PHE:HB3	5	1.11
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG22	1:A:112:PHE:HB3	5	1.11
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG23	1:A:112:PHE:HB3	5	1.11
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:108:PRO:HD3	18	1.11
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:108:PRO:HD3	18	1.11
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:108:PRO:HD3	18	1.11
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:108:PRO:HD3	18	1.11
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:108:PRO:HD3	18	1.11
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:108:PRO:HD3	18	1.11
(1,1229)	1:A:204:THR:HA	1:A:207:GLU:HB3	1	1.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,856)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG21	16	1.1
(1,856)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG22	16	1.1
(1,856)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG23	16	1.1
(1,802)	1:A:113:ALA:HB1	1:A:114:GLU:HB3	20	1.1
(1,802)	1:A:113:ALA:HB2	1:A:114:GLU:HB3	20	1.1
(1,802)	1:A:113:ALA:HB3	1:A:114:GLU:HB3	20	1.1
(1,753)	1:A:133:ALA:HB1	1:A:215:TYR:HB3	11	1.1
(1,753)	1:A:133:ALA:HB2	1:A:215:TYR:HB3	11	1.1
(1,753)	1:A:133:ALA:HB3	1:A:215:TYR:HB3	11	1.1
(1,687)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:HG21	2	1.1
(1,687)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:HG22	2	1.1
(1,687)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:HG23	2	1.1
(1,687)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:HG21	10	1.1
(1,687)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:HG22	10	1.1
(1,687)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:HG23	10	1.1
(1,683)	1:A:80:LYS:HD3	1:A:106:ILE:HG21	20	1.1
(1,683)	1:A:80:LYS:HD3	1:A:106:ILE:HG22	20	1.1
(1,683)	1:A:80:LYS:HD3	1:A:106:ILE:HG23	20	1.1
(1,261)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:185:THR:H	10	1.1
(1,2369)	1:A:219:GLN:HE21	1:A:223:LYS:HE3	17	1.1
(1,2369)	1:A:219:GLN:HE22	1:A:223:LYS:HE3	17	1.1
(1,2223)	1:A:187:PHE:HA	1:A:190:GLN:HG3	17	1.1
(1,2152)	1:A:176:LEU:HA	1:A:198:GLU:HG3	12	1.1
(1,2143)	1:A:173:MET:HE1	1:A:202:PHE:HB3	2	1.1
(1,2143)	1:A:173:MET:HE2	1:A:202:PHE:HB3	2	1.1
(1,2143)	1:A:173:MET:HE3	1:A:202:PHE:HB3	2	1.1
(1,2041)	1:A:156:SER:H	1:A:157:LEU:HB3	3	1.1
(1,1402)	1:A:195:LEU:HA	1:A:196:GLU:HB3	10	1.1
(1,1402)	1:A:195:LEU:HA	1:A:196:GLU:HB3	14	1.1
(1,1300)	1:A:86:ALA:HB1	1:A:87:GLU:HG3	6	1.1
(1,1300)	1:A:86:ALA:HB2	1:A:87:GLU:HG3	6	1.1
(1,1300)	1:A:86:ALA:HB3	1:A:87:GLU:HG3	6	1.1
(1,1229)	1:A:204:THR:HA	1:A:207:GLU:HB3	4	1.1
(1,955)	1:A:220:THR:HG21	1:A:224:GLU:HB3	9	1.09
(1,955)	1:A:220:THR:HG22	1:A:224:GLU:HB3	9	1.09
(1,955)	1:A:220:THR:HG23	1:A:224:GLU:HB3	9	1.09
(1,802)	1:A:113:ALA:HB1	1:A:114:GLU:HB3	1	1.09
(1,802)	1:A:113:ALA:HB2	1:A:114:GLU:HB3	1	1.09
(1,802)	1:A:113:ALA:HB3	1:A:114:GLU:HB3	1	1.09
(1,802)	1:A:113:ALA:HB1	1:A:114:GLU:HB3	3	1.09
(1,802)	1:A:113:ALA:HB2	1:A:114:GLU:HB3	3	1.09
(1,802)	1:A:113:ALA:HB3	1:A:114:GLU:HB3	3	1.09

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,802)	1:A:113:ALA:HB1	1:A:114:GLU:HB3	15	1.09
(1,802)	1:A:113:ALA:HB2	1:A:114:GLU:HB3	15	1.09
(1,802)	1:A:113:ALA:HB3	1:A:114:GLU:HB3	15	1.09
(1,753)	1:A:133:ALA:HB1	1:A:215:TYR:HB3	7	1.09
(1,753)	1:A:133:ALA:HB2	1:A:215:TYR:HB3	7	1.09
(1,753)	1:A:133:ALA:HB3	1:A:215:TYR:HB3	7	1.09
(1,687)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:HG21	1	1.09
(1,687)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:HG22	1	1.09
(1,687)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:HG23	1	1.09
(1,687)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:HG21	11	1.09
(1,687)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:HG22	11	1.09
(1,687)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:HG23	11	1.09
(1,320)	1:A:144:LEU:H	1:A:145:ARG:HG3	1	1.09
(1,261)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:185:THR:H	2	1.09
(1,2392)	1:A:224:GLU:HA	1:A:227:ASN:HB3	1	1.09
(1,2369)	1:A:219:GLN:HE21	1:A:223:LYS:HE3	19	1.09
(1,2369)	1:A:219:GLN:HE22	1:A:223:LYS:HE3	19	1.09
(1,2212)	1:A:184:ARG:HG3	1:A:185:THR:H	3	1.09
(1,2143)	1:A:173:MET:HE1	1:A:202:PHE:HB3	20	1.09
(1,2143)	1:A:173:MET:HE2	1:A:202:PHE:HB3	20	1.09
(1,2143)	1:A:173:MET:HE3	1:A:202:PHE:HB3	20	1.09
(1,198)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:184:ARG:H	19	1.09
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:108:PRO:HD3	7	1.09
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:108:PRO:HD3	7	1.09
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:108:PRO:HD3	7	1.09
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:108:PRO:HD3	7	1.09
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:108:PRO:HD3	7	1.09
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:108:PRO:HD3	7	1.09
(1,1619)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD1	10	1.09
(1,1619)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD2	10	1.09
(1,1555)	1:A:202:PHE:HA	1:A:205:GLN:HB3	17	1.09
(1,1402)	1:A:195:LEU:HA	1:A:196:GLU:HB3	6	1.09
(1,1402)	1:A:195:LEU:HA	1:A:196:GLU:HB3	7	1.09
(1,1341)	1:A:213:SER:HA	1:A:216:LYS:HE3	3	1.09
(1,1341)	1:A:213:SER:HA	1:A:216:LYS:HE3	12	1.09
(1,1269)	1:A:208:ARG:HA	1:A:211:GLN:HG3	13	1.09
(1,1229)	1:A:204:THR:HA	1:A:207:GLU:HB3	17	1.09
(1,802)	1:A:113:ALA:HB1	1:A:114:GLU:HB3	4	1.08
(1,802)	1:A:113:ALA:HB2	1:A:114:GLU:HB3	4	1.08
(1,802)	1:A:113:ALA:HB3	1:A:114:GLU:HB3	4	1.08
(1,687)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:HG21	6	1.08
(1,687)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:HG22	6	1.08

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,687)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:HG23	6	1.08
(1,261)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:185:THR:H	7	1.08
(1,2379)	1:A:223:LYS:H	1:A:223:LYS:HE3	15	1.08
(1,2331)	1:A:212:GLU:HG3	1:A:216:LYS:HE3	17	1.08
(1,2147)	1:A:175:PRO:HA	1:A:197:GLU:HG3	16	1.08
(1,2098)	1:A:166:LYS:HB3	1:A:166:LYS:HE3	7	1.08
(1,2098)	1:A:166:LYS:HB3	1:A:166:LYS:HE3	15	1.08
(1,1993)	1:A:141:GLU:H	1:A:180:LEU:HB3	2	1.08
(1,198)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:184:ARG:H	14	1.08
(1,1555)	1:A:202:PHE:HA	1:A:205:GLN:HB3	19	1.08
(1,1555)	1:A:202:PHE:HA	1:A:205:GLN:HB3	20	1.08
(1,1521)	1:A:182:ARG:HA	1:A:182:ARG:HD3	6	1.08
(1,1402)	1:A:195:LEU:HA	1:A:196:GLU:HB3	2	1.08
(1,1402)	1:A:195:LEU:HA	1:A:196:GLU:HB3	4	1.08
(1,1402)	1:A:195:LEU:HA	1:A:196:GLU:HB3	8	1.08
(1,1402)	1:A:195:LEU:HA	1:A:196:GLU:HB3	15	1.08
(1,1402)	1:A:195:LEU:HA	1:A:196:GLU:HB3	16	1.08
(1,1402)	1:A:195:LEU:HA	1:A:196:GLU:HB3	17	1.08
(1,1402)	1:A:195:LEU:HA	1:A:196:GLU:HB3	19	1.08
(1,1343)	1:A:216:LYS:H	1:A:216:LYS:HE3	2	1.08
(1,1269)	1:A:208:ARG:HA	1:A:211:GLN:HG3	16	1.08
(1,1229)	1:A:204:THR:HA	1:A:207:GLU:HB3	2	1.08
(1,955)	1:A:220:THR:HG21	1:A:224:GLU:HB3	10	1.07
(1,955)	1:A:220:THR:HG22	1:A:224:GLU:HB3	10	1.07
(1,955)	1:A:220:THR:HG23	1:A:224:GLU:HB3	10	1.07
(1,802)	1:A:113:ALA:HB1	1:A:114:GLU:HB3	6	1.07
(1,802)	1:A:113:ALA:HB2	1:A:114:GLU:HB3	6	1.07
(1,802)	1:A:113:ALA:HB3	1:A:114:GLU:HB3	6	1.07
(1,802)	1:A:113:ALA:HB1	1:A:114:GLU:HB3	11	1.07
(1,802)	1:A:113:ALA:HB2	1:A:114:GLU:HB3	11	1.07
(1,802)	1:A:113:ALA:HB3	1:A:114:GLU:HB3	11	1.07
(1,688)	1:A:106:ILE:HG21	1:A:108:PRO:HD3	18	1.07
(1,688)	1:A:106:ILE:HG22	1:A:108:PRO:HD3	18	1.07
(1,688)	1:A:106:ILE:HG23	1:A:108:PRO:HD3	18	1.07
(1,687)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:HG21	7	1.07
(1,687)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:HG22	7	1.07
(1,687)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:HG23	7	1.07
(1,320)	1:A:144:LEU:H	1:A:145:ARG:HG3	20	1.07
(1,2330)	1:A:212:GLU:HG3	1:A:216:LYS:HD3	1	1.07
(1,2223)	1:A:187:PHE:HA	1:A:190:GLN:HG3	7	1.07
(1,2147)	1:A:175:PRO:HA	1:A:197:GLU:HG3	2	1.07
(1,2147)	1:A:175:PRO:HA	1:A:197:GLU:HG3	10	1.07

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2098)	1:A:166:LYS:HB3	1:A:166:LYS:HE3	19	1.07
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG11	1:A:112:PHE:HB3	17	1.07
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG12	1:A:112:PHE:HB3	17	1.07
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG13	1:A:112:PHE:HB3	17	1.07
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG21	1:A:112:PHE:HB3	17	1.07
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG22	1:A:112:PHE:HB3	17	1.07
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG23	1:A:112:PHE:HB3	17	1.07
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:108:PRO:HD3	2	1.07
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:108:PRO:HD3	2	1.07
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:108:PRO:HD3	2	1.07
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:108:PRO:HD3	2	1.07
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:108:PRO:HD3	2	1.07
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:108:PRO:HD3	2	1.07
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:108:PRO:HD3	5	1.07
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:108:PRO:HD3	5	1.07
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:108:PRO:HD3	5	1.07
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:108:PRO:HD3	5	1.07
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:108:PRO:HD3	5	1.07
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:108:PRO:HD3	5	1.07
(1,1566)	1:A:71:PRO:HG3	1:A:74:SER:HB3	9	1.07
(1,1555)	1:A:202:PHE:HA	1:A:205:GLN:HB3	16	1.07
(1,1549)	1:A:107:LYS:HE3	1:A:108:PRO:HA	5	1.07
(1,1402)	1:A:195:LEU:HA	1:A:196:GLU:HB3	9	1.07
(1,1402)	1:A:195:LEU:HA	1:A:196:GLU:HB3	12	1.07
(1,1342)	1:A:215:TYR:HD1	1:A:216:LYS:HE3	9	1.07
(1,1342)	1:A:215:TYR:HD2	1:A:216:LYS:HE3	9	1.07
(1,967)	1:A:204:THR:HG21	1:A:207:GLU:HB3	7	1.06
(1,967)	1:A:204:THR:HG22	1:A:207:GLU:HB3	7	1.06
(1,967)	1:A:204:THR:HG23	1:A:207:GLU:HB3	7	1.06
(1,955)	1:A:220:THR:HG21	1:A:224:GLU:HB3	13	1.06
(1,955)	1:A:220:THR:HG22	1:A:224:GLU:HB3	13	1.06
(1,955)	1:A:220:THR:HG23	1:A:224:GLU:HB3	13	1.06
(1,802)	1:A:113:ALA:HB1	1:A:114:GLU:HB3	12	1.06
(1,802)	1:A:113:ALA:HB2	1:A:114:GLU:HB3	12	1.06
(1,802)	1:A:113:ALA:HB3	1:A:114:GLU:HB3	12	1.06
(1,753)	1:A:133:ALA:HB1	1:A:215:TYR:HB3	17	1.06
(1,753)	1:A:133:ALA:HB2	1:A:215:TYR:HB3	17	1.06
(1,753)	1:A:133:ALA:HB3	1:A:215:TYR:HB3	17	1.06
(1,688)	1:A:106:ILE:HG21	1:A:108:PRO:HD3	7	1.06
(1,688)	1:A:106:ILE:HG22	1:A:108:PRO:HD3	7	1.06
(1,688)	1:A:106:ILE:HG23	1:A:108:PRO:HD3	7	1.06
(1,2386)	1:A:223:LYS:HG3	1:A:223:LYS:HE3	8	1.06

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2223)	1:A:187:PHE:HA	1:A:190:GLN:HG3	19	1.06
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD11	1:A:158:MET:HG3	15	1.06
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD12	1:A:158:MET:HG3	15	1.06
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD13	1:A:158:MET:HG3	15	1.06
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD21	1:A:158:MET:HG3	15	1.06
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD22	1:A:158:MET:HG3	15	1.06
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD23	1:A:158:MET:HG3	15	1.06
(1,1993)	1:A:141:GLU:H	1:A:180:LEU:HB3	19	1.06
(1,179)	1:A:95:ARG:HD3	1:A:98:ASN:H	16	1.06
(1,1555)	1:A:202:PHE:HA	1:A:205:GLN:HB3	13	1.06
(1,1392)	1:A:107:LYS:HA	1:A:107:LYS:HE3	4	1.06
(1,1334)	1:A:102:ASP:H	1:A:107:LYS:HE3	15	1.06
(1,1325)	1:A:166:LYS:H	1:A:166:LYS:HE3	3	1.06
(1,1229)	1:A:204:THR:HA	1:A:207:GLU:HB3	16	1.06
(1,1209)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:221:ILE:HD11	6	1.06
(1,1209)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:221:ILE:HD12	6	1.06
(1,1209)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:221:ILE:HD13	6	1.06
(1,955)	1:A:220:THR:HG21	1:A:224:GLU:HB3	15	1.05
(1,955)	1:A:220:THR:HG22	1:A:224:GLU:HB3	15	1.05
(1,955)	1:A:220:THR:HG23	1:A:224:GLU:HB3	15	1.05
(1,955)	1:A:220:THR:HG21	1:A:224:GLU:HB3	18	1.05
(1,955)	1:A:220:THR:HG22	1:A:224:GLU:HB3	18	1.05
(1,955)	1:A:220:THR:HG23	1:A:224:GLU:HB3	18	1.05
(1,753)	1:A:133:ALA:HB1	1:A:215:TYR:HB3	20	1.05
(1,753)	1:A:133:ALA:HB2	1:A:215:TYR:HB3	20	1.05
(1,753)	1:A:133:ALA:HB3	1:A:215:TYR:HB3	20	1.05
(1,43)	1:A:182:ARG:HB3	1:A:190:GLN:HE22	9	1.05
(1,2329)	1:A:212:GLU:HG3	1:A:216:LYS:HG3	3	1.05
(1,2147)	1:A:175:PRO:HA	1:A:197:GLU:HG3	8	1.05
(1,198)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:184:ARG:H	7	1.05
(1,1895)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:122:LEU:HD11	14	1.05
(1,1895)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:122:LEU:HD12	14	1.05
(1,1895)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:122:LEU:HD13	14	1.05
(1,1895)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:122:LEU:HD21	14	1.05
(1,1895)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:122:LEU:HD22	14	1.05
(1,1895)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:122:LEU:HD23	14	1.05
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD11	1:A:104:PHE:HB3	15	1.05
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD12	1:A:104:PHE:HB3	15	1.05
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD13	1:A:104:PHE:HB3	15	1.05
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD21	1:A:104:PHE:HB3	15	1.05
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD22	1:A:104:PHE:HB3	15	1.05
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD23	1:A:104:PHE:HB3	15	1.05

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1555)	1:A:202:PHE:HA	1:A:205:GLN:HB3	1	1.05
(1,1402)	1:A:195:LEU:HA	1:A:196:GLU:HB3	18	1.05
(1,1402)	1:A:195:LEU:HA	1:A:196:GLU:HB3	20	1.05
(1,1355)	1:A:182:ARG:HD3	1:A:190:GLN:HE22	20	1.05
(1,1339)	1:A:212:GLU:HG3	1:A:216:LYS:HE3	14	1.05
(1,1229)	1:A:204:THR:HA	1:A:207:GLU:HB3	11	1.05
(1,967)	1:A:204:THR:HG21	1:A:207:GLU:HB3	18	1.04
(1,967)	1:A:204:THR:HG22	1:A:207:GLU:HB3	18	1.04
(1,967)	1:A:204:THR:HG23	1:A:207:GLU:HB3	18	1.04
(1,688)	1:A:106:ILE:HG21	1:A:108:PRO:HD3	10	1.04
(1,688)	1:A:106:ILE:HG22	1:A:108:PRO:HD3	10	1.04
(1,688)	1:A:106:ILE:HG23	1:A:108:PRO:HD3	10	1.04
(1,688)	1:A:106:ILE:HG21	1:A:108:PRO:HD3	11	1.04
(1,688)	1:A:106:ILE:HG22	1:A:108:PRO:HD3	11	1.04
(1,688)	1:A:106:ILE:HG23	1:A:108:PRO:HD3	11	1.04
(1,2143)	1:A:173:MET:HE1	1:A:202:PHE:HB3	8	1.04
(1,2143)	1:A:173:MET:HE2	1:A:202:PHE:HB3	8	1.04
(1,2143)	1:A:173:MET:HE3	1:A:202:PHE:HB3	8	1.04
(1,2105)	1:A:167:TYR:H	1:A:221:ILE:HG13	2	1.04
(1,2083)	1:A:163:ARG:H	1:A:163:ARG:HG3	3	1.04
(1,2081)	1:A:162:ASN:HB3	1:A:164:GLN:HE21	2	1.04
(1,2081)	1:A:162:ASN:HB3	1:A:164:GLN:HE22	2	1.04
(1,1993)	1:A:141:GLU:H	1:A:180:LEU:HB3	7	1.04
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD11	1:A:104:PHE:HB3	10	1.04
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD12	1:A:104:PHE:HB3	10	1.04
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD13	1:A:104:PHE:HB3	10	1.04
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD21	1:A:104:PHE:HB3	10	1.04
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD22	1:A:104:PHE:HB3	10	1.04
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD23	1:A:104:PHE:HB3	10	1.04
(1,1619)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD1	6	1.04
(1,1619)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD2	6	1.04
(1,1555)	1:A:202:PHE:HA	1:A:205:GLN:HB3	18	1.04
(1,1549)	1:A:107:LYS:HE3	1:A:108:PRO:HA	9	1.04
(1,1402)	1:A:195:LEU:HA	1:A:196:GLU:HB3	3	1.04
(1,1402)	1:A:195:LEU:HA	1:A:196:GLU:HB3	13	1.04
(1,1343)	1:A:216:LYS:H	1:A:216:LYS:HE3	17	1.04
(1,1229)	1:A:204:THR:HA	1:A:207:GLU:HB3	9	1.04
(1,1229)	1:A:204:THR:HA	1:A:207:GLU:HB3	15	1.04
(1,1210)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:221:ILE:HG21	1	1.04
(1,1210)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:221:ILE:HG22	1	1.04
(1,1210)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:221:ILE:HG23	1	1.04
(1,967)	1:A:204:THR:HG21	1:A:207:GLU:HB3	15	1.03

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,967)	1:A:204:THR:HG22	1:A:207:GLU:HB3	15	1.03
(1,967)	1:A:204:THR:HG23	1:A:207:GLU:HB3	15	1.03
(1,955)	1:A:220:THR:HG21	1:A:224:GLU:HB3	7	1.03
(1,955)	1:A:220:THR:HG22	1:A:224:GLU:HB3	7	1.03
(1,955)	1:A:220:THR:HG23	1:A:224:GLU:HB3	7	1.03
(1,688)	1:A:106:ILE:HG21	1:A:108:PRO:HD3	2	1.03
(1,688)	1:A:106:ILE:HG22	1:A:108:PRO:HD3	2	1.03
(1,688)	1:A:106:ILE:HG23	1:A:108:PRO:HD3	2	1.03
(1,688)	1:A:106:ILE:HG21	1:A:108:PRO:HD3	3	1.03
(1,688)	1:A:106:ILE:HG22	1:A:108:PRO:HD3	3	1.03
(1,688)	1:A:106:ILE:HG23	1:A:108:PRO:HD3	3	1.03
(1,688)	1:A:106:ILE:HG21	1:A:108:PRO:HD3	9	1.03
(1,688)	1:A:106:ILE:HG22	1:A:108:PRO:HD3	9	1.03
(1,688)	1:A:106:ILE:HG23	1:A:108:PRO:HD3	9	1.03
(1,444)	1:A:106:ILE:H	1:A:107:LYS:HE3	15	1.03
(1,442)	1:A:106:ILE:H	1:A:107:LYS:HG3	1	1.03
(1,442)	1:A:106:ILE:H	1:A:107:LYS:HG3	11	1.03
(1,2329)	1:A:212:GLU:HG3	1:A:216:LYS:HG3	17	1.03
(1,2105)	1:A:167:TYR:H	1:A:221:ILE:HG13	18	1.03
(1,1890)	1:A:117:HIS:HE1	1:A:122:LEU:HB3	7	1.03
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD11	1:A:104:PHE:HB3	16	1.03
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD12	1:A:104:PHE:HB3	16	1.03
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD13	1:A:104:PHE:HB3	16	1.03
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD21	1:A:104:PHE:HB3	16	1.03
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD22	1:A:104:PHE:HB3	16	1.03
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD23	1:A:104:PHE:HB3	16	1.03
(1,1549)	1:A:107:LYS:HE3	1:A:108:PRO:HA	14	1.03
(1,1402)	1:A:195:LEU:HA	1:A:196:GLU:HB3	1	1.03
(1,1402)	1:A:195:LEU:HA	1:A:196:GLU:HB3	11	1.03
(1,1371)	1:A:163:ARG:HA	1:A:163:ARG:HD3	14	1.03
(1,1229)	1:A:204:THR:HA	1:A:207:GLU:HB3	10	1.03
(1,953)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG11	18	1.02
(1,953)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG12	18	1.02
(1,953)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG13	18	1.02
(1,922)	1:A:217:THR:HG21	1:A:218:GLN:HG3	8	1.02
(1,922)	1:A:217:THR:HG22	1:A:218:GLN:HG3	8	1.02
(1,922)	1:A:217:THR:HG23	1:A:218:GLN:HG3	8	1.02
(1,802)	1:A:113:ALA:HB1	1:A:114:GLU:HB3	18	1.02
(1,802)	1:A:113:ALA:HB2	1:A:114:GLU:HB3	18	1.02
(1,802)	1:A:113:ALA:HB3	1:A:114:GLU:HB3	18	1.02
(1,442)	1:A:106:ILE:H	1:A:107:LYS:HG3	13	1.02
(1,246)	1:A:87:GLU:HG3	1:A:88:ASP:H	6	1.02

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2280)	1:A:196:GLU:HG3	1:A:199:SER:HB3	13	1.02
(1,2152)	1:A:176:LEU:HA	1:A:198:GLU:HG3	4	1.02
(1,198)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:184:ARG:H	20	1.02
(1,1653)	1:A:76:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG11	10	1.02
(1,1653)	1:A:76:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG12	10	1.02
(1,1653)	1:A:76:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG13	10	1.02
(1,1635)	1:A:71:PRO:HB3	1:A:74:SER:HB3	19	1.02
(1,1634)	1:A:71:PRO:HB3	1:A:74:SER:HA	11	1.02
(1,1634)	1:A:71:PRO:HB3	1:A:74:SER:HA	14	1.02
(1,1555)	1:A:202:PHE:HA	1:A:205:GLN:HB3	5	1.02
(1,1210)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:221:ILE:HG21	8	1.02
(1,1210)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:221:ILE:HG22	8	1.02
(1,1210)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:221:ILE:HG23	8	1.02
(1,953)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG11	1	1.01
(1,953)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG12	1	1.01
(1,953)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG13	1	1.01
(1,953)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG11	19	1.01
(1,953)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG12	19	1.01
(1,953)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG13	19	1.01
(1,688)	1:A:106:ILE:HG21	1:A:108:PRO:HD3	13	1.01
(1,688)	1:A:106:ILE:HG22	1:A:108:PRO:HD3	13	1.01
(1,688)	1:A:106:ILE:HG23	1:A:108:PRO:HD3	13	1.01
(1,442)	1:A:106:ILE:H	1:A:107:LYS:HG3	6	1.01
(1,246)	1:A:87:GLU:HG3	1:A:88:ASP:H	16	1.01
(1,2147)	1:A:175:PRO:HA	1:A:197:GLU:HG3	14	1.01
(1,2041)	1:A:156:SER:H	1:A:157:LEU:HB3	19	1.01
(1,179)	1:A:95:ARG:HD3	1:A:98:ASN:H	18	1.01
(1,1549)	1:A:107:LYS:HE3	1:A:108:PRO:HA	16	1.01
(1,1402)	1:A:195:LEU:HA	1:A:196:GLU:HB3	5	1.01
(1,1213)	1:A:165:HIS:HA	1:A:166:LYS:HD3	15	1.01
(1,1210)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:221:ILE:HG21	15	1.01
(1,1210)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:221:ILE:HG22	15	1.01
(1,1210)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:221:ILE:HG23	15	1.01
(1,955)	1:A:220:THR:HG21	1:A:224:GLU:HB3	8	1.0
(1,955)	1:A:220:THR:HG22	1:A:224:GLU:HB3	8	1.0
(1,955)	1:A:220:THR:HG23	1:A:224:GLU:HB3	8	1.0
(1,953)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG11	4	1.0
(1,953)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG12	4	1.0
(1,953)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG13	4	1.0
(1,953)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG11	12	1.0
(1,953)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG12	12	1.0
(1,953)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG13	12	1.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,953)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG11	15	1.0
(1,953)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG12	15	1.0
(1,953)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG13	15	1.0
(1,688)	1:A:106:ILE:HG21	1:A:108:PRO:HD3	1	1.0
(1,688)	1:A:106:ILE:HG22	1:A:108:PRO:HD3	1	1.0
(1,688)	1:A:106:ILE:HG23	1:A:108:PRO:HD3	1	1.0
(1,442)	1:A:106:ILE:H	1:A:107:LYS:HG3	8	1.0
(1,442)	1:A:106:ILE:H	1:A:107:LYS:HG3	9	1.0
(1,309)	1:A:223:LYS:H	1:A:224:GLU:HB3	10	1.0
(1,2351)	1:A:216:LYS:HG3	1:A:216:LYS:HE3	15	1.0
(1,2223)	1:A:187:PHE:HA	1:A:190:GLN:HG3	1	1.0
(1,2168)	1:A:176:LEU:HD11	1:A:198:GLU:HB3	18	1.0
(1,2168)	1:A:176:LEU:HD12	1:A:198:GLU:HB3	18	1.0
(1,2168)	1:A:176:LEU:HD13	1:A:198:GLU:HB3	18	1.0
(1,2168)	1:A:176:LEU:HD21	1:A:198:GLU:HB3	18	1.0
(1,2168)	1:A:176:LEU:HD22	1:A:198:GLU:HB3	18	1.0
(1,2168)	1:A:176:LEU:HD23	1:A:198:GLU:HB3	18	1.0
(1,2004)	1:A:144:LEU:HA	1:A:148:TRP:HB3	20	1.0
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD11	1:A:104:PHE:HB3	5	1.0
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD12	1:A:104:PHE:HB3	5	1.0
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD13	1:A:104:PHE:HB3	5	1.0
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD21	1:A:104:PHE:HB3	5	1.0
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD22	1:A:104:PHE:HB3	5	1.0
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD23	1:A:104:PHE:HB3	5	1.0
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG11	1:A:112:PHE:HB3	6	1.0
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG12	1:A:112:PHE:HB3	6	1.0
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG13	1:A:112:PHE:HB3	6	1.0
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG21	1:A:112:PHE:HB3	6	1.0
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG22	1:A:112:PHE:HB3	6	1.0
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG23	1:A:112:PHE:HB3	6	1.0
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:108:PRO:HD3	15	1.0
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:108:PRO:HD3	15	1.0
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:108:PRO:HD3	15	1.0
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:108:PRO:HD3	15	1.0
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:108:PRO:HD3	15	1.0
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:108:PRO:HD3	15	1.0
(1,1634)	1:A:71:PRO:HB3	1:A:74:SER:HA	9	1.0
(1,1555)	1:A:202:PHE:HA	1:A:205:GLN:HB3	3	1.0
(1,1555)	1:A:202:PHE:HA	1:A:205:GLN:HB3	12	1.0
(1,1229)	1:A:204:THR:HA	1:A:207:GLU:HB3	7	1.0
(1,955)	1:A:220:THR:HG21	1:A:224:GLU:HB3	5	0.99
(1,955)	1:A:220:THR:HG22	1:A:224:GLU:HB3	5	0.99

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,955)	1:A:220:THR:HG23	1:A:224:GLU:HB3	5	0.99
(1,953)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG11	3	0.99
(1,953)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG12	3	0.99
(1,953)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG13	3	0.99
(1,953)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG11	6	0.99
(1,953)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG12	6	0.99
(1,953)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG13	6	0.99
(1,953)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG11	8	0.99
(1,953)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG12	8	0.99
(1,953)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG13	8	0.99
(1,953)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG11	9	0.99
(1,953)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG12	9	0.99
(1,953)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG13	9	0.99
(1,953)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG11	10	0.99
(1,953)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG12	10	0.99
(1,953)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG13	10	0.99
(1,953)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG11	11	0.99
(1,953)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG12	11	0.99
(1,953)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG13	11	0.99
(1,688)	1:A:106:ILE:HG21	1:A:108:PRO:HD3	14	0.99
(1,688)	1:A:106:ILE:HG22	1:A:108:PRO:HD3	14	0.99
(1,688)	1:A:106:ILE:HG23	1:A:108:PRO:HD3	14	0.99
(1,442)	1:A:106:ILE:H	1:A:107:LYS:HG3	2	0.99
(1,320)	1:A:144:LEU:H	1:A:145:ARG:HG3	18	0.99
(1,2381)	1:A:223:LYS:HA	1:A:226:ARG:HB3	10	0.99
(1,2329)	1:A:212:GLU:HG3	1:A:216:LYS:HG3	11	0.99
(1,2143)	1:A:173:MET:HE1	1:A:202:PHE:HB3	3	0.99
(1,2143)	1:A:173:MET:HE2	1:A:202:PHE:HB3	3	0.99
(1,2143)	1:A:173:MET:HE3	1:A:202:PHE:HB3	3	0.99
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD11	1:A:104:PHE:HB3	17	0.99
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD12	1:A:104:PHE:HB3	17	0.99
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD13	1:A:104:PHE:HB3	17	0.99
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD21	1:A:104:PHE:HB3	17	0.99
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD22	1:A:104:PHE:HB3	17	0.99
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD23	1:A:104:PHE:HB3	17	0.99
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD11	1:A:104:PHE:HB3	20	0.99
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD12	1:A:104:PHE:HB3	20	0.99
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD13	1:A:104:PHE:HB3	20	0.99
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD21	1:A:104:PHE:HB3	20	0.99
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD22	1:A:104:PHE:HB3	20	0.99
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD23	1:A:104:PHE:HB3	20	0.99
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG11	8	0.99

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG12	8	0.99
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG13	8	0.99
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG21	8	0.99
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG22	8	0.99
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG23	8	0.99
(1,1634)	1:A:71:PRO:HB3	1:A:74:SER:HA	13	0.99
(1,1555)	1:A:202:PHE:HA	1:A:205:GLN:HB3	2	0.99
(1,1371)	1:A:163:ARG:HA	1:A:163:ARG:HD3	8	0.99
(1,1339)	1:A:212:GLU:HG3	1:A:216:LYS:HE3	3	0.99
(1,953)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG11	2	0.98
(1,953)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG12	2	0.98
(1,953)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG13	2	0.98
(1,953)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG11	5	0.98
(1,953)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG12	5	0.98
(1,953)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG13	5	0.98
(1,953)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG11	7	0.98
(1,953)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG12	7	0.98
(1,953)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG13	7	0.98
(1,953)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG11	17	0.98
(1,953)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG12	17	0.98
(1,953)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG13	17	0.98
(1,953)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG11	20	0.98
(1,953)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG12	20	0.98
(1,953)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG13	20	0.98
(1,922)	1:A:217:THR:HG21	1:A:218:GLN:HG3	5	0.98
(1,922)	1:A:217:THR:HG22	1:A:218:GLN:HG3	5	0.98
(1,922)	1:A:217:THR:HG23	1:A:218:GLN:HG3	5	0.98
(1,553)	1:A:218:GLN:HG3	1:A:221:ILE:HD11	1	0.98
(1,553)	1:A:218:GLN:HG3	1:A:221:ILE:HD12	1	0.98
(1,553)	1:A:218:GLN:HG3	1:A:221:ILE:HD13	1	0.98
(1,2390)	1:A:224:GLU:H	1:A:224:GLU:HG3	1	0.98
(1,2384)	1:A:223:LYS:HB3	1:A:224:GLU:HG3	3	0.98
(1,2329)	1:A:212:GLU:HG3	1:A:216:LYS:HG3	12	0.98
(1,2223)	1:A:187:PHE:HA	1:A:190:GLN:HG3	10	0.98
(1,2149)	1:A:176:LEU:H	1:A:197:GLU:HG3	19	0.98
(1,1993)	1:A:141:GLU:H	1:A:180:LEU:HB3	18	0.98
(1,1682)	1:A:80:LYS:HE3	1:A:81:PHE:HB3	9	0.98
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:108:PRO:HD3	4	0.98
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:108:PRO:HD3	4	0.98
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:108:PRO:HD3	4	0.98
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:108:PRO:HD3	4	0.98
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:108:PRO:HD3	4	0.98

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:108:PRO:HD3	4	0.98
(1,1392)	1:A:107:LYS:HA	1:A:107:LYS:HE3	1	0.98
(1,1343)	1:A:216:LYS:H	1:A:216:LYS:HE3	19	0.98
(1,955)	1:A:220:THR:HG21	1:A:224:GLU:HB3	2	0.97
(1,955)	1:A:220:THR:HG22	1:A:224:GLU:HB3	2	0.97
(1,955)	1:A:220:THR:HG23	1:A:224:GLU:HB3	2	0.97
(1,442)	1:A:106:ILE:H	1:A:107:LYS:HG3	7	0.97
(1,320)	1:A:144:LEU:H	1:A:145:ARG:HG3	16	0.97
(1,309)	1:A:223:LYS:H	1:A:224:GLU:HB3	13	0.97
(1,246)	1:A:87:GLU:HG3	1:A:88:ASP:H	5	0.97
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG11	1:A:230:GLN:HG3	18	0.97
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG12	1:A:230:GLN:HG3	18	0.97
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG13	1:A:230:GLN:HG3	18	0.97
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG21	1:A:230:GLN:HG3	18	0.97
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG22	1:A:230:GLN:HG3	18	0.97
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG23	1:A:230:GLN:HG3	18	0.97
(1,2351)	1:A:216:LYS:HG3	1:A:216:LYS:HE3	4	0.97
(1,2143)	1:A:173:MET:HE1	1:A:202:PHE:HB3	11	0.97
(1,2143)	1:A:173:MET:HE2	1:A:202:PHE:HB3	11	0.97
(1,2143)	1:A:173:MET:HE3	1:A:202:PHE:HB3	11	0.97
(1,2000)	1:A:141:GLU:HG3	1:A:180:LEU:HB3	5	0.97
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD11	1:A:104:PHE:HB3	19	0.97
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD12	1:A:104:PHE:HB3	19	0.97
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD13	1:A:104:PHE:HB3	19	0.97
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD21	1:A:104:PHE:HB3	19	0.97
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD22	1:A:104:PHE:HB3	19	0.97
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD23	1:A:104:PHE:HB3	19	0.97
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:108:PRO:HD3	11	0.97
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:108:PRO:HD3	11	0.97
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:108:PRO:HD3	11	0.97
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:108:PRO:HD3	11	0.97
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:108:PRO:HD3	11	0.97
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:108:PRO:HD3	11	0.97
(1,1619)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD1	17	0.97
(1,1619)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD2	17	0.97
(1,1392)	1:A:107:LYS:HA	1:A:107:LYS:HE3	12	0.97
(1,1346)	1:A:145:ARG:HB3	1:A:146:ASP:HB3	1	0.97
(1,1326)	1:A:107:LYS:HG3	1:A:107:LYS:HE3	3	0.97
(1,1300)	1:A:86:ALA:HB1	1:A:87:GLU:HG3	5	0.97
(1,1300)	1:A:86:ALA:HB2	1:A:87:GLU:HG3	5	0.97
(1,1300)	1:A:86:ALA:HB3	1:A:87:GLU:HG3	5	0.97
(1,1300)	1:A:86:ALA:HB1	1:A:87:GLU:HG3	16	0.97

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1300)	1:A:86:ALA:HB2	1:A:87:GLU:HG3	16	0.97
(1,1300)	1:A:86:ALA:HB3	1:A:87:GLU:HG3	16	0.97
(1,1220)	1:A:216:LYS:HD3	1:A:217:THR:H	14	0.97
(1,1213)	1:A:165:HIS:HA	1:A:166:LYS:HD3	10	0.97
(1,983)	1:A:186:PRO:HB3	1:A:189:LEU:HD21	8	0.96
(1,983)	1:A:186:PRO:HB3	1:A:189:LEU:HD22	8	0.96
(1,983)	1:A:186:PRO:HB3	1:A:189:LEU:HD23	8	0.96
(1,983)	1:A:186:PRO:HB3	1:A:189:LEU:HD21	11	0.96
(1,983)	1:A:186:PRO:HB3	1:A:189:LEU:HD22	11	0.96
(1,983)	1:A:186:PRO:HB3	1:A:189:LEU:HD23	11	0.96
(1,983)	1:A:186:PRO:HB3	1:A:189:LEU:HD21	12	0.96
(1,983)	1:A:186:PRO:HB3	1:A:189:LEU:HD22	12	0.96
(1,983)	1:A:186:PRO:HB3	1:A:189:LEU:HD23	12	0.96
(1,953)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG11	14	0.96
(1,953)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG12	14	0.96
(1,953)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG13	14	0.96
(1,320)	1:A:144:LEU:H	1:A:145:ARG:HG3	3	0.96
(1,2329)	1:A:212:GLU:HG3	1:A:216:LYS:HG3	1	0.96
(1,2212)	1:A:184:ARG:HG3	1:A:185:THR:H	8	0.96
(1,2020)	1:A:145:ARG:HB3	1:A:145:ARG:HD3	20	0.96
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:108:PRO:HD3	14	0.96
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:108:PRO:HD3	14	0.96
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:108:PRO:HD3	14	0.96
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:108:PRO:HD3	14	0.96
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:108:PRO:HD3	14	0.96
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:108:PRO:HD3	14	0.96
(1,1634)	1:A:71:PRO:HB3	1:A:74:SER:HA	3	0.96
(1,1368)	1:A:163:ARG:HD3	1:A:192:ILE:HD11	15	0.96
(1,1368)	1:A:163:ARG:HD3	1:A:192:ILE:HD12	15	0.96
(1,1368)	1:A:163:ARG:HD3	1:A:192:ILE:HD13	15	0.96
(1,1339)	1:A:212:GLU:HG3	1:A:216:LYS:HE3	18	0.96
(1,1330)	1:A:102:ASP:HA	1:A:107:LYS:HE3	19	0.96
(1,983)	1:A:186:PRO:HB3	1:A:189:LEU:HD21	16	0.95
(1,983)	1:A:186:PRO:HB3	1:A:189:LEU:HD22	16	0.95
(1,983)	1:A:186:PRO:HB3	1:A:189:LEU:HD23	16	0.95
(1,967)	1:A:204:THR:HG21	1:A:207:GLU:HB3	12	0.95
(1,967)	1:A:204:THR:HG22	1:A:207:GLU:HB3	12	0.95
(1,967)	1:A:204:THR:HG23	1:A:207:GLU:HB3	12	0.95
(1,955)	1:A:220:THR:HG21	1:A:224:GLU:HB3	19	0.95
(1,955)	1:A:220:THR:HG22	1:A:224:GLU:HB3	19	0.95
(1,955)	1:A:220:THR:HG23	1:A:224:GLU:HB3	19	0.95
(1,246)	1:A:87:GLU:HG3	1:A:88:ASP:H	7	0.95

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2147)	1:A:175:PRO:HA	1:A:197:GLU:HG3	4	0.95
(1,2147)	1:A:175:PRO:HA	1:A:197:GLU:HG3	7	0.95
(1,2000)	1:A:141:GLU:HG3	1:A:180:LEU:HB3	2	0.95
(1,2000)	1:A:141:GLU:HG3	1:A:180:LEU:HB3	3	0.95
(1,2000)	1:A:141:GLU:HG3	1:A:180:LEU:HB3	7	0.95
(1,2000)	1:A:141:GLU:HG3	1:A:180:LEU:HB3	8	0.95
(1,2000)	1:A:141:GLU:HG3	1:A:180:LEU:HB3	10	0.95
(1,2000)	1:A:141:GLU:HG3	1:A:180:LEU:HB3	13	0.95
(1,2000)	1:A:141:GLU:HG3	1:A:180:LEU:HB3	16	0.95
(1,2000)	1:A:141:GLU:HG3	1:A:180:LEU:HB3	19	0.95
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD11	1:A:104:PHE:HB3	14	0.95
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD12	1:A:104:PHE:HB3	14	0.95
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD13	1:A:104:PHE:HB3	14	0.95
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD21	1:A:104:PHE:HB3	14	0.95
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD22	1:A:104:PHE:HB3	14	0.95
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD23	1:A:104:PHE:HB3	14	0.95
(1,1682)	1:A:80:LYS:HE3	1:A:81:PHE:HB3	7	0.95
(1,1675)	1:A:80:LYS:H	1:A:80:LYS:HE3	12	0.95
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:108:PRO:HD3	10	0.95
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:108:PRO:HD3	10	0.95
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:108:PRO:HD3	10	0.95
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:108:PRO:HD3	10	0.95
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:108:PRO:HD3	10	0.95
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:108:PRO:HD3	10	0.95
(1,1635)	1:A:71:PRO:HB3	1:A:74:SER:HB3	8	0.95
(1,1555)	1:A:202:PHE:HA	1:A:205:GLN:HB3	4	0.95
(1,1300)	1:A:86:ALA:HB1	1:A:87:GLU:HG3	20	0.95
(1,1300)	1:A:86:ALA:HB2	1:A:87:GLU:HG3	20	0.95
(1,1300)	1:A:86:ALA:HB3	1:A:87:GLU:HG3	20	0.95
(1,1229)	1:A:204:THR:HA	1:A:207:GLU:HB3	8	0.95
(1,983)	1:A:186:PRO:HB3	1:A:189:LEU:HD21	6	0.94
(1,983)	1:A:186:PRO:HB3	1:A:189:LEU:HD22	6	0.94
(1,983)	1:A:186:PRO:HB3	1:A:189:LEU:HD23	6	0.94
(1,983)	1:A:186:PRO:HB3	1:A:189:LEU:HD21	14	0.94
(1,983)	1:A:186:PRO:HB3	1:A:189:LEU:HD22	14	0.94
(1,983)	1:A:186:PRO:HB3	1:A:189:LEU:HD23	14	0.94
(1,983)	1:A:186:PRO:HB3	1:A:189:LEU:HD21	15	0.94
(1,983)	1:A:186:PRO:HB3	1:A:189:LEU:HD22	15	0.94
(1,983)	1:A:186:PRO:HB3	1:A:189:LEU:HD23	15	0.94
(1,983)	1:A:186:PRO:HB3	1:A:189:LEU:HD21	18	0.94
(1,983)	1:A:186:PRO:HB3	1:A:189:LEU:HD22	18	0.94
(1,983)	1:A:186:PRO:HB3	1:A:189:LEU:HD23	18	0.94

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,442)	1:A:106:ILE:H	1:A:107:LYS:HG3	4	0.94
(1,43)	1:A:182:ARG:HB3	1:A:190:GLN:HE22	6	0.94
(1,246)	1:A:87:GLU:HG3	1:A:88:ASP:H	18	0.94
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG11	1:A:230:GLN:HG3	5	0.94
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG12	1:A:230:GLN:HG3	5	0.94
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG13	1:A:230:GLN:HG3	5	0.94
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG21	1:A:230:GLN:HG3	5	0.94
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG22	1:A:230:GLN:HG3	5	0.94
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG23	1:A:230:GLN:HG3	5	0.94
(1,2389)	1:A:223:LYS:HE3	1:A:224:GLU:HB3	15	0.94
(1,2202)	1:A:183:GLU:HB3	1:A:184:ARG:HD3	9	0.94
(1,2085)	1:A:163:ARG:HB3	1:A:163:ARG:HD3	4	0.94
(1,2000)	1:A:141:GLU:HG3	1:A:180:LEU:HB3	11	0.94
(1,198)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:184:ARG:H	9	0.94
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG11	1:A:112:PHE:HB3	12	0.94
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG12	1:A:112:PHE:HB3	12	0.94
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG13	1:A:112:PHE:HB3	12	0.94
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG21	1:A:112:PHE:HB3	12	0.94
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG22	1:A:112:PHE:HB3	12	0.94
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG23	1:A:112:PHE:HB3	12	0.94
(1,1555)	1:A:202:PHE:HA	1:A:205:GLN:HB3	15	0.94
(1,1549)	1:A:107:LYS:HE3	1:A:108:PRO:HA	13	0.94
(1,1392)	1:A:107:LYS:HA	1:A:107:LYS:HE3	8	0.94
(1,1392)	1:A:107:LYS:HA	1:A:107:LYS:HE3	16	0.94
(1,1392)	1:A:107:LYS:HA	1:A:107:LYS:HE3	18	0.94
(1,1325)	1:A:166:LYS:H	1:A:166:LYS:HE3	5	0.94
(1,1300)	1:A:86:ALA:HB1	1:A:87:GLU:HG3	7	0.94
(1,1300)	1:A:86:ALA:HB2	1:A:87:GLU:HG3	7	0.94
(1,1300)	1:A:86:ALA:HB3	1:A:87:GLU:HG3	7	0.94
(1,1229)	1:A:204:THR:HA	1:A:207:GLU:HB3	19	0.94
(1,1209)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:221:ILE:HD11	17	0.94
(1,1209)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:221:ILE:HD12	17	0.94
(1,1209)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:221:ILE:HD13	17	0.94
(1,983)	1:A:186:PRO:HB3	1:A:189:LEU:HD21	2	0.93
(1,983)	1:A:186:PRO:HB3	1:A:189:LEU:HD22	2	0.93
(1,983)	1:A:186:PRO:HB3	1:A:189:LEU:HD23	2	0.93
(1,442)	1:A:106:ILE:H	1:A:107:LYS:HG3	16	0.93
(1,309)	1:A:223:LYS:H	1:A:224:GLU:HB3	17	0.93
(1,246)	1:A:87:GLU:HG3	1:A:88:ASP:H	2	0.93
(1,2368)	1:A:219:GLN:HE21	1:A:223:LYS:HD3	4	0.93
(1,2368)	1:A:219:GLN:HE22	1:A:223:LYS:HD3	4	0.93
(1,2368)	1:A:219:GLN:HE21	1:A:223:LYS:HD3	15	0.93

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2368)	1:A:219:GLN:HE22	1:A:223:LYS:HD3	15	0.93
(1,2321)	1:A:208:ARG:HG3	1:A:211:GLN:HE22	17	0.93
(1,2321)	1:A:208:ARG:HG3	1:A:211:GLN:HE22	19	0.93
(1,2202)	1:A:183:GLU:HB3	1:A:184:ARG:HD3	2	0.93
(1,2105)	1:A:167:TYR:H	1:A:221:ILE:HG13	10	0.93
(1,2004)	1:A:144:LEU:HA	1:A:148:TRP:HB3	18	0.93
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD11	1:A:104:PHE:HB3	12	0.93
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD12	1:A:104:PHE:HB3	12	0.93
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD13	1:A:104:PHE:HB3	12	0.93
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD21	1:A:104:PHE:HB3	12	0.93
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD22	1:A:104:PHE:HB3	12	0.93
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD23	1:A:104:PHE:HB3	12	0.93
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG11	10	0.93
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG12	10	0.93
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG13	10	0.93
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG21	10	0.93
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG22	10	0.93
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG23	10	0.93
(1,1603)	1:A:146:ASP:HB3	1:A:147:THR:HB	7	0.93
(1,1555)	1:A:202:PHE:HA	1:A:205:GLN:HB3	7	0.93
(1,1343)	1:A:216:LYS:H	1:A:216:LYS:HE3	12	0.93
(1,1300)	1:A:86:ALA:HB1	1:A:87:GLU:HG3	2	0.93
(1,1300)	1:A:86:ALA:HB2	1:A:87:GLU:HG3	2	0.93
(1,1300)	1:A:86:ALA:HB3	1:A:87:GLU:HG3	2	0.93
(1,1300)	1:A:86:ALA:HB1	1:A:87:GLU:HG3	18	0.93
(1,1300)	1:A:86:ALA:HB2	1:A:87:GLU:HG3	18	0.93
(1,1300)	1:A:86:ALA:HB3	1:A:87:GLU:HG3	18	0.93
(1,1269)	1:A:208:ARG:HA	1:A:211:GLN:HG3	12	0.93
(1,1229)	1:A:204:THR:HA	1:A:207:GLU:HB3	6	0.93
(1,1229)	1:A:204:THR:HA	1:A:207:GLU:HB3	18	0.93
(1,983)	1:A:186:PRO:HB3	1:A:189:LEU:HD21	19	0.92
(1,983)	1:A:186:PRO:HB3	1:A:189:LEU:HD22	19	0.92
(1,983)	1:A:186:PRO:HB3	1:A:189:LEU:HD23	19	0.92
(1,955)	1:A:220:THR:HG21	1:A:224:GLU:HB3	11	0.92
(1,955)	1:A:220:THR:HG22	1:A:224:GLU:HB3	11	0.92
(1,955)	1:A:220:THR:HG23	1:A:224:GLU:HB3	11	0.92
(1,442)	1:A:106:ILE:H	1:A:107:LYS:HG3	10	0.92
(1,246)	1:A:87:GLU:HG3	1:A:88:ASP:H	20	0.92
(1,2363)	1:A:219:GLN:HG3	1:A:223:LYS:HG3	11	0.92
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD11	1:A:158:MET:HG3	14	0.92
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD12	1:A:158:MET:HG3	14	0.92
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD13	1:A:158:MET:HG3	14	0.92

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD21	1:A:158:MET:HG3	14	0.92
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD22	1:A:158:MET:HG3	14	0.92
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD23	1:A:158:MET:HG3	14	0.92
(1,1682)	1:A:80:LYS:HE3	1:A:81:PHE:HB3	4	0.92
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:108:PRO:HG3	3	0.92
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:108:PRO:HG3	3	0.92
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:108:PRO:HG3	3	0.92
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:108:PRO:HG3	3	0.92
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:108:PRO:HG3	3	0.92
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:108:PRO:HG3	3	0.92
(1,1555)	1:A:202:PHE:HA	1:A:205:GLN:HB3	9	0.92
(1,1555)	1:A:202:PHE:HA	1:A:205:GLN:HB3	11	0.92
(1,1350)	1:A:200:ARG:HB3	1:A:200:ARG:HD3	15	0.92
(1,1342)	1:A:215:TYR:HD1	1:A:216:LYS:HE3	14	0.92
(1,1342)	1:A:215:TYR:HD2	1:A:216:LYS:HE3	14	0.92
(1,1269)	1:A:208:ARG:HA	1:A:211:GLN:HG3	17	0.92
(1,1269)	1:A:208:ARG:HA	1:A:211:GLN:HG3	20	0.92
(1,983)	1:A:186:PRO:HB3	1:A:189:LEU:HD21	5	0.91
(1,983)	1:A:186:PRO:HB3	1:A:189:LEU:HD22	5	0.91
(1,983)	1:A:186:PRO:HB3	1:A:189:LEU:HD23	5	0.91
(1,863)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG11	3	0.91
(1,863)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG12	3	0.91
(1,863)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG13	3	0.91
(1,753)	1:A:133:ALA:HB1	1:A:215:TYR:HB3	2	0.91
(1,753)	1:A:133:ALA:HB2	1:A:215:TYR:HB3	2	0.91
(1,753)	1:A:133:ALA:HB3	1:A:215:TYR:HB3	2	0.91
(1,442)	1:A:106:ILE:H	1:A:107:LYS:HG3	5	0.91
(1,442)	1:A:106:ILE:H	1:A:107:LYS:HG3	18	0.91
(1,2377)	1:A:222:TRP:HE1	1:A:226:ARG:HD3	11	0.91
(1,2143)	1:A:173:MET:HE1	1:A:202:PHE:HB3	7	0.91
(1,2143)	1:A:173:MET:HE2	1:A:202:PHE:HB3	7	0.91
(1,2143)	1:A:173:MET:HE3	1:A:202:PHE:HB3	7	0.91
(1,2105)	1:A:167:TYR:H	1:A:221:ILE:HG13	9	0.91
(1,2084)	1:A:163:ARG:HA	1:A:163:ARG:HG3	3	0.91
(1,1993)	1:A:141:GLU:H	1:A:180:LEU:HB3	12	0.91
(1,198)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:184:ARG:H	11	0.91
(1,198)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:184:ARG:H	12	0.91
(1,1914)	1:A:125:LEU:HD11	1:A:157:LEU:HB3	19	0.91
(1,1914)	1:A:125:LEU:HD12	1:A:157:LEU:HB3	19	0.91
(1,1914)	1:A:125:LEU:HD13	1:A:157:LEU:HB3	19	0.91
(1,1914)	1:A:125:LEU:HD21	1:A:157:LEU:HB3	19	0.91
(1,1914)	1:A:125:LEU:HD22	1:A:157:LEU:HB3	19	0.91

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1914)	1:A:125:LEU:HD23	1:A:157:LEU:HB3	19	0.91
(1,1848)	1:A:101:GLN:HA	1:A:107:LYS:HB3	3	0.91
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD11	1:A:104:PHE:HB3	4	0.91
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD12	1:A:104:PHE:HB3	4	0.91
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD13	1:A:104:PHE:HB3	4	0.91
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD21	1:A:104:PHE:HB3	4	0.91
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD22	1:A:104:PHE:HB3	4	0.91
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD23	1:A:104:PHE:HB3	4	0.91
(1,1677)	1:A:80:LYS:HA	1:A:80:LYS:HE3	10	0.91
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:108:PRO:HD3	12	0.91
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:108:PRO:HD3	12	0.91
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:108:PRO:HD3	12	0.91
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:108:PRO:HD3	12	0.91
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:108:PRO:HD3	12	0.91
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:108:PRO:HD3	12	0.91
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:108:PRO:HG3	4	0.91
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:108:PRO:HG3	4	0.91
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:108:PRO:HG3	4	0.91
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:108:PRO:HG3	4	0.91
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:108:PRO:HG3	4	0.91
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:108:PRO:HG3	4	0.91
(1,1619)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD1	5	0.91
(1,1619)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD2	5	0.91
(1,1535)	1:A:77:VAL:HA	1:A:78:PHE:HB3	3	0.91
(1,1321)	1:A:166:LYS:HE3	1:A:221:ILE:HG21	11	0.91
(1,1321)	1:A:166:LYS:HE3	1:A:221:ILE:HG22	11	0.91
(1,1321)	1:A:166:LYS:HE3	1:A:221:ILE:HG23	11	0.91
(1,1300)	1:A:86:ALA:HB1	1:A:87:GLU:HG3	17	0.91
(1,1300)	1:A:86:ALA:HB2	1:A:87:GLU:HG3	17	0.91
(1,1300)	1:A:86:ALA:HB3	1:A:87:GLU:HG3	17	0.91
(1,1276)	1:A:212:GLU:HG3	1:A:216:LYS:HD3	12	0.91
(1,1269)	1:A:208:ARG:HA	1:A:211:GLN:HG3	5	0.91
(1,1269)	1:A:208:ARG:HA	1:A:211:GLN:HG3	8	0.91
(1,1269)	1:A:208:ARG:HA	1:A:211:GLN:HG3	10	0.91
(1,983)	1:A:186:PRO:HB3	1:A:189:LEU:HD21	9	0.9
(1,983)	1:A:186:PRO:HB3	1:A:189:LEU:HD22	9	0.9
(1,983)	1:A:186:PRO:HB3	1:A:189:LEU:HD23	9	0.9
(1,750)	1:A:80:LYS:HB3	1:A:133:ALA:HB1	15	0.9
(1,750)	1:A:80:LYS:HB3	1:A:133:ALA:HB2	15	0.9
(1,750)	1:A:80:LYS:HB3	1:A:133:ALA:HB3	15	0.9
(1,320)	1:A:144:LEU:H	1:A:145:ARG:HG3	7	0.9
(1,246)	1:A:87:GLU:HG3	1:A:88:ASP:H	17	0.9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2392)	1:A:224:GLU:HA	1:A:227:ASN:HB3	9	0.9
(1,2390)	1:A:224:GLU:H	1:A:224:GLU:HG3	14	0.9
(1,2329)	1:A:212:GLU:HG3	1:A:216:LYS:HG3	4	0.9
(1,2321)	1:A:208:ARG:HG3	1:A:211:GLN:HE22	13	0.9
(1,2275)	1:A:196:GLU:H	1:A:196:GLU:HG3	5	0.9
(1,2218)	1:A:185:THR:HG21	1:A:190:GLN:HG3	6	0.9
(1,2218)	1:A:185:THR:HG22	1:A:190:GLN:HG3	6	0.9
(1,2218)	1:A:185:THR:HG23	1:A:190:GLN:HG3	6	0.9
(1,2147)	1:A:175:PRO:HA	1:A:197:GLU:HG3	15	0.9
(1,2004)	1:A:144:LEU:HA	1:A:148:TRP:HB3	2	0.9
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG11	1:A:112:PHE:HB3	2	0.9
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG12	1:A:112:PHE:HB3	2	0.9
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG13	1:A:112:PHE:HB3	2	0.9
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG21	1:A:112:PHE:HB3	2	0.9
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG22	1:A:112:PHE:HB3	2	0.9
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG23	1:A:112:PHE:HB3	2	0.9
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG11	1	0.9
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG12	1	0.9
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG13	1	0.9
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG21	1	0.9
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG22	1	0.9
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG23	1	0.9
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:108:PRO:HG3	1	0.9
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:108:PRO:HG3	1	0.9
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:108:PRO:HG3	1	0.9
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:108:PRO:HG3	1	0.9
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:108:PRO:HG3	1	0.9
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:108:PRO:HG3	1	0.9
(1,1392)	1:A:107:LYS:HA	1:A:107:LYS:HE3	11	0.9
(1,1392)	1:A:107:LYS:HA	1:A:107:LYS:HE3	13	0.9
(1,1372)	1:A:163:ARG:HD3	1:A:164:GLN:H	5	0.9
(1,1300)	1:A:86:ALA:HB1	1:A:87:GLU:HG3	4	0.9
(1,1300)	1:A:86:ALA:HB2	1:A:87:GLU:HG3	4	0.9
(1,1300)	1:A:86:ALA:HB3	1:A:87:GLU:HG3	4	0.9
(1,1269)	1:A:208:ARG:HA	1:A:211:GLN:HG3	7	0.9
(1,1269)	1:A:208:ARG:HA	1:A:211:GLN:HG3	11	0.9
(1,1269)	1:A:208:ARG:HA	1:A:211:GLN:HG3	15	0.9
(1,1269)	1:A:208:ARG:HA	1:A:211:GLN:HG3	19	0.9
(1,1229)	1:A:204:THR:HA	1:A:207:GLU:HB3	13	0.9
(1,1214)	1:A:166:LYS:H	1:A:166:LYS:HD3	19	0.9
(1,1210)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:221:ILE:HG21	17	0.9
(1,1210)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:221:ILE:HG22	17	0.9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1210)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:221:ILE:HG23	17	0.9
(1,983)	1:A:186:PRO:HB3	1:A:189:LEU:HD21	20	0.89
(1,983)	1:A:186:PRO:HB3	1:A:189:LEU:HD22	20	0.89
(1,983)	1:A:186:PRO:HB3	1:A:189:LEU:HD23	20	0.89
(1,922)	1:A:217:THR:HG21	1:A:218:GLN:HG3	1	0.89
(1,922)	1:A:217:THR:HG22	1:A:218:GLN:HG3	1	0.89
(1,922)	1:A:217:THR:HG23	1:A:218:GLN:HG3	1	0.89
(1,856)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG21	15	0.89
(1,856)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG22	15	0.89
(1,856)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG23	15	0.89
(1,2344)	1:A:215:TYR:HD1	1:A:216:LYS:HG3	2	0.89
(1,2344)	1:A:215:TYR:HD2	1:A:216:LYS:HG3	2	0.89
(1,2330)	1:A:212:GLU:HG3	1:A:216:LYS:HD3	20	0.89
(1,2321)	1:A:208:ARG:HG3	1:A:211:GLN:HE22	16	0.89
(1,2218)	1:A:185:THR:HG21	1:A:190:GLN:HG3	5	0.89
(1,2218)	1:A:185:THR:HG22	1:A:190:GLN:HG3	5	0.89
(1,2218)	1:A:185:THR:HG23	1:A:190:GLN:HG3	5	0.89
(1,1856)	1:A:101:GLN:HG3	1:A:109:GLY:H	20	0.89
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD11	1:A:104:PHE:HB3	18	0.89
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD12	1:A:104:PHE:HB3	18	0.89
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD13	1:A:104:PHE:HB3	18	0.89
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD21	1:A:104:PHE:HB3	18	0.89
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD22	1:A:104:PHE:HB3	18	0.89
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD23	1:A:104:PHE:HB3	18	0.89
(1,1721)	1:A:84:LEU:HD11	1:A:112:PHE:HB3	5	0.89
(1,1721)	1:A:84:LEU:HD12	1:A:112:PHE:HB3	5	0.89
(1,1721)	1:A:84:LEU:HD13	1:A:112:PHE:HB3	5	0.89
(1,1721)	1:A:84:LEU:HD21	1:A:112:PHE:HB3	5	0.89
(1,1721)	1:A:84:LEU:HD22	1:A:112:PHE:HB3	5	0.89
(1,1721)	1:A:84:LEU:HD23	1:A:112:PHE:HB3	5	0.89
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG11	17	0.89
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG12	17	0.89
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG13	17	0.89
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG21	17	0.89
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG22	17	0.89
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG23	17	0.89
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG11	20	0.89
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG12	20	0.89
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG13	20	0.89
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG21	20	0.89
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG22	20	0.89
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG23	20	0.89

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:108:PRO:HD3	17	0.89
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:108:PRO:HD3	17	0.89
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:108:PRO:HD3	17	0.89
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:108:PRO:HD3	17	0.89
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:108:PRO:HD3	17	0.89
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:108:PRO:HD3	17	0.89
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:108:PRO:HG3	6	0.89
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:108:PRO:HG3	6	0.89
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:108:PRO:HG3	6	0.89
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:108:PRO:HG3	6	0.89
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:108:PRO:HG3	6	0.89
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:108:PRO:HG3	6	0.89
(1,1361)	1:A:204:THR:HG21	1:A:208:ARG:HD3	4	0.89
(1,1361)	1:A:204:THR:HG22	1:A:208:ARG:HD3	4	0.89
(1,1361)	1:A:204:THR:HG23	1:A:208:ARG:HD3	4	0.89
(1,1342)	1:A:215:TYR:HD1	1:A:216:LYS:HE3	19	0.89
(1,1342)	1:A:215:TYR:HD2	1:A:216:LYS:HE3	19	0.89
(1,983)	1:A:186:PRO:HB3	1:A:189:LEU:HD21	7	0.88
(1,983)	1:A:186:PRO:HB3	1:A:189:LEU:HD22	7	0.88
(1,983)	1:A:186:PRO:HB3	1:A:189:LEU:HD23	7	0.88
(1,983)	1:A:186:PRO:HB3	1:A:189:LEU:HD21	13	0.88
(1,983)	1:A:186:PRO:HB3	1:A:189:LEU:HD22	13	0.88
(1,983)	1:A:186:PRO:HB3	1:A:189:LEU:HD23	13	0.88
(1,863)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG11	10	0.88
(1,863)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG12	10	0.88
(1,863)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG13	10	0.88
(1,828)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:HB1	6	0.88
(1,828)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:HB2	6	0.88
(1,828)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:HB3	6	0.88
(1,246)	1:A:87:GLU:HG3	1:A:88:ASP:H	4	0.88
(1,2392)	1:A:224:GLU:HA	1:A:227:ASN:HB3	15	0.88
(1,2330)	1:A:212:GLU:HG3	1:A:216:LYS:HD3	10	0.88
(1,2329)	1:A:212:GLU:HG3	1:A:216:LYS:HG3	19	0.88
(1,2250)	1:A:195:LEU:H	1:A:196:GLU:HG3	5	0.88
(1,2105)	1:A:167:TYR:H	1:A:221:ILE:HG13	6	0.88
(1,2000)	1:A:141:GLU:HG3	1:A:180:LEU:HB3	6	0.88
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD11	1:A:104:PHE:HB3	3	0.88
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD12	1:A:104:PHE:HB3	3	0.88
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD13	1:A:104:PHE:HB3	3	0.88
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD21	1:A:104:PHE:HB3	3	0.88
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD22	1:A:104:PHE:HB3	3	0.88
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD23	1:A:104:PHE:HB3	3	0.88

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD11	1:A:104:PHE:HB3	9	0.88
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD12	1:A:104:PHE:HB3	9	0.88
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD13	1:A:104:PHE:HB3	9	0.88
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD21	1:A:104:PHE:HB3	9	0.88
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD22	1:A:104:PHE:HB3	9	0.88
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD23	1:A:104:PHE:HB3	9	0.88
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG11	1:A:112:PHE:HB3	11	0.88
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG12	1:A:112:PHE:HB3	11	0.88
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG13	1:A:112:PHE:HB3	11	0.88
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG21	1:A:112:PHE:HB3	11	0.88
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG22	1:A:112:PHE:HB3	11	0.88
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG23	1:A:112:PHE:HB3	11	0.88
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG11	7	0.88
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG12	7	0.88
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG13	7	0.88
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG21	7	0.88
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG22	7	0.88
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG23	7	0.88
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG11	13	0.88
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG12	13	0.88
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG13	13	0.88
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG21	13	0.88
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG22	13	0.88
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG23	13	0.88
(1,1619)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD1	14	0.88
(1,1619)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD2	14	0.88
(1,1555)	1:A:202:PHE:HA	1:A:205:GLN:HB3	10	0.88
(1,1360)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HG13	9	0.88
(1,1354)	1:A:182:ARG:HB3	1:A:182:ARG:HD3	6	0.88
(1,1350)	1:A:200:ARG:HB3	1:A:200:ARG:HD3	14	0.88
(1,1300)	1:A:86:ALA:HB1	1:A:87:GLU:HG3	1	0.88
(1,1300)	1:A:86:ALA:HB2	1:A:87:GLU:HG3	1	0.88
(1,1300)	1:A:86:ALA:HB3	1:A:87:GLU:HG3	1	0.88
(1,1269)	1:A:208:ARG:HA	1:A:211:GLN:HG3	1	0.88
(1,1269)	1:A:208:ARG:HA	1:A:211:GLN:HG3	14	0.88
(1,828)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:HB1	4	0.87
(1,828)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:HB2	4	0.87
(1,828)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:HB3	4	0.87
(1,802)	1:A:113:ALA:HB1	1:A:114:GLU:HB3	7	0.87
(1,802)	1:A:113:ALA:HB2	1:A:114:GLU:HB3	7	0.87
(1,802)	1:A:113:ALA:HB3	1:A:114:GLU:HB3	7	0.87
(1,2368)	1:A:219:GLN:HE21	1:A:223:LYS:HD3	13	0.87

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2368)	1:A:219:GLN:HE22	1:A:223:LYS:HD3	13	0.87
(1,2363)	1:A:219:GLN:HG3	1:A:223:LYS:HG3	5	0.87
(1,2337)	1:A:214:VAL:HA	1:A:216:LYS:HG3	13	0.87
(1,2330)	1:A:212:GLU:HG3	1:A:216:LYS:HD3	8	0.87
(1,2329)	1:A:212:GLU:HG3	1:A:216:LYS:HG3	9	0.87
(1,2212)	1:A:184:ARG:HG3	1:A:185:THR:H	6	0.87
(1,2212)	1:A:184:ARG:HG3	1:A:185:THR:H	20	0.87
(1,2085)	1:A:163:ARG:HB3	1:A:163:ARG:HD3	12	0.87
(1,2085)	1:A:163:ARG:HB3	1:A:163:ARG:HD3	13	0.87
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD11	1:A:158:MET:HG3	3	0.87
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD12	1:A:158:MET:HG3	3	0.87
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD13	1:A:158:MET:HG3	3	0.87
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD21	1:A:158:MET:HG3	3	0.87
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD22	1:A:158:MET:HG3	3	0.87
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD23	1:A:158:MET:HG3	3	0.87
(1,1993)	1:A:141:GLU:H	1:A:180:LEU:HB3	11	0.87
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG11	1:A:112:PHE:HB3	8	0.87
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG12	1:A:112:PHE:HB3	8	0.87
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG13	1:A:112:PHE:HB3	8	0.87
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG21	1:A:112:PHE:HB3	8	0.87
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG22	1:A:112:PHE:HB3	8	0.87
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG23	1:A:112:PHE:HB3	8	0.87
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG11	2	0.87
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG12	2	0.87
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG13	2	0.87
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG21	2	0.87
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG22	2	0.87
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG23	2	0.87
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:108:PRO:HG3	7	0.87
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:108:PRO:HG3	7	0.87
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:108:PRO:HG3	7	0.87
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:108:PRO:HG3	7	0.87
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:108:PRO:HG3	7	0.87
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:108:PRO:HG3	7	0.87
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:108:PRO:HG3	18	0.87
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:108:PRO:HG3	18	0.87
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:108:PRO:HG3	18	0.87
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:108:PRO:HG3	18	0.87
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:108:PRO:HG3	18	0.87
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:108:PRO:HG3	18	0.87
(1,1619)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD1	9	0.87
(1,1619)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD2	9	0.87

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1619)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD1	18	0.87
(1,1619)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD2	18	0.87
(1,1595)	1:A:220:THR:HA	1:A:223:LYS:HD3	15	0.87
(1,1526)	1:A:192:ILE:HA	1:A:193:ASN:HB3	10	0.87
(1,1358)	1:A:231:ARG:HA	1:A:231:ARG:HD3	13	0.87
(1,1355)	1:A:182:ARG:HD3	1:A:190:GLN:HE22	13	0.87
(1,1351)	1:A:200:ARG:HA	1:A:200:ARG:HD3	10	0.87
(1,1330)	1:A:102:ASP:HA	1:A:107:LYS:HE3	17	0.87
(1,1300)	1:A:86:ALA:HB1	1:A:87:GLU:HG3	3	0.87
(1,1300)	1:A:86:ALA:HB2	1:A:87:GLU:HG3	3	0.87
(1,1300)	1:A:86:ALA:HB3	1:A:87:GLU:HG3	3	0.87
(1,1269)	1:A:208:ARG:HA	1:A:211:GLN:HG3	3	0.87
(1,1269)	1:A:208:ARG:HA	1:A:211:GLN:HG3	9	0.87
(1,1229)	1:A:204:THR:HA	1:A:207:GLU:HB3	12	0.87
(1,983)	1:A:186:PRO:HB3	1:A:189:LEU:HD21	3	0.86
(1,983)	1:A:186:PRO:HB3	1:A:189:LEU:HD22	3	0.86
(1,983)	1:A:186:PRO:HB3	1:A:189:LEU:HD23	3	0.86
(1,856)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG21	5	0.86
(1,856)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG22	5	0.86
(1,856)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG23	5	0.86
(1,828)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:HB1	8	0.86
(1,828)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:HB2	8	0.86
(1,828)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:HB3	8	0.86
(1,2392)	1:A:224:GLU:HA	1:A:227:ASN:HB3	8	0.86
(1,2202)	1:A:183:GLU:HB3	1:A:184:ARG:HD3	13	0.86
(1,2143)	1:A:173:MET:HE1	1:A:202:PHE:HB3	19	0.86
(1,2143)	1:A:173:MET:HE2	1:A:202:PHE:HB3	19	0.86
(1,2143)	1:A:173:MET:HE3	1:A:202:PHE:HB3	19	0.86
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG11	16	0.86
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG12	16	0.86
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG13	16	0.86
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG21	16	0.86
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG22	16	0.86
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG23	16	0.86
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG11	19	0.86
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG12	19	0.86
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG13	19	0.86
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG21	19	0.86
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG22	19	0.86
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG23	19	0.86
(1,1653)	1:A:76:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG11	4	0.86
(1,1653)	1:A:76:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG12	4	0.86

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1653)	1:A:76:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG13	4	0.86
(1,1566)	1:A:71:PRO:HG3	1:A:74:SER:HB3	7	0.86
(1,1392)	1:A:107:LYS:HA	1:A:107:LYS:HE3	2	0.86
(1,1392)	1:A:107:LYS:HA	1:A:107:LYS:HE3	5	0.86
(1,1392)	1:A:107:LYS:HA	1:A:107:LYS:HE3	14	0.86
(1,1372)	1:A:163:ARG:HD3	1:A:164:GLN:H	14	0.86
(1,1360)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HG13	3	0.86
(1,1360)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HG13	6	0.86
(1,1360)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HG13	20	0.86
(1,1351)	1:A:200:ARG:HA	1:A:200:ARG:HD3	20	0.86
(1,1350)	1:A:200:ARG:HB3	1:A:200:ARG:HD3	2	0.86
(1,1269)	1:A:208:ARG:HA	1:A:211:GLN:HG3	4	0.86
(1,983)	1:A:186:PRO:HB3	1:A:189:LEU:HD21	4	0.85
(1,983)	1:A:186:PRO:HB3	1:A:189:LEU:HD22	4	0.85
(1,983)	1:A:186:PRO:HB3	1:A:189:LEU:HD23	4	0.85
(1,983)	1:A:186:PRO:HB3	1:A:189:LEU:HD21	17	0.85
(1,983)	1:A:186:PRO:HB3	1:A:189:LEU:HD22	17	0.85
(1,983)	1:A:186:PRO:HB3	1:A:189:LEU:HD23	17	0.85
(1,442)	1:A:106:ILE:H	1:A:107:LYS:HG3	12	0.85
(1,246)	1:A:87:GLU:HG3	1:A:88:ASP:H	1	0.85
(1,2392)	1:A:224:GLU:HA	1:A:227:ASN:HB3	19	0.85
(1,2330)	1:A:212:GLU:HG3	1:A:216:LYS:HD3	7	0.85
(1,2321)	1:A:208:ARG:HG3	1:A:211:GLN:HE22	5	0.85
(1,2218)	1:A:185:THR:HG21	1:A:190:GLN:HG3	11	0.85
(1,2218)	1:A:185:THR:HG22	1:A:190:GLN:HG3	11	0.85
(1,2218)	1:A:185:THR:HG23	1:A:190:GLN:HG3	11	0.85
(1,2218)	1:A:185:THR:HG21	1:A:190:GLN:HG3	12	0.85
(1,2218)	1:A:185:THR:HG22	1:A:190:GLN:HG3	12	0.85
(1,2218)	1:A:185:THR:HG23	1:A:190:GLN:HG3	12	0.85
(1,2218)	1:A:185:THR:HG21	1:A:190:GLN:HG3	15	0.85
(1,2218)	1:A:185:THR:HG22	1:A:190:GLN:HG3	15	0.85
(1,2218)	1:A:185:THR:HG23	1:A:190:GLN:HG3	15	0.85
(1,2204)	1:A:183:GLU:HG3	1:A:184:ARG:HG3	20	0.85
(1,2143)	1:A:173:MET:HE1	1:A:202:PHE:HB3	17	0.85
(1,2143)	1:A:173:MET:HE2	1:A:202:PHE:HB3	17	0.85
(1,2143)	1:A:173:MET:HE3	1:A:202:PHE:HB3	17	0.85
(1,2105)	1:A:167:TYR:H	1:A:221:ILE:HG13	16	0.85
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD11	1:A:158:MET:HG3	19	0.85
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD12	1:A:158:MET:HG3	19	0.85
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD13	1:A:158:MET:HG3	19	0.85
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD21	1:A:158:MET:HG3	19	0.85
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD22	1:A:158:MET:HG3	19	0.85

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD23	1:A:158:MET:HG3	19	0.85
(1,2000)	1:A:141:GLU:HG3	1:A:180:LEU:HB3	12	0.85
(1,2000)	1:A:141:GLU:HG3	1:A:180:LEU:HB3	15	0.85
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG11	11	0.85
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG12	11	0.85
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG13	11	0.85
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG21	11	0.85
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG22	11	0.85
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG23	11	0.85
(1,1358)	1:A:231:ARG:HA	1:A:231:ARG:HD3	3	0.85
(1,1300)	1:A:86:ALA:HB1	1:A:87:GLU:HG3	19	0.85
(1,1300)	1:A:86:ALA:HB2	1:A:87:GLU:HG3	19	0.85
(1,1300)	1:A:86:ALA:HB3	1:A:87:GLU:HG3	19	0.85
(1,983)	1:A:186:PRO:HB3	1:A:189:LEU:HD21	10	0.84
(1,983)	1:A:186:PRO:HB3	1:A:189:LEU:HD22	10	0.84
(1,983)	1:A:186:PRO:HB3	1:A:189:LEU:HD23	10	0.84
(1,856)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG21	3	0.84
(1,856)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG22	3	0.84
(1,856)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG23	3	0.84
(1,387)	1:A:80:LYS:HD3	1:A:107:LYS:H	3	0.84
(1,2392)	1:A:224:GLU:HA	1:A:227:ASN:HB3	2	0.84
(1,2381)	1:A:223:LYS:HA	1:A:226:ARG:HB3	19	0.84
(1,2337)	1:A:214:VAL:HA	1:A:216:LYS:HG3	1	0.84
(1,2337)	1:A:214:VAL:HA	1:A:216:LYS:HG3	15	0.84
(1,2291)	1:A:198:GLU:HG3	1:A:199:SER:H	18	0.84
(1,2218)	1:A:185:THR:HG21	1:A:190:GLN:HG3	2	0.84
(1,2218)	1:A:185:THR:HG22	1:A:190:GLN:HG3	2	0.84
(1,2218)	1:A:185:THR:HG23	1:A:190:GLN:HG3	2	0.84
(1,2218)	1:A:185:THR:HG21	1:A:190:GLN:HG3	8	0.84
(1,2218)	1:A:185:THR:HG22	1:A:190:GLN:HG3	8	0.84
(1,2218)	1:A:185:THR:HG23	1:A:190:GLN:HG3	8	0.84
(1,2218)	1:A:185:THR:HG21	1:A:190:GLN:HG3	14	0.84
(1,2218)	1:A:185:THR:HG22	1:A:190:GLN:HG3	14	0.84
(1,2218)	1:A:185:THR:HG23	1:A:190:GLN:HG3	14	0.84
(1,2218)	1:A:185:THR:HG21	1:A:190:GLN:HG3	16	0.84
(1,2218)	1:A:185:THR:HG22	1:A:190:GLN:HG3	16	0.84
(1,2218)	1:A:185:THR:HG23	1:A:190:GLN:HG3	16	0.84
(1,2215)	1:A:185:THR:HB	1:A:190:GLN:HG3	5	0.84
(1,2152)	1:A:176:LEU:HA	1:A:198:GLU:HG3	1	0.84
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG11	2	0.84
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG12	2	0.84
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG13	2	0.84

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG21	2	0.84
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG22	2	0.84
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG23	2	0.84
(1,2085)	1:A:163:ARG:HB3	1:A:163:ARG:HD3	7	0.84
(1,1895)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:122:LEU:HD11	20	0.84
(1,1895)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:122:LEU:HD12	20	0.84
(1,1895)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:122:LEU:HD13	20	0.84
(1,1895)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:122:LEU:HD21	20	0.84
(1,1895)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:122:LEU:HD22	20	0.84
(1,1895)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:122:LEU:HD23	20	0.84
(1,1849)	1:A:101:GLN:HB3	1:A:101:GLN:HE21	17	0.84
(1,1849)	1:A:101:GLN:HB3	1:A:101:GLN:HE22	17	0.84
(1,1634)	1:A:71:PRO:HB3	1:A:74:SER:HA	1	0.84
(1,1634)	1:A:71:PRO:HB3	1:A:74:SER:HA	17	0.84
(1,1619)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD1	16	0.84
(1,1619)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD2	16	0.84
(1,1535)	1:A:77:VAL:HA	1:A:78:PHE:HB3	16	0.84
(1,1392)	1:A:107:LYS:HA	1:A:107:LYS:HE3	6	0.84
(1,1392)	1:A:107:LYS:HA	1:A:107:LYS:HE3	7	0.84
(1,1372)	1:A:163:ARG:HD3	1:A:164:GLN:H	8	0.84
(1,1360)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HG13	5	0.84
(1,1360)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HG13	11	0.84
(1,1300)	1:A:86:ALA:HB1	1:A:87:GLU:HG3	12	0.84
(1,1300)	1:A:86:ALA:HB2	1:A:87:GLU:HG3	12	0.84
(1,1300)	1:A:86:ALA:HB3	1:A:87:GLU:HG3	12	0.84
(1,1269)	1:A:208:ARG:HA	1:A:211:GLN:HG3	18	0.84
(1,983)	1:A:186:PRO:HB3	1:A:189:LEU:HD21	1	0.83
(1,983)	1:A:186:PRO:HB3	1:A:189:LEU:HD22	1	0.83
(1,983)	1:A:186:PRO:HB3	1:A:189:LEU:HD23	1	0.83
(1,863)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG11	13	0.83
(1,863)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG12	13	0.83
(1,863)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG13	13	0.83
(1,442)	1:A:106:ILE:H	1:A:107:LYS:HG3	14	0.83
(1,2349)	1:A:216:LYS:HB3	1:A:216:LYS:HE3	4	0.83
(1,2337)	1:A:214:VAL:HA	1:A:216:LYS:HG3	9	0.83
(1,2330)	1:A:212:GLU:HG3	1:A:216:LYS:HD3	11	0.83
(1,2218)	1:A:185:THR:HG21	1:A:190:GLN:HG3	9	0.83
(1,2218)	1:A:185:THR:HG22	1:A:190:GLN:HG3	9	0.83
(1,2218)	1:A:185:THR:HG23	1:A:190:GLN:HG3	9	0.83
(1,2215)	1:A:185:THR:HB	1:A:190:GLN:HG3	6	0.83
(1,2193)	1:A:180:LEU:HD11	1:A:184:ARG:HD3	6	0.83
(1,2193)	1:A:180:LEU:HD12	1:A:184:ARG:HD3	6	0.83

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2193)	1:A:180:LEU:HD13	1:A:184:ARG:HD3	6	0.83
(1,2193)	1:A:180:LEU:HD21	1:A:184:ARG:HD3	6	0.83
(1,2193)	1:A:180:LEU:HD22	1:A:184:ARG:HD3	6	0.83
(1,2193)	1:A:180:LEU:HD23	1:A:184:ARG:HD3	6	0.83
(1,2193)	1:A:180:LEU:HD11	1:A:184:ARG:HD3	17	0.83
(1,2193)	1:A:180:LEU:HD12	1:A:184:ARG:HD3	17	0.83
(1,2193)	1:A:180:LEU:HD13	1:A:184:ARG:HD3	17	0.83
(1,2193)	1:A:180:LEU:HD21	1:A:184:ARG:HD3	17	0.83
(1,2193)	1:A:180:LEU:HD22	1:A:184:ARG:HD3	17	0.83
(1,2193)	1:A:180:LEU:HD23	1:A:184:ARG:HD3	17	0.83
(1,2098)	1:A:166:LYS:HB3	1:A:166:LYS:HE3	3	0.83
(1,2085)	1:A:163:ARG:HB3	1:A:163:ARG:HD3	10	0.83
(1,2000)	1:A:141:GLU:HG3	1:A:180:LEU:HB3	14	0.83
(1,1856)	1:A:101:GLN:HG3	1:A:109:GLY:H	19	0.83
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD11	1:A:104:PHE:HB3	13	0.83
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD12	1:A:104:PHE:HB3	13	0.83
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD13	1:A:104:PHE:HB3	13	0.83
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD21	1:A:104:PHE:HB3	13	0.83
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD22	1:A:104:PHE:HB3	13	0.83
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD23	1:A:104:PHE:HB3	13	0.83
(1,1619)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD1	4	0.83
(1,1619)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD2	4	0.83
(1,1619)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD1	8	0.83
(1,1619)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD2	8	0.83
(1,1372)	1:A:163:ARG:HD3	1:A:164:GLN:H	17	0.83
(1,1360)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HG13	14	0.83
(1,1360)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HG13	19	0.83
(1,1351)	1:A:200:ARG:HA	1:A:200:ARG:HD3	1	0.83
(1,1346)	1:A:145:ARG:HB3	1:A:146:ASP:HB3	20	0.83
(1,1343)	1:A:216:LYS:H	1:A:216:LYS:HE3	6	0.83
(1,1325)	1:A:166:LYS:H	1:A:166:LYS:HE3	19	0.83
(1,955)	1:A:220:THR:HG21	1:A:224:GLU:HB3	20	0.82
(1,955)	1:A:220:THR:HG22	1:A:224:GLU:HB3	20	0.82
(1,955)	1:A:220:THR:HG23	1:A:224:GLU:HB3	20	0.82
(1,952)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG11	13	0.82
(1,952)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG12	13	0.82
(1,952)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG13	13	0.82
(1,952)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG11	16	0.82
(1,952)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG12	16	0.82
(1,952)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG13	16	0.82
(1,922)	1:A:217:THR:HG21	1:A:218:GLN:HG3	2	0.82
(1,922)	1:A:217:THR:HG22	1:A:218:GLN:HG3	2	0.82

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,922)	1:A:217:THR:HG23	1:A:218:GLN:HG3	2	0.82
(1,922)	1:A:217:THR:HG21	1:A:218:GLN:HG3	6	0.82
(1,922)	1:A:217:THR:HG22	1:A:218:GLN:HG3	6	0.82
(1,922)	1:A:217:THR:HG23	1:A:218:GLN:HG3	6	0.82
(1,750)	1:A:80:LYS:HB3	1:A:133:ALA:HB1	10	0.82
(1,750)	1:A:80:LYS:HB3	1:A:133:ALA:HB2	10	0.82
(1,750)	1:A:80:LYS:HB3	1:A:133:ALA:HB3	10	0.82
(1,734)	1:A:192:ILE:HG21	1:A:193:ASN:HB3	10	0.82
(1,734)	1:A:192:ILE:HG22	1:A:193:ASN:HB3	10	0.82
(1,734)	1:A:192:ILE:HG23	1:A:193:ASN:HB3	10	0.82
(1,628)	1:A:111:ILE:HD11	1:A:114:GLU:HB3	1	0.82
(1,628)	1:A:111:ILE:HD12	1:A:114:GLU:HB3	1	0.82
(1,628)	1:A:111:ILE:HD13	1:A:114:GLU:HB3	1	0.82
(1,445)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:H	14	0.82
(1,2389)	1:A:223:LYS:HE3	1:A:224:GLU:HB3	5	0.82
(1,2337)	1:A:214:VAL:HA	1:A:216:LYS:HG3	3	0.82
(1,2337)	1:A:214:VAL:HA	1:A:216:LYS:HG3	4	0.82
(1,2218)	1:A:185:THR:HG21	1:A:190:GLN:HG3	18	0.82
(1,2218)	1:A:185:THR:HG22	1:A:190:GLN:HG3	18	0.82
(1,2218)	1:A:185:THR:HG23	1:A:190:GLN:HG3	18	0.82
(1,2143)	1:A:173:MET:HE1	1:A:202:PHE:HB3	16	0.82
(1,2143)	1:A:173:MET:HE2	1:A:202:PHE:HB3	16	0.82
(1,2143)	1:A:173:MET:HE3	1:A:202:PHE:HB3	16	0.82
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD11	1:A:158:MET:HG3	8	0.82
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD12	1:A:158:MET:HG3	8	0.82
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD13	1:A:158:MET:HG3	8	0.82
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD21	1:A:158:MET:HG3	8	0.82
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD22	1:A:158:MET:HG3	8	0.82
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD23	1:A:158:MET:HG3	8	0.82
(1,2041)	1:A:156:SER:H	1:A:157:LEU:HB3	14	0.82
(1,2004)	1:A:144:LEU:HA	1:A:148:TRP:HB3	17	0.82
(1,2000)	1:A:141:GLU:HG3	1:A:180:LEU:HB3	1	0.82
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD11	1:A:104:PHE:HB3	1	0.82
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD12	1:A:104:PHE:HB3	1	0.82
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD13	1:A:104:PHE:HB3	1	0.82
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD21	1:A:104:PHE:HB3	1	0.82
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD22	1:A:104:PHE:HB3	1	0.82
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD23	1:A:104:PHE:HB3	1	0.82
(1,1682)	1:A:80:LYS:HE3	1:A:81:PHE:HB3	10	0.82
(1,1535)	1:A:77:VAL:HA	1:A:78:PHE:HB3	11	0.82
(1,1526)	1:A:192:ILE:HA	1:A:193:ASN:HB3	5	0.82
(1,1501)	1:A:101:GLN:HA	1:A:107:LYS:HG3	8	0.82

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1231)	1:A:111:ILE:HG21	1:A:114:GLU:HB3	3	0.82
(1,1231)	1:A:111:ILE:HG22	1:A:114:GLU:HB3	3	0.82
(1,1231)	1:A:111:ILE:HG23	1:A:114:GLU:HB3	3	0.82
(1,2389)	1:A:223:LYS:HE3	1:A:224:GLU:HB3	4	0.81
(1,2349)	1:A:216:LYS:HB3	1:A:216:LYS:HE3	15	0.81
(1,2337)	1:A:214:VAL:HA	1:A:216:LYS:HG3	8	0.81
(1,2337)	1:A:214:VAL:HA	1:A:216:LYS:HG3	19	0.81
(1,2331)	1:A:212:GLU:HG3	1:A:216:LYS:HE3	19	0.81
(1,2319)	1:A:207:GLU:H	1:A:208:ARG:HG3	1	0.81
(1,2218)	1:A:185:THR:HG21	1:A:190:GLN:HG3	4	0.81
(1,2218)	1:A:185:THR:HG22	1:A:190:GLN:HG3	4	0.81
(1,2218)	1:A:185:THR:HG23	1:A:190:GLN:HG3	4	0.81
(1,2152)	1:A:176:LEU:HA	1:A:198:GLU:HG3	14	0.81
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG11	5	0.81
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG12	5	0.81
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG13	5	0.81
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG21	5	0.81
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG22	5	0.81
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG23	5	0.81
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:108:PRO:HD3	16	0.81
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:108:PRO:HD3	16	0.81
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:108:PRO:HD3	16	0.81
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:108:PRO:HD3	16	0.81
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:108:PRO:HD3	16	0.81
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:108:PRO:HD3	16	0.81
(1,1648)	1:A:76:GLU:HB3	1:A:76:GLU:HG3	1	0.81
(1,1555)	1:A:202:PHE:HA	1:A:205:GLN:HB3	8	0.81
(1,1555)	1:A:202:PHE:HA	1:A:205:GLN:HB3	14	0.81
(1,1535)	1:A:77:VAL:HA	1:A:78:PHE:HB3	15	0.81
(1,1350)	1:A:200:ARG:HB3	1:A:200:ARG:HD3	6	0.81
(1,1321)	1:A:166:LYS:HE3	1:A:221:ILE:HG21	9	0.81
(1,1321)	1:A:166:LYS:HE3	1:A:221:ILE:HG22	9	0.81
(1,1321)	1:A:166:LYS:HE3	1:A:221:ILE:HG23	9	0.81
(1,955)	1:A:220:THR:HG21	1:A:224:GLU:HB3	4	0.8
(1,955)	1:A:220:THR:HG22	1:A:224:GLU:HB3	4	0.8
(1,955)	1:A:220:THR:HG23	1:A:224:GLU:HB3	4	0.8
(1,750)	1:A:80:LYS:HB3	1:A:133:ALA:HB1	11	0.8
(1,750)	1:A:80:LYS:HB3	1:A:133:ALA:HB2	11	0.8
(1,750)	1:A:80:LYS:HB3	1:A:133:ALA:HB3	11	0.8
(1,628)	1:A:111:ILE:HD11	1:A:114:GLU:HB3	11	0.8
(1,628)	1:A:111:ILE:HD12	1:A:114:GLU:HB3	11	0.8
(1,628)	1:A:111:ILE:HD13	1:A:114:GLU:HB3	11	0.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2394)	1:A:224:GLU:HG3	1:A:225:THR:H	14	0.8
(1,2337)	1:A:214:VAL:HA	1:A:216:LYS:HG3	7	0.8
(1,2212)	1:A:184:ARG:HG3	1:A:185:THR:H	2	0.8
(1,2204)	1:A:183:GLU:HG3	1:A:184:ARG:HG3	2	0.8
(1,2147)	1:A:175:PRO:HA	1:A:197:GLU:HG3	20	0.8
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG11	13	0.8
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG12	13	0.8
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG13	13	0.8
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG21	13	0.8
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG22	13	0.8
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG23	13	0.8
(1,1993)	1:A:141:GLU:H	1:A:180:LEU:HB3	9	0.8
(1,1895)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:122:LEU:HD11	18	0.8
(1,1895)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:122:LEU:HD12	18	0.8
(1,1895)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:122:LEU:HD13	18	0.8
(1,1895)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:122:LEU:HD21	18	0.8
(1,1895)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:122:LEU:HD22	18	0.8
(1,1895)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:122:LEU:HD23	18	0.8
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG11	3	0.8
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG12	3	0.8
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG13	3	0.8
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG21	3	0.8
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG22	3	0.8
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG23	3	0.8
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:108:PRO:HG3	2	0.8
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:108:PRO:HG3	2	0.8
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:108:PRO:HG3	2	0.8
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:108:PRO:HG3	2	0.8
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:108:PRO:HG3	2	0.8
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:108:PRO:HG3	2	0.8
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:108:PRO:HG3	5	0.8
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:108:PRO:HG3	5	0.8
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:108:PRO:HG3	5	0.8
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:108:PRO:HG3	5	0.8
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:108:PRO:HG3	5	0.8
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:108:PRO:HG3	5	0.8
(1,1648)	1:A:76:GLU:HB3	1:A:76:GLU:HG3	6	0.8
(1,1648)	1:A:76:GLU:HB3	1:A:76:GLU:HG3	13	0.8
(1,1648)	1:A:76:GLU:HB3	1:A:76:GLU:HG3	16	0.8
(1,1648)	1:A:76:GLU:HB3	1:A:76:GLU:HG3	17	0.8
(1,1549)	1:A:107:LYS:HE3	1:A:108:PRO:HA	10	0.8
(1,1392)	1:A:107:LYS:HA	1:A:107:LYS:HE3	17	0.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1372)	1:A:163:ARG:HD3	1:A:164:GLN:H	6	0.8
(1,1355)	1:A:182:ARG:HD3	1:A:190:GLN:HE22	8	0.8
(1,1350)	1:A:200:ARG:HB3	1:A:200:ARG:HD3	3	0.8
(1,1224)	1:A:223:LYS:HD3	1:A:224:GLU:HB3	16	0.8
(1,856)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG21	10	0.79
(1,856)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG22	10	0.79
(1,856)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG23	10	0.79
(1,445)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:H	12	0.79
(1,2387)	1:A:223:LYS:HG3	1:A:224:GLU:H	20	0.79
(1,2381)	1:A:223:LYS:HA	1:A:226:ARG:HB3	8	0.79
(1,2206)	1:A:184:ARG:H	1:A:184:ARG:HG3	18	0.79
(1,2006)	1:A:144:LEU:HB3	1:A:180:LEU:HD11	8	0.79
(1,2006)	1:A:144:LEU:HB3	1:A:180:LEU:HD12	8	0.79
(1,2006)	1:A:144:LEU:HB3	1:A:180:LEU:HD13	8	0.79
(1,2006)	1:A:144:LEU:HB3	1:A:180:LEU:HD21	8	0.79
(1,2006)	1:A:144:LEU:HB3	1:A:180:LEU:HD22	8	0.79
(1,2006)	1:A:144:LEU:HB3	1:A:180:LEU:HD23	8	0.79
(1,2000)	1:A:141:GLU:HG3	1:A:180:LEU:HB3	9	0.79
(1,1882)	1:A:112:PHE:HA	1:A:115:MET:HG3	8	0.79
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG11	14	0.79
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG12	14	0.79
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG13	14	0.79
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG21	14	0.79
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG22	14	0.79
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG23	14	0.79
(1,1682)	1:A:80:LYS:HE3	1:A:81:PHE:HB3	14	0.79
(1,1648)	1:A:76:GLU:HB3	1:A:76:GLU:HG3	5	0.79
(1,1648)	1:A:76:GLU:HB3	1:A:76:GLU:HG3	7	0.79
(1,1648)	1:A:76:GLU:HB3	1:A:76:GLU:HG3	8	0.79
(1,1648)	1:A:76:GLU:HB3	1:A:76:GLU:HG3	12	0.79
(1,1648)	1:A:76:GLU:HB3	1:A:76:GLU:HG3	18	0.79
(1,1648)	1:A:76:GLU:HB3	1:A:76:GLU:HG3	19	0.79
(1,1619)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD1	13	0.79
(1,1619)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD2	13	0.79
(1,1392)	1:A:107:LYS:HA	1:A:107:LYS:HE3	9	0.79
(1,1360)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HG13	13	0.79
(1,1343)	1:A:216:LYS:H	1:A:216:LYS:HE3	11	0.79
(1,1325)	1:A:166:LYS:H	1:A:166:LYS:HE3	2	0.79
(1,1215)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:167:TYR:H	8	0.79
(1,750)	1:A:80:LYS:HB3	1:A:133:ALA:HB1	16	0.78
(1,750)	1:A:80:LYS:HB3	1:A:133:ALA:HB2	16	0.78
(1,750)	1:A:80:LYS:HB3	1:A:133:ALA:HB3	16	0.78

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,532)	1:A:171:ILE:HD11	1:A:193:ASN:HB3	4	0.78
(1,532)	1:A:171:ILE:HD12	1:A:193:ASN:HB3	4	0.78
(1,532)	1:A:171:ILE:HD13	1:A:193:ASN:HB3	4	0.78
(1,246)	1:A:87:GLU:HG3	1:A:88:ASP:H	3	0.78
(1,2392)	1:A:224:GLU:HA	1:A:227:ASN:HB3	14	0.78
(1,2352)	1:A:216:LYS:HG3	1:A:217:THR:H	3	0.78
(1,2337)	1:A:214:VAL:HA	1:A:216:LYS:HG3	2	0.78
(1,2337)	1:A:214:VAL:HA	1:A:216:LYS:HG3	10	0.78
(1,2321)	1:A:208:ARG:HG3	1:A:211:GLN:HE22	20	0.78
(1,2296)	1:A:200:ARG:HG3	1:A:200:ARG:HD3	5	0.78
(1,2296)	1:A:200:ARG:HG3	1:A:200:ARG:HD3	6	0.78
(1,2296)	1:A:200:ARG:HG3	1:A:200:ARG:HD3	7	0.78
(1,2296)	1:A:200:ARG:HG3	1:A:200:ARG:HD3	8	0.78
(1,2215)	1:A:185:THR:HB	1:A:190:GLN:HG3	8	0.78
(1,2215)	1:A:185:THR:HB	1:A:190:GLN:HG3	11	0.78
(1,2215)	1:A:185:THR:HB	1:A:190:GLN:HG3	12	0.78
(1,2202)	1:A:183:GLU:HB3	1:A:184:ARG:HD3	11	0.78
(1,2000)	1:A:141:GLU:HG3	1:A:180:LEU:HB3	20	0.78
(1,1856)	1:A:101:GLN:HG3	1:A:109:GLY:H	17	0.78
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG11	12	0.78
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG12	12	0.78
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG13	12	0.78
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG21	12	0.78
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG22	12	0.78
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG23	12	0.78
(1,1648)	1:A:76:GLU:HB3	1:A:76:GLU:HG3	3	0.78
(1,1648)	1:A:76:GLU:HB3	1:A:76:GLU:HG3	14	0.78
(1,1619)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD1	19	0.78
(1,1619)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD2	19	0.78
(1,1555)	1:A:202:PHE:HA	1:A:205:GLN:HB3	6	0.78
(1,1360)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HG13	17	0.78
(1,1322)	1:A:166:LYS:HG3	1:A:166:LYS:HE3	3	0.78
(1,1214)	1:A:166:LYS:H	1:A:166:LYS:HD3	15	0.78
(1,1209)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:221:ILE:HD11	2	0.78
(1,1209)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:221:ILE:HD12	2	0.78
(1,1209)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:221:ILE:HD13	2	0.78
(1,628)	1:A:111:ILE:HD11	1:A:114:GLU:HB3	12	0.77
(1,628)	1:A:111:ILE:HD12	1:A:114:GLU:HB3	12	0.77
(1,628)	1:A:111:ILE:HD13	1:A:114:GLU:HB3	12	0.77
(1,2382)	1:A:223:LYS:HA	1:A:226:ARG:HG3	11	0.77
(1,2381)	1:A:223:LYS:HA	1:A:226:ARG:HB3	20	0.77
(1,2319)	1:A:207:GLU:H	1:A:208:ARG:HG3	15	0.77

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2296)	1:A:200:ARG:HG3	1:A:200:ARG:HD3	10	0.77
(1,2296)	1:A:200:ARG:HG3	1:A:200:ARG:HD3	18	0.77
(1,2296)	1:A:200:ARG:HG3	1:A:200:ARG:HD3	20	0.77
(1,2215)	1:A:185:THR:HB	1:A:190:GLN:HG3	15	0.77
(1,2083)	1:A:163:ARG:H	1:A:163:ARG:HG3	1	0.77
(1,2000)	1:A:141:GLU:HG3	1:A:180:LEU:HB3	4	0.77
(1,1888)	1:A:115:MET:HG3	1:A:116:PRO:HD3	9	0.77
(1,1879)	1:A:110:ILE:HD11	1:A:115:MET:HG3	9	0.77
(1,1879)	1:A:110:ILE:HD12	1:A:115:MET:HG3	9	0.77
(1,1879)	1:A:110:ILE:HD13	1:A:115:MET:HG3	9	0.77
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD11	1:A:104:PHE:HB3	7	0.77
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD12	1:A:104:PHE:HB3	7	0.77
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD13	1:A:104:PHE:HB3	7	0.77
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD21	1:A:104:PHE:HB3	7	0.77
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD22	1:A:104:PHE:HB3	7	0.77
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD23	1:A:104:PHE:HB3	7	0.77
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG11	18	0.77
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG12	18	0.77
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG13	18	0.77
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG21	18	0.77
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG22	18	0.77
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG23	18	0.77
(1,1648)	1:A:76:GLU:HB3	1:A:76:GLU:HG3	9	0.77
(1,1648)	1:A:76:GLU:HB3	1:A:76:GLU:HG3	11	0.77
(1,1535)	1:A:77:VAL:HA	1:A:78:PHE:HB3	5	0.77
(1,1501)	1:A:101:GLN:HA	1:A:107:LYS:HG3	16	0.77
(1,1354)	1:A:182:ARG:HB3	1:A:182:ARG:HD3	1	0.77
(1,1343)	1:A:216:LYS:H	1:A:216:LYS:HE3	9	0.77
(1,1326)	1:A:107:LYS:HG3	1:A:107:LYS:HE3	10	0.77
(1,1325)	1:A:166:LYS:H	1:A:166:LYS:HE3	10	0.77
(1,1269)	1:A:208:ARG:HA	1:A:211:GLN:HG3	6	0.77
(1,1215)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:167:TYR:H	17	0.77
(1,856)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG21	13	0.76
(1,856)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG22	13	0.76
(1,856)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG23	13	0.76
(1,750)	1:A:80:LYS:HB3	1:A:133:ALA:HB1	6	0.76
(1,750)	1:A:80:LYS:HB3	1:A:133:ALA:HB2	6	0.76
(1,750)	1:A:80:LYS:HB3	1:A:133:ALA:HB3	6	0.76
(1,628)	1:A:111:ILE:HD11	1:A:114:GLU:HB3	5	0.76
(1,628)	1:A:111:ILE:HD12	1:A:114:GLU:HB3	5	0.76
(1,628)	1:A:111:ILE:HD13	1:A:114:GLU:HB3	5	0.76
(1,445)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:H	18	0.76

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2396)	1:A:226:ARG:HA	1:A:226:ARG:HD3	4	0.76
(1,2379)	1:A:223:LYS:H	1:A:223:LYS:HE3	16	0.76
(1,2337)	1:A:214:VAL:HA	1:A:216:LYS:HG3	17	0.76
(1,2296)	1:A:200:ARG:HG3	1:A:200:ARG:HD3	3	0.76
(1,2296)	1:A:200:ARG:HG3	1:A:200:ARG:HD3	17	0.76
(1,2293)	1:A:199:SER:HB3	1:A:202:PHE:HB3	19	0.76
(1,2215)	1:A:185:THR:HB	1:A:190:GLN:HG3	2	0.76
(1,2215)	1:A:185:THR:HB	1:A:190:GLN:HG3	14	0.76
(1,2204)	1:A:183:GLU:HG3	1:A:184:ARG:HG3	9	0.76
(1,2083)	1:A:163:ARG:H	1:A:163:ARG:HG3	17	0.76
(1,198)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:184:ARG:H	4	0.76
(1,198)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:184:ARG:H	17	0.76
(1,1883)	1:A:113:ALA:HB1	1:A:114:GLU:HG3	19	0.76
(1,1883)	1:A:113:ALA:HB2	1:A:114:GLU:HG3	19	0.76
(1,1883)	1:A:113:ALA:HB3	1:A:114:GLU:HG3	19	0.76
(1,1879)	1:A:110:ILE:HD11	1:A:115:MET:HG3	14	0.76
(1,1879)	1:A:110:ILE:HD12	1:A:115:MET:HG3	14	0.76
(1,1879)	1:A:110:ILE:HD13	1:A:115:MET:HG3	14	0.76
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG11	5	0.76
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG12	5	0.76
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG13	5	0.76
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG21	5	0.76
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG22	5	0.76
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG23	5	0.76
(1,1675)	1:A:80:LYS:H	1:A:80:LYS:HE3	10	0.76
(1,1526)	1:A:192:ILE:HA	1:A:193:ASN:HB3	18	0.76
(1,1360)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HG13	8	0.76
(1,1358)	1:A:231:ARG:HA	1:A:231:ARG:HD3	11	0.76
(1,1354)	1:A:182:ARG:HB3	1:A:182:ARG:HD3	8	0.76
(1,1350)	1:A:200:ARG:HB3	1:A:200:ARG:HD3	18	0.76
(1,1342)	1:A:215:TYR:HD1	1:A:216:LYS:HE3	18	0.76
(1,1342)	1:A:215:TYR:HD2	1:A:216:LYS:HE3	18	0.76
(1,1326)	1:A:107:LYS:HG3	1:A:107:LYS:HE3	5	0.76
(1,1326)	1:A:107:LYS:HG3	1:A:107:LYS:HE3	9	0.76
(1,1269)	1:A:208:ARG:HA	1:A:211:GLN:HG3	2	0.76
(1,1231)	1:A:111:ILE:HG21	1:A:114:GLU:HB3	18	0.76
(1,1231)	1:A:111:ILE:HG22	1:A:114:GLU:HB3	18	0.76
(1,1231)	1:A:111:ILE:HG23	1:A:114:GLU:HB3	18	0.76
(1,863)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG11	5	0.75
(1,863)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG12	5	0.75
(1,863)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG13	5	0.75
(1,753)	1:A:133:ALA:HB1	1:A:215:TYR:HB3	14	0.75

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,753)	1:A:133:ALA:HB2	1:A:215:TYR:HB3	14	0.75
(1,753)	1:A:133:ALA:HB3	1:A:215:TYR:HB3	14	0.75
(1,553)	1:A:218:GLN:HG3	1:A:221:ILE:HD11	5	0.75
(1,553)	1:A:218:GLN:HG3	1:A:221:ILE:HD12	5	0.75
(1,553)	1:A:218:GLN:HG3	1:A:221:ILE:HD13	5	0.75
(1,532)	1:A:171:ILE:HD11	1:A:193:ASN:HB3	8	0.75
(1,532)	1:A:171:ILE:HD12	1:A:193:ASN:HB3	8	0.75
(1,532)	1:A:171:ILE:HD13	1:A:193:ASN:HB3	8	0.75
(1,320)	1:A:144:LEU:H	1:A:145:ARG:HG3	8	0.75
(1,246)	1:A:87:GLU:HG3	1:A:88:ASP:H	19	0.75
(1,2389)	1:A:223:LYS:HE3	1:A:224:GLU:HB3	13	0.75
(1,2377)	1:A:222:TRP:HE1	1:A:226:ARG:HD3	12	0.75
(1,2349)	1:A:216:LYS:HB3	1:A:216:LYS:HE3	20	0.75
(1,2337)	1:A:214:VAL:HA	1:A:216:LYS:HG3	11	0.75
(1,2296)	1:A:200:ARG:HG3	1:A:200:ARG:HD3	12	0.75
(1,2215)	1:A:185:THR:HB	1:A:190:GLN:HG3	9	0.75
(1,2215)	1:A:185:THR:HB	1:A:190:GLN:HG3	16	0.75
(1,2214)	1:A:185:THR:HB	1:A:190:GLN:HB3	19	0.75
(1,2186)	1:A:180:LEU:HG	1:A:181:PRO:HD3	17	0.75
(1,2098)	1:A:166:LYS:HB3	1:A:166:LYS:HE3	1	0.75
(1,2079)	1:A:162:ASN:H	1:A:164:GLN:HG3	1	0.75
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD11	1:A:158:MET:HG3	11	0.75
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD12	1:A:158:MET:HG3	11	0.75
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD13	1:A:158:MET:HG3	11	0.75
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD21	1:A:158:MET:HG3	11	0.75
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD22	1:A:158:MET:HG3	11	0.75
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD23	1:A:158:MET:HG3	11	0.75
(1,1888)	1:A:115:MET:HG3	1:A:116:PRO:HD3	14	0.75
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD11	1:A:104:PHE:HB3	2	0.75
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD12	1:A:104:PHE:HB3	2	0.75
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD13	1:A:104:PHE:HB3	2	0.75
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD21	1:A:104:PHE:HB3	2	0.75
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD22	1:A:104:PHE:HB3	2	0.75
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD23	1:A:104:PHE:HB3	2	0.75
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD11	1:A:104:PHE:HB3	8	0.75
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD12	1:A:104:PHE:HB3	8	0.75
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD13	1:A:104:PHE:HB3	8	0.75
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD21	1:A:104:PHE:HB3	8	0.75
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD22	1:A:104:PHE:HB3	8	0.75
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD23	1:A:104:PHE:HB3	8	0.75
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:108:PRO:HG3	14	0.75
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:108:PRO:HG3	14	0.75

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:108:PRO:HG3	14	0.75
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:108:PRO:HG3	14	0.75
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:108:PRO:HG3	14	0.75
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:108:PRO:HG3	14	0.75
(1,1648)	1:A:76:GLU:HB3	1:A:76:GLU:HG3	2	0.75
(1,1619)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD1	12	0.75
(1,1619)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD2	12	0.75
(1,1619)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD1	20	0.75
(1,1619)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD2	20	0.75
(1,1595)	1:A:220:THR:HA	1:A:223:LYS:HD3	19	0.75
(1,1529)	1:A:80:LYS:HA	1:A:80:LYS:HD3	6	0.75
(1,1361)	1:A:204:THR:HG21	1:A:208:ARG:HD3	5	0.75
(1,1361)	1:A:204:THR:HG22	1:A:208:ARG:HD3	5	0.75
(1,1361)	1:A:204:THR:HG23	1:A:208:ARG:HD3	5	0.75
(1,1360)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HG13	4	0.75
(1,1360)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HG13	16	0.75
(1,1326)	1:A:107:LYS:HG3	1:A:107:LYS:HE3	6	0.75
(1,1325)	1:A:166:LYS:H	1:A:166:LYS:HE3	15	0.75
(1,84)	1:A:197:GLU:HB3	1:A:198:GLU:H	3	0.74
(1,753)	1:A:133:ALA:HB1	1:A:215:TYR:HB3	10	0.74
(1,753)	1:A:133:ALA:HB2	1:A:215:TYR:HB3	10	0.74
(1,753)	1:A:133:ALA:HB3	1:A:215:TYR:HB3	10	0.74
(1,2396)	1:A:226:ARG:HA	1:A:226:ARG:HD3	7	0.74
(1,2392)	1:A:224:GLU:HA	1:A:227:ASN:HB3	18	0.74
(1,2379)	1:A:223:LYS:H	1:A:223:LYS:HE3	13	0.74
(1,2296)	1:A:200:ARG:HG3	1:A:200:ARG:HD3	19	0.74
(1,2283)	1:A:197:GLU:HA	1:A:197:GLU:HG3	5	0.74
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD11	1:A:202:PHE:HB3	18	0.74
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD12	1:A:202:PHE:HB3	18	0.74
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD13	1:A:202:PHE:HB3	18	0.74
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD21	1:A:202:PHE:HB3	18	0.74
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD22	1:A:202:PHE:HB3	18	0.74
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD23	1:A:202:PHE:HB3	18	0.74
(1,2248)	1:A:194:ALA:HB1	1:A:196:GLU:HG3	5	0.74
(1,2248)	1:A:194:ALA:HB2	1:A:196:GLU:HG3	5	0.74
(1,2248)	1:A:194:ALA:HB3	1:A:196:GLU:HG3	5	0.74
(1,2215)	1:A:185:THR:HB	1:A:190:GLN:HG3	4	0.74
(1,2193)	1:A:180:LEU:HD11	1:A:184:ARG:HD3	12	0.74
(1,2193)	1:A:180:LEU:HD12	1:A:184:ARG:HD3	12	0.74
(1,2193)	1:A:180:LEU:HD13	1:A:184:ARG:HD3	12	0.74
(1,2193)	1:A:180:LEU:HD21	1:A:184:ARG:HD3	12	0.74
(1,2193)	1:A:180:LEU:HD22	1:A:184:ARG:HD3	12	0.74

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2193)	1:A:180:LEU:HD23	1:A:184:ARG:HD3	12	0.74
(1,2098)	1:A:166:LYS:HB3	1:A:166:LYS:HE3	16	0.74
(1,2000)	1:A:141:GLU:HG3	1:A:180:LEU:HB3	18	0.74
(1,198)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:184:ARG:H	16	0.74
(1,1677)	1:A:80:LYS:HA	1:A:80:LYS:HE3	20	0.74
(1,1501)	1:A:101:GLN:HA	1:A:107:LYS:HG3	4	0.74
(1,1358)	1:A:231:ARG:HA	1:A:231:ARG:HD3	15	0.74
(1,1354)	1:A:182:ARG:HB3	1:A:182:ARG:HD3	3	0.74
(1,135)	1:A:163:ARG:H	1:A:163:ARG:HD3	14	0.74
(1,1326)	1:A:107:LYS:HG3	1:A:107:LYS:HE3	8	0.74
(1,1326)	1:A:107:LYS:HG3	1:A:107:LYS:HE3	13	0.74
(1,750)	1:A:80:LYS:HB3	1:A:133:ALA:HB1	5	0.73
(1,750)	1:A:80:LYS:HB3	1:A:133:ALA:HB2	5	0.73
(1,750)	1:A:80:LYS:HB3	1:A:133:ALA:HB3	5	0.73
(1,750)	1:A:80:LYS:HB3	1:A:133:ALA:HB1	14	0.73
(1,750)	1:A:80:LYS:HB3	1:A:133:ALA:HB2	14	0.73
(1,750)	1:A:80:LYS:HB3	1:A:133:ALA:HB3	14	0.73
(1,43)	1:A:182:ARG:HB3	1:A:190:GLN:HE22	4	0.73
(1,2394)	1:A:224:GLU:HG3	1:A:225:THR:H	17	0.73
(1,2392)	1:A:224:GLU:HA	1:A:227:ASN:HB3	17	0.73
(1,2321)	1:A:208:ARG:HG3	1:A:211:GLN:HE22	3	0.73
(1,2212)	1:A:184:ARG:HG3	1:A:185:THR:H	1	0.73
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG11	16	0.73
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG12	16	0.73
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG13	16	0.73
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG21	16	0.73
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG22	16	0.73
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG23	16	0.73
(1,2101)	1:A:166:LYS:HG3	1:A:166:LYS:HE3	10	0.73
(1,2079)	1:A:162:ASN:H	1:A:164:GLN:HG3	18	0.73
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG11	9	0.73
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG12	9	0.73
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG13	9	0.73
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG21	9	0.73
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG22	9	0.73
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG23	9	0.73
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:108:PRO:HG3	15	0.73
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:108:PRO:HG3	15	0.73
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:108:PRO:HG3	15	0.73
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:108:PRO:HG3	15	0.73
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:108:PRO:HG3	15	0.73
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:108:PRO:HG3	15	0.73

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1501)	1:A:101:GLN:HA	1:A:107:LYS:HG3	13	0.73
(1,1326)	1:A:107:LYS:HG3	1:A:107:LYS:HE3	7	0.73
(1,1326)	1:A:107:LYS:HG3	1:A:107:LYS:HE3	14	0.73
(1,1303)	1:A:87:GLU:HG3	1:A:88:ASP:HA	6	0.73
(1,1276)	1:A:212:GLU:HG3	1:A:216:LYS:HD3	15	0.73
(1,1225)	1:A:223:LYS:HD3	1:A:226:ARG:HE	11	0.73
(1,1214)	1:A:166:LYS:H	1:A:166:LYS:HD3	7	0.73
(1,1210)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:221:ILE:HG21	7	0.73
(1,1210)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:221:ILE:HG22	7	0.73
(1,1210)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:221:ILE:HG23	7	0.73
(1,802)	1:A:113:ALA:HB1	1:A:114:GLU:HB3	5	0.72
(1,802)	1:A:113:ALA:HB2	1:A:114:GLU:HB3	5	0.72
(1,802)	1:A:113:ALA:HB3	1:A:114:GLU:HB3	5	0.72
(1,628)	1:A:111:ILE:HD11	1:A:114:GLU:HB3	13	0.72
(1,628)	1:A:111:ILE:HD12	1:A:114:GLU:HB3	13	0.72
(1,628)	1:A:111:ILE:HD13	1:A:114:GLU:HB3	13	0.72
(1,449)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:H	16	0.72
(1,445)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:H	10	0.72
(1,320)	1:A:144:LEU:H	1:A:145:ARG:HG3	9	0.72
(1,2415)	1:A:232:GLN:HG3	1:A:232:GLN:HE22	16	0.72
(1,2396)	1:A:226:ARG:HA	1:A:226:ARG:HD3	17	0.72
(1,2394)	1:A:224:GLU:HG3	1:A:225:THR:H	1	0.72
(1,2390)	1:A:224:GLU:H	1:A:224:GLU:HG3	7	0.72
(1,2387)	1:A:223:LYS:HG3	1:A:224:GLU:H	10	0.72
(1,2385)	1:A:223:LYS:HB3	1:A:226:ARG:HE	10	0.72
(1,2381)	1:A:223:LYS:HA	1:A:226:ARG:HB3	14	0.72
(1,2368)	1:A:219:GLN:HE21	1:A:223:LYS:HD3	14	0.72
(1,2368)	1:A:219:GLN:HE22	1:A:223:LYS:HD3	14	0.72
(1,2368)	1:A:219:GLN:HE21	1:A:223:LYS:HD3	20	0.72
(1,2368)	1:A:219:GLN:HE22	1:A:223:LYS:HD3	20	0.72
(1,2344)	1:A:215:TYR:HD1	1:A:216:LYS:HG3	10	0.72
(1,2344)	1:A:215:TYR:HD2	1:A:216:LYS:HG3	10	0.72
(1,2344)	1:A:215:TYR:HD1	1:A:216:LYS:HG3	11	0.72
(1,2344)	1:A:215:TYR:HD2	1:A:216:LYS:HG3	11	0.72
(1,2319)	1:A:207:GLU:H	1:A:208:ARG:HG3	7	0.72
(1,2293)	1:A:199:SER:HB3	1:A:202:PHE:HB3	17	0.72
(1,2280)	1:A:196:GLU:HG3	1:A:199:SER:HB3	15	0.72
(1,2214)	1:A:185:THR:HB	1:A:190:GLN:HB3	1	0.72
(1,2214)	1:A:185:THR:HB	1:A:190:GLN:HB3	3	0.72
(1,2214)	1:A:185:THR:HB	1:A:190:GLN:HB3	7	0.72
(1,2214)	1:A:185:THR:HB	1:A:190:GLN:HB3	17	0.72
(1,2214)	1:A:185:THR:HB	1:A:190:GLN:HB3	20	0.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1856)	1:A:101:GLN:HG3	1:A:109:GLY:H	15	0.72
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD11	1:A:104:PHE:HB3	6	0.72
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD12	1:A:104:PHE:HB3	6	0.72
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD13	1:A:104:PHE:HB3	6	0.72
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD21	1:A:104:PHE:HB3	6	0.72
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD22	1:A:104:PHE:HB3	6	0.72
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD23	1:A:104:PHE:HB3	6	0.72
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD11	1:A:104:PHE:HB3	11	0.72
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD12	1:A:104:PHE:HB3	11	0.72
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD13	1:A:104:PHE:HB3	11	0.72
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD21	1:A:104:PHE:HB3	11	0.72
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD22	1:A:104:PHE:HB3	11	0.72
(1,1826)	1:A:100:LEU:HD23	1:A:104:PHE:HB3	11	0.72
(1,1682)	1:A:80:LYS:HE3	1:A:81:PHE:HB3	6	0.72
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:108:PRO:HG3	10	0.72
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:108:PRO:HG3	10	0.72
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:108:PRO:HG3	10	0.72
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:108:PRO:HG3	10	0.72
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:108:PRO:HG3	10	0.72
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:108:PRO:HG3	10	0.72
(1,1501)	1:A:101:GLN:HA	1:A:107:LYS:HG3	1	0.72
(1,1351)	1:A:200:ARG:HA	1:A:200:ARG:HD3	5	0.72
(1,1351)	1:A:200:ARG:HA	1:A:200:ARG:HD3	7	0.72
(1,1326)	1:A:107:LYS:HG3	1:A:107:LYS:HE3	2	0.72
(1,1326)	1:A:107:LYS:HG3	1:A:107:LYS:HE3	11	0.72
(1,1326)	1:A:107:LYS:HG3	1:A:107:LYS:HE3	12	0.72
(1,1326)	1:A:107:LYS:HG3	1:A:107:LYS:HE3	16	0.72
(1,1326)	1:A:107:LYS:HG3	1:A:107:LYS:HE3	18	0.72
(1,1210)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:221:ILE:HG21	16	0.72
(1,1210)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:221:ILE:HG22	16	0.72
(1,1210)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:221:ILE:HG23	16	0.72
(1,856)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG21	2	0.71
(1,856)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG22	2	0.71
(1,856)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG23	2	0.71
(1,445)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:H	4	0.71
(1,43)	1:A:182:ARG:HB3	1:A:190:GLN:HE22	14	0.71
(1,2396)	1:A:226:ARG:HA	1:A:226:ARG:HD3	9	0.71
(1,2396)	1:A:226:ARG:HA	1:A:226:ARG:HD3	10	0.71
(1,2396)	1:A:226:ARG:HA	1:A:226:ARG:HD3	14	0.71
(1,2390)	1:A:224:GLU:H	1:A:224:GLU:HG3	11	0.71
(1,2390)	1:A:224:GLU:H	1:A:224:GLU:HG3	20	0.71
(1,2368)	1:A:219:GLN:HE21	1:A:223:LYS:HD3	6	0.71

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2368)	1:A:219:GLN:HE22	1:A:223:LYS:HD3	6	0.71
(1,2368)	1:A:219:GLN:HE21	1:A:223:LYS:HD3	10	0.71
(1,2368)	1:A:219:GLN:HE22	1:A:223:LYS:HD3	10	0.71
(1,2344)	1:A:215:TYR:HD1	1:A:216:LYS:HG3	7	0.71
(1,2344)	1:A:215:TYR:HD2	1:A:216:LYS:HG3	7	0.71
(1,2344)	1:A:215:TYR:HD1	1:A:216:LYS:HG3	17	0.71
(1,2344)	1:A:215:TYR:HD2	1:A:216:LYS:HG3	17	0.71
(1,2321)	1:A:208:ARG:HG3	1:A:211:GLN:HE22	9	0.71
(1,2321)	1:A:208:ARG:HG3	1:A:211:GLN:HE22	18	0.71
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD11	1:A:202:PHE:HB3	13	0.71
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD12	1:A:202:PHE:HB3	13	0.71
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD13	1:A:202:PHE:HB3	13	0.71
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD21	1:A:202:PHE:HB3	13	0.71
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD22	1:A:202:PHE:HB3	13	0.71
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD23	1:A:202:PHE:HB3	13	0.71
(1,2236)	1:A:190:GLN:H	1:A:190:GLN:HG3	1	0.71
(1,2215)	1:A:185:THR:HB	1:A:190:GLN:HG3	18	0.71
(1,2214)	1:A:185:THR:HB	1:A:190:GLN:HB3	10	0.71
(1,2214)	1:A:185:THR:HB	1:A:190:GLN:HB3	13	0.71
(1,2203)	1:A:183:GLU:HG3	1:A:184:ARG:H	19	0.71
(1,2186)	1:A:180:LEU:HG	1:A:181:PRO:HD3	9	0.71
(1,1894)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:121:HIS:HE1	5	0.71
(1,1894)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:121:HIS:HE1	8	0.71
(1,1857)	1:A:102:ASP:H	1:A:102:ASP:HB3	2	0.71
(1,1856)	1:A:101:GLN:HG3	1:A:109:GLY:H	6	0.71
(1,1856)	1:A:101:GLN:HG3	1:A:109:GLY:H	12	0.71
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG11	1:A:112:PHE:HB3	20	0.71
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG12	1:A:112:PHE:HB3	20	0.71
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG13	1:A:112:PHE:HB3	20	0.71
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG21	1:A:112:PHE:HB3	20	0.71
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG22	1:A:112:PHE:HB3	20	0.71
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG23	1:A:112:PHE:HB3	20	0.71
(1,1501)	1:A:101:GLN:HA	1:A:107:LYS:HG3	11	0.71
(1,1326)	1:A:107:LYS:HG3	1:A:107:LYS:HE3	1	0.71
(1,1215)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:167:TYR:H	1	0.71
(1,84)	1:A:197:GLU:HB3	1:A:198:GLU:H	13	0.7
(1,445)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:H	2	0.7
(1,320)	1:A:144:LEU:H	1:A:145:ARG:HG3	5	0.7
(1,2396)	1:A:226:ARG:HA	1:A:226:ARG:HD3	2	0.7
(1,2396)	1:A:226:ARG:HA	1:A:226:ARG:HD3	8	0.7
(1,2396)	1:A:226:ARG:HA	1:A:226:ARG:HD3	16	0.7
(1,2389)	1:A:223:LYS:HE3	1:A:224:GLU:HB3	6	0.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2387)	1:A:223:LYS:HG3	1:A:224:GLU:H	6	0.7
(1,2384)	1:A:223:LYS:HB3	1:A:224:GLU:HG3	9	0.7
(1,2373)	1:A:220:THR:HG21	1:A:224:GLU:HG3	6	0.7
(1,2373)	1:A:220:THR:HG22	1:A:224:GLU:HG3	6	0.7
(1,2373)	1:A:220:THR:HG23	1:A:224:GLU:HG3	6	0.7
(1,2293)	1:A:199:SER:HB3	1:A:202:PHE:HB3	15	0.7
(1,2212)	1:A:184:ARG:HG3	1:A:185:THR:H	9	0.7
(1,2212)	1:A:184:ARG:HG3	1:A:185:THR:H	18	0.7
(1,2186)	1:A:180:LEU:HG	1:A:181:PRO:HD3	4	0.7
(1,2158)	1:A:176:LEU:HB3	1:A:197:GLU:HG3	17	0.7
(1,2143)	1:A:173:MET:HE1	1:A:202:PHE:HB3	15	0.7
(1,2143)	1:A:173:MET:HE2	1:A:202:PHE:HB3	15	0.7
(1,2143)	1:A:173:MET:HE3	1:A:202:PHE:HB3	15	0.7
(1,2139)	1:A:172:PRO:HD3	1:A:194:ALA:HB1	17	0.7
(1,2139)	1:A:172:PRO:HD3	1:A:194:ALA:HB2	17	0.7
(1,2139)	1:A:172:PRO:HD3	1:A:194:ALA:HB3	17	0.7
(1,2086)	1:A:163:ARG:HG3	1:A:164:GLN:H	6	0.7
(1,1936)	1:A:134:TRP:HE1	1:A:169:SER:HB3	6	0.7
(1,1936)	1:A:134:TRP:HE1	1:A:169:SER:HB3	9	0.7
(1,1914)	1:A:125:LEU:HD11	1:A:157:LEU:HB3	11	0.7
(1,1914)	1:A:125:LEU:HD12	1:A:157:LEU:HB3	11	0.7
(1,1914)	1:A:125:LEU:HD13	1:A:157:LEU:HB3	11	0.7
(1,1914)	1:A:125:LEU:HD21	1:A:157:LEU:HB3	11	0.7
(1,1914)	1:A:125:LEU:HD22	1:A:157:LEU:HB3	11	0.7
(1,1914)	1:A:125:LEU:HD23	1:A:157:LEU:HB3	11	0.7
(1,1856)	1:A:101:GLN:HG3	1:A:109:GLY:H	11	0.7
(1,179)	1:A:95:ARG:HD3	1:A:98:ASN:H	5	0.7
(1,1644)	1:A:76:GLU:H	1:A:76:GLU:HB3	15	0.7
(1,1603)	1:A:146:ASP:HB3	1:A:147:THR:HB	5	0.7
(1,1535)	1:A:77:VAL:HA	1:A:78:PHE:HB3	18	0.7
(1,1529)	1:A:80:LYS:HA	1:A:80:LYS:HD3	16	0.7
(1,1501)	1:A:101:GLN:HA	1:A:107:LYS:HG3	2	0.7
(1,1501)	1:A:101:GLN:HA	1:A:107:LYS:HG3	5	0.7
(1,1363)	1:A:205:GLN:HA	1:A:208:ARG:HD3	6	0.7
(1,1219)	1:A:215:TYR:HD1	1:A:216:LYS:HD3	12	0.7
(1,1219)	1:A:215:TYR:HD2	1:A:216:LYS:HD3	12	0.7
(1,628)	1:A:111:ILE:HD11	1:A:114:GLU:HB3	4	0.69
(1,628)	1:A:111:ILE:HD12	1:A:114:GLU:HB3	4	0.69
(1,628)	1:A:111:ILE:HD13	1:A:114:GLU:HB3	4	0.69
(1,449)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:H	13	0.69
(1,2394)	1:A:224:GLU:HG3	1:A:225:THR:H	20	0.69
(1,2393)	1:A:224:GLU:HB3	1:A:224:GLU:HG3	4	0.69

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2392)	1:A:224:GLU:HA	1:A:227:ASN:HB3	7	0.69
(1,2386)	1:A:223:LYS:HG3	1:A:223:LYS:HE3	12	0.69
(1,2386)	1:A:223:LYS:HG3	1:A:223:LYS:HE3	14	0.69
(1,2381)	1:A:223:LYS:HA	1:A:226:ARG:HB3	16	0.69
(1,2350)	1:A:216:LYS:HB3	1:A:217:THR:H	3	0.69
(1,2321)	1:A:208:ARG:HG3	1:A:211:GLN:HE22	8	0.69
(1,2203)	1:A:183:GLU:HG3	1:A:184:ARG:H	8	0.69
(1,2186)	1:A:180:LEU:HG	1:A:181:PRO:HD3	2	0.69
(1,2086)	1:A:163:ARG:HG3	1:A:164:GLN:H	17	0.69
(1,2083)	1:A:163:ARG:H	1:A:163:ARG:HG3	6	0.69
(1,2041)	1:A:156:SER:H	1:A:157:LEU:HB3	15	0.69
(1,1936)	1:A:134:TRP:HE1	1:A:169:SER:HB3	10	0.69
(1,1936)	1:A:134:TRP:HE1	1:A:169:SER:HB3	17	0.69
(1,1890)	1:A:117:HIS:HE1	1:A:122:LEU:HB3	16	0.69
(1,1856)	1:A:101:GLN:HG3	1:A:109:GLY:H	1	0.69
(1,1856)	1:A:101:GLN:HG3	1:A:109:GLY:H	2	0.69
(1,1856)	1:A:101:GLN:HG3	1:A:109:GLY:H	3	0.69
(1,1856)	1:A:101:GLN:HG3	1:A:109:GLY:H	4	0.69
(1,1856)	1:A:101:GLN:HG3	1:A:109:GLY:H	5	0.69
(1,1856)	1:A:101:GLN:HG3	1:A:109:GLY:H	16	0.69
(1,1855)	1:A:101:GLN:HG3	1:A:102:ASP:H	10	0.69
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG11	15	0.69
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG12	15	0.69
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG13	15	0.69
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG21	15	0.69
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG22	15	0.69
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG23	15	0.69
(1,1501)	1:A:101:GLN:HA	1:A:107:LYS:HG3	6	0.69
(1,1501)	1:A:101:GLN:HA	1:A:107:LYS:HG3	18	0.69
(1,1361)	1:A:204:THR:HG21	1:A:208:ARG:HD3	20	0.69
(1,1361)	1:A:204:THR:HG22	1:A:208:ARG:HD3	20	0.69
(1,1361)	1:A:204:THR:HG23	1:A:208:ARG:HD3	20	0.69
(1,135)	1:A:163:ARG:H	1:A:163:ARG:HD3	8	0.69
(1,1333)	1:A:107:LYS:H	1:A:107:LYS:HE3	13	0.69
(1,1325)	1:A:166:LYS:H	1:A:166:LYS:HE3	6	0.69
(1,750)	1:A:80:LYS:HB3	1:A:133:ALA:HB1	9	0.68
(1,750)	1:A:80:LYS:HB3	1:A:133:ALA:HB2	9	0.68
(1,750)	1:A:80:LYS:HB3	1:A:133:ALA:HB3	9	0.68
(1,628)	1:A:111:ILE:HD11	1:A:114:GLU:HB3	18	0.68
(1,628)	1:A:111:ILE:HD12	1:A:114:GLU:HB3	18	0.68
(1,628)	1:A:111:ILE:HD13	1:A:114:GLU:HB3	18	0.68
(1,553)	1:A:218:GLN:HG3	1:A:221:ILE:HD11	2	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,553)	1:A:218:GLN:HG3	1:A:221:ILE:HD12	2	0.68
(1,553)	1:A:218:GLN:HG3	1:A:221:ILE:HD13	2	0.68
(1,532)	1:A:171:ILE:HD11	1:A:193:ASN:HB3	6	0.68
(1,532)	1:A:171:ILE:HD12	1:A:193:ASN:HB3	6	0.68
(1,532)	1:A:171:ILE:HD13	1:A:193:ASN:HB3	6	0.68
(1,2393)	1:A:224:GLU:HB3	1:A:224:GLU:HG3	2	0.68
(1,2393)	1:A:224:GLU:HB3	1:A:224:GLU:HG3	18	0.68
(1,2393)	1:A:224:GLU:HB3	1:A:224:GLU:HG3	19	0.68
(1,2386)	1:A:223:LYS:HG3	1:A:223:LYS:HE3	1	0.68
(1,2386)	1:A:223:LYS:HG3	1:A:223:LYS:HE3	9	0.68
(1,2368)	1:A:219:GLN:HE21	1:A:223:LYS:HD3	9	0.68
(1,2368)	1:A:219:GLN:HE22	1:A:223:LYS:HD3	9	0.68
(1,2349)	1:A:216:LYS:HB3	1:A:216:LYS:HE3	12	0.68
(1,2337)	1:A:214:VAL:HA	1:A:216:LYS:HG3	6	0.68
(1,2279)	1:A:196:GLU:HG3	1:A:197:GLU:H	5	0.68
(1,2225)	1:A:187:PHE:HB3	1:A:188:ALA:HB1	13	0.68
(1,2225)	1:A:187:PHE:HB3	1:A:188:ALA:HB2	13	0.68
(1,2225)	1:A:187:PHE:HB3	1:A:188:ALA:HB3	13	0.68
(1,2225)	1:A:187:PHE:HB3	1:A:188:ALA:HB1	17	0.68
(1,2225)	1:A:187:PHE:HB3	1:A:188:ALA:HB2	17	0.68
(1,2225)	1:A:187:PHE:HB3	1:A:188:ALA:HB3	17	0.68
(1,2204)	1:A:183:GLU:HG3	1:A:184:ARG:HG3	13	0.68
(1,2186)	1:A:180:LEU:HG	1:A:181:PRO:HD3	6	0.68
(1,2186)	1:A:180:LEU:HG	1:A:181:PRO:HD3	11	0.68
(1,2186)	1:A:180:LEU:HG	1:A:181:PRO:HD3	16	0.68
(1,2186)	1:A:180:LEU:HG	1:A:181:PRO:HD3	19	0.68
(1,2158)	1:A:176:LEU:HB3	1:A:197:GLU:HG3	19	0.68
(1,2139)	1:A:172:PRO:HD3	1:A:194:ALA:HB1	12	0.68
(1,2139)	1:A:172:PRO:HD3	1:A:194:ALA:HB2	12	0.68
(1,2139)	1:A:172:PRO:HD3	1:A:194:ALA:HB3	12	0.68
(1,2139)	1:A:172:PRO:HD3	1:A:194:ALA:HB1	13	0.68
(1,2139)	1:A:172:PRO:HD3	1:A:194:ALA:HB2	13	0.68
(1,2139)	1:A:172:PRO:HD3	1:A:194:ALA:HB3	13	0.68
(1,2108)	1:A:167:TYR:HB3	1:A:221:ILE:HD11	6	0.68
(1,2108)	1:A:167:TYR:HB3	1:A:221:ILE:HD12	6	0.68
(1,2108)	1:A:167:TYR:HB3	1:A:221:ILE:HD13	6	0.68
(1,2085)	1:A:163:ARG:HB3	1:A:163:ARG:HD3	17	0.68
(1,2041)	1:A:156:SER:H	1:A:157:LEU:HB3	8	0.68
(1,1993)	1:A:141:GLU:H	1:A:180:LEU:HB3	17	0.68
(1,1936)	1:A:134:TRP:HE1	1:A:169:SER:HB3	16	0.68
(1,1885)	1:A:114:GLU:HG3	1:A:115:MET:H	4	0.68
(1,1650)	1:A:76:GLU:HB3	1:A:222:TRP:HZ2	8	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1650)	1:A:76:GLU:HB3	1:A:222:TRP:HZ2	14	0.68
(1,1648)	1:A:76:GLU:HB3	1:A:76:GLU:HG3	20	0.68
(1,1566)	1:A:71:PRO:HG3	1:A:74:SER:HB3	4	0.68
(1,1521)	1:A:182:ARG:HA	1:A:182:ARG:HD3	11	0.68
(1,1501)	1:A:101:GLN:HA	1:A:107:LYS:HG3	7	0.68
(1,1350)	1:A:200:ARG:HB3	1:A:200:ARG:HD3	17	0.68
(1,1326)	1:A:107:LYS:HG3	1:A:107:LYS:HE3	4	0.68
(1,1321)	1:A:166:LYS:HE3	1:A:221:ILE:HG21	14	0.68
(1,1321)	1:A:166:LYS:HE3	1:A:221:ILE:HG22	14	0.68
(1,1321)	1:A:166:LYS:HE3	1:A:221:ILE:HG23	14	0.68
(1,1226)	1:A:223:LYS:HD3	1:A:224:GLU:H	20	0.68
(1,1218)	1:A:213:SER:HA	1:A:216:LYS:HD3	1	0.68
(1,84)	1:A:197:GLU:HB3	1:A:198:GLU:H	1	0.67
(1,753)	1:A:133:ALA:HB1	1:A:215:TYR:HB3	9	0.67
(1,753)	1:A:133:ALA:HB2	1:A:215:TYR:HB3	9	0.67
(1,753)	1:A:133:ALA:HB3	1:A:215:TYR:HB3	9	0.67
(1,2396)	1:A:226:ARG:HA	1:A:226:ARG:HD3	19	0.67
(1,2393)	1:A:224:GLU:HB3	1:A:224:GLU:HG3	10	0.67
(1,2379)	1:A:223:LYS:H	1:A:223:LYS:HE3	7	0.67
(1,2352)	1:A:216:LYS:HG3	1:A:217:THR:H	13	0.67
(1,2329)	1:A:212:GLU:HG3	1:A:216:LYS:HG3	6	0.67
(1,2321)	1:A:208:ARG:HG3	1:A:211:GLN:HE22	4	0.67
(1,2290)	1:A:198:GLU:HB3	1:A:198:GLU:HG3	11	0.67
(1,2225)	1:A:187:PHE:HB3	1:A:188:ALA:HB1	2	0.67
(1,2225)	1:A:187:PHE:HB3	1:A:188:ALA:HB2	2	0.67
(1,2225)	1:A:187:PHE:HB3	1:A:188:ALA:HB3	2	0.67
(1,2212)	1:A:184:ARG:HG3	1:A:185:THR:H	7	0.67
(1,2212)	1:A:184:ARG:HG3	1:A:185:THR:H	11	0.67
(1,2186)	1:A:180:LEU:HG	1:A:181:PRO:HD3	3	0.67
(1,2186)	1:A:180:LEU:HG	1:A:181:PRO:HD3	7	0.67
(1,2186)	1:A:180:LEU:HG	1:A:181:PRO:HD3	8	0.67
(1,2186)	1:A:180:LEU:HG	1:A:181:PRO:HD3	13	0.67
(1,2186)	1:A:180:LEU:HG	1:A:181:PRO:HD3	20	0.67
(1,2139)	1:A:172:PRO:HD3	1:A:194:ALA:HB1	5	0.67
(1,2139)	1:A:172:PRO:HD3	1:A:194:ALA:HB2	5	0.67
(1,2139)	1:A:172:PRO:HD3	1:A:194:ALA:HB3	5	0.67
(1,2139)	1:A:172:PRO:HD3	1:A:194:ALA:HB1	15	0.67
(1,2139)	1:A:172:PRO:HD3	1:A:194:ALA:HB2	15	0.67
(1,2139)	1:A:172:PRO:HD3	1:A:194:ALA:HB3	15	0.67
(1,2123)	1:A:171:ILE:HG21	1:A:172:PRO:HD3	3	0.67
(1,2123)	1:A:171:ILE:HG22	1:A:172:PRO:HD3	3	0.67
(1,2123)	1:A:171:ILE:HG23	1:A:172:PRO:HD3	3	0.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2101)	1:A:166:LYS:HG3	1:A:166:LYS:HE3	9	0.67
(1,2083)	1:A:163:ARG:H	1:A:163:ARG:HG3	14	0.67
(1,1936)	1:A:134:TRP:HE1	1:A:169:SER:HB3	11	0.67
(1,1936)	1:A:134:TRP:HE1	1:A:169:SER:HB3	14	0.67
(1,1856)	1:A:101:GLN:HG3	1:A:109:GLY:H	18	0.67
(1,1750)	1:A:91:ASP:H	1:A:91:ASP:HB3	14	0.67
(1,1721)	1:A:84:LEU:HD11	1:A:112:PHE:HB3	15	0.67
(1,1721)	1:A:84:LEU:HD12	1:A:112:PHE:HB3	15	0.67
(1,1721)	1:A:84:LEU:HD13	1:A:112:PHE:HB3	15	0.67
(1,1721)	1:A:84:LEU:HD21	1:A:112:PHE:HB3	15	0.67
(1,1721)	1:A:84:LEU:HD22	1:A:112:PHE:HB3	15	0.67
(1,1721)	1:A:84:LEU:HD23	1:A:112:PHE:HB3	15	0.67
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG11	4	0.67
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG12	4	0.67
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG13	4	0.67
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG21	4	0.67
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG22	4	0.67
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG23	4	0.67
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG11	6	0.67
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG12	6	0.67
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG13	6	0.67
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG21	6	0.67
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG22	6	0.67
(1,1685)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:82:VAL:HG23	6	0.67
(1,1650)	1:A:76:GLU:HB3	1:A:222:TRP:HZ2	5	0.67
(1,1650)	1:A:76:GLU:HB3	1:A:222:TRP:HZ2	6	0.67
(1,1650)	1:A:76:GLU:HB3	1:A:222:TRP:HZ2	7	0.67
(1,1650)	1:A:76:GLU:HB3	1:A:222:TRP:HZ2	18	0.67
(1,1650)	1:A:76:GLU:HB3	1:A:222:TRP:HZ2	19	0.67
(1,1634)	1:A:71:PRO:HB3	1:A:74:SER:HA	2	0.67
(1,1634)	1:A:71:PRO:HB3	1:A:74:SER:HA	18	0.67
(1,1529)	1:A:80:LYS:HA	1:A:80:LYS:HD3	11	0.67
(1,1392)	1:A:107:LYS:HA	1:A:107:LYS:HE3	19	0.67
(1,1334)	1:A:102:ASP:H	1:A:107:LYS:HE3	20	0.67
(1,567)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:209:ILE:HD11	6	0.66
(1,567)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:209:ILE:HD12	6	0.66
(1,567)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:209:ILE:HD13	6	0.66
(1,445)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:H	1	0.66
(1,2396)	1:A:226:ARG:HA	1:A:226:ARG:HD3	3	0.66
(1,2394)	1:A:224:GLU:HG3	1:A:225:THR:H	15	0.66
(1,2384)	1:A:223:LYS:HB3	1:A:224:GLU:HG3	8	0.66
(1,2368)	1:A:219:GLN:HE21	1:A:223:LYS:HD3	1	0.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2368)	1:A:219:GLN:HE22	1:A:223:LYS:HD3	1	0.66
(1,2352)	1:A:216:LYS:HG3	1:A:217:THR:H	4	0.66
(1,2321)	1:A:208:ARG:HG3	1:A:211:GLN:HE22	14	0.66
(1,2290)	1:A:198:GLU:HB3	1:A:198:GLU:HG3	6	0.66
(1,2290)	1:A:198:GLU:HB3	1:A:198:GLU:HG3	8	0.66
(1,2290)	1:A:198:GLU:HB3	1:A:198:GLU:HG3	12	0.66
(1,2280)	1:A:196:GLU:HG3	1:A:199:SER:HB3	8	0.66
(1,2277)	1:A:196:GLU:HB3	1:A:196:GLU:HG3	3	0.66
(1,2277)	1:A:196:GLU:HB3	1:A:196:GLU:HG3	13	0.66
(1,2277)	1:A:196:GLU:HB3	1:A:196:GLU:HG3	14	0.66
(1,2277)	1:A:196:GLU:HB3	1:A:196:GLU:HG3	15	0.66
(1,2277)	1:A:196:GLU:HB3	1:A:196:GLU:HG3	19	0.66
(1,2212)	1:A:184:ARG:HG3	1:A:185:THR:H	4	0.66
(1,2212)	1:A:184:ARG:HG3	1:A:185:THR:H	16	0.66
(1,2186)	1:A:180:LEU:HG	1:A:181:PRO:HD3	1	0.66
(1,2186)	1:A:180:LEU:HG	1:A:181:PRO:HD3	10	0.66
(1,2186)	1:A:180:LEU:HG	1:A:181:PRO:HD3	12	0.66
(1,2186)	1:A:180:LEU:HG	1:A:181:PRO:HD3	15	0.66
(1,2139)	1:A:172:PRO:HD3	1:A:194:ALA:HB1	6	0.66
(1,2139)	1:A:172:PRO:HD3	1:A:194:ALA:HB2	6	0.66
(1,2139)	1:A:172:PRO:HD3	1:A:194:ALA:HB3	6	0.66
(1,2123)	1:A:171:ILE:HG21	1:A:172:PRO:HD3	1	0.66
(1,2123)	1:A:171:ILE:HG22	1:A:172:PRO:HD3	1	0.66
(1,2123)	1:A:171:ILE:HG23	1:A:172:PRO:HD3	1	0.66
(1,2101)	1:A:166:LYS:HG3	1:A:166:LYS:HE3	11	0.66
(1,2086)	1:A:163:ARG:HG3	1:A:164:GLN:H	1	0.66
(1,2085)	1:A:163:ARG:HB3	1:A:163:ARG:HD3	16	0.66
(1,2057)	1:A:159:ASN:HA	1:A:162:ASN:HB3	4	0.66
(1,2037)	1:A:152:GLN:HG3	1:A:153:PHE:H	13	0.66
(1,198)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:184:ARG:H	2	0.66
(1,1856)	1:A:101:GLN:HG3	1:A:109:GLY:H	14	0.66
(1,1750)	1:A:91:ASP:H	1:A:91:ASP:HB3	1	0.66
(1,1750)	1:A:91:ASP:H	1:A:91:ASP:HB3	2	0.66
(1,1750)	1:A:91:ASP:H	1:A:91:ASP:HB3	7	0.66
(1,1721)	1:A:84:LEU:HD11	1:A:112:PHE:HB3	12	0.66
(1,1721)	1:A:84:LEU:HD12	1:A:112:PHE:HB3	12	0.66
(1,1721)	1:A:84:LEU:HD13	1:A:112:PHE:HB3	12	0.66
(1,1721)	1:A:84:LEU:HD21	1:A:112:PHE:HB3	12	0.66
(1,1721)	1:A:84:LEU:HD22	1:A:112:PHE:HB3	12	0.66
(1,1721)	1:A:84:LEU:HD23	1:A:112:PHE:HB3	12	0.66
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:108:PRO:HG3	12	0.66
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:108:PRO:HG3	12	0.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:108:PRO:HG3	12	0.66
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:108:PRO:HG3	12	0.66
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:108:PRO:HG3	12	0.66
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:108:PRO:HG3	12	0.66
(1,1650)	1:A:76:GLU:HB3	1:A:222:TRP:HZ2	3	0.66
(1,1650)	1:A:76:GLU:HB3	1:A:222:TRP:HZ2	17	0.66
(1,1529)	1:A:80:LYS:HA	1:A:80:LYS:HD3	10	0.66
(1,1361)	1:A:204:THR:HG21	1:A:208:ARG:HD3	3	0.66
(1,1361)	1:A:204:THR:HG22	1:A:208:ARG:HD3	3	0.66
(1,1361)	1:A:204:THR:HG23	1:A:208:ARG:HD3	3	0.66
(1,1350)	1:A:200:ARG:HB3	1:A:200:ARG:HD3	1	0.66
(1,1210)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:221:ILE:HG21	6	0.66
(1,1210)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:221:ILE:HG22	6	0.66
(1,1210)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:221:ILE:HG23	6	0.66
(1,856)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG21	1	0.65
(1,856)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG22	1	0.65
(1,856)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG23	1	0.65
(1,628)	1:A:111:ILE:HD11	1:A:114:GLU:HB3	10	0.65
(1,628)	1:A:111:ILE:HD12	1:A:114:GLU:HB3	10	0.65
(1,628)	1:A:111:ILE:HD13	1:A:114:GLU:HB3	10	0.65
(1,56)	1:A:203:PRO:HG3	1:A:204:THR:H	12	0.65
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG11	1:A:230:GLN:HG3	12	0.65
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG12	1:A:230:GLN:HG3	12	0.65
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG13	1:A:230:GLN:HG3	12	0.65
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG21	1:A:230:GLN:HG3	12	0.65
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG22	1:A:230:GLN:HG3	12	0.65
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG23	1:A:230:GLN:HG3	12	0.65
(1,2396)	1:A:226:ARG:HA	1:A:226:ARG:HD3	1	0.65
(1,2344)	1:A:215:TYR:HD1	1:A:216:LYS:HG3	6	0.65
(1,2344)	1:A:215:TYR:HD2	1:A:216:LYS:HG3	6	0.65
(1,2331)	1:A:212:GLU:HG3	1:A:216:LYS:HE3	6	0.65
(1,2329)	1:A:212:GLU:HG3	1:A:216:LYS:HG3	10	0.65
(1,2295)	1:A:200:ARG:HB3	1:A:200:ARG:HG3	4	0.65
(1,2290)	1:A:198:GLU:HB3	1:A:198:GLU:HG3	17	0.65
(1,2290)	1:A:198:GLU:HB3	1:A:198:GLU:HG3	20	0.65
(1,2277)	1:A:196:GLU:HB3	1:A:196:GLU:HG3	1	0.65
(1,2277)	1:A:196:GLU:HB3	1:A:196:GLU:HG3	4	0.65
(1,2277)	1:A:196:GLU:HB3	1:A:196:GLU:HG3	6	0.65
(1,2277)	1:A:196:GLU:HB3	1:A:196:GLU:HG3	8	0.65
(1,2277)	1:A:196:GLU:HB3	1:A:196:GLU:HG3	10	0.65
(1,2277)	1:A:196:GLU:HB3	1:A:196:GLU:HG3	11	0.65
(1,2277)	1:A:196:GLU:HB3	1:A:196:GLU:HG3	12	0.65

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2277)	1:A:196:GLU:HB3	1:A:196:GLU:HG3	17	0.65
(1,2225)	1:A:187:PHE:HB3	1:A:188:ALA:HB1	14	0.65
(1,2225)	1:A:187:PHE:HB3	1:A:188:ALA:HB2	14	0.65
(1,2225)	1:A:187:PHE:HB3	1:A:188:ALA:HB3	14	0.65
(1,2212)	1:A:184:ARG:HG3	1:A:185:THR:H	5	0.65
(1,2212)	1:A:184:ARG:HG3	1:A:185:THR:H	14	0.65
(1,2105)	1:A:167:TYR:H	1:A:221:ILE:HG13	5	0.65
(1,2101)	1:A:166:LYS:HG3	1:A:166:LYS:HE3	7	0.65
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:108:PRO:HG3	8	0.65
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:108:PRO:HG3	8	0.65
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:108:PRO:HG3	8	0.65
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:108:PRO:HG3	8	0.65
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:108:PRO:HG3	8	0.65
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:108:PRO:HG3	8	0.65
(1,1655)	1:A:76:GLU:HG3	1:A:222:TRP:HH2	20	0.65
(1,1650)	1:A:76:GLU:HB3	1:A:222:TRP:HZ2	12	0.65
(1,1635)	1:A:71:PRO:HB3	1:A:74:SER:HB3	2	0.65
(1,1521)	1:A:182:ARG:HA	1:A:182:ARG:HD3	7	0.65
(1,1501)	1:A:101:GLN:HA	1:A:107:LYS:HG3	10	0.65
(1,1372)	1:A:163:ARG:HD3	1:A:164:GLN:H	1	0.65
(1,1358)	1:A:231:ARG:HA	1:A:231:ARG:HD3	12	0.65
(1,1354)	1:A:182:ARG:HB3	1:A:182:ARG:HD3	18	0.65
(1,135)	1:A:163:ARG:H	1:A:163:ARG:HD3	18	0.65
(1,1312)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:H	6	0.65
(1,1226)	1:A:223:LYS:HD3	1:A:224:GLU:H	6	0.65
(1,103)	1:A:197:GLU:HB3	1:A:199:SER:H	18	0.65
(1,753)	1:A:133:ALA:HB1	1:A:215:TYR:HB3	5	0.64
(1,753)	1:A:133:ALA:HB2	1:A:215:TYR:HB3	5	0.64
(1,753)	1:A:133:ALA:HB3	1:A:215:TYR:HB3	5	0.64
(1,628)	1:A:111:ILE:HD11	1:A:114:GLU:HB3	17	0.64
(1,628)	1:A:111:ILE:HD12	1:A:114:GLU:HB3	17	0.64
(1,628)	1:A:111:ILE:HD13	1:A:114:GLU:HB3	17	0.64
(1,628)	1:A:111:ILE:HD11	1:A:114:GLU:HB3	19	0.64
(1,628)	1:A:111:ILE:HD12	1:A:114:GLU:HB3	19	0.64
(1,628)	1:A:111:ILE:HD13	1:A:114:GLU:HB3	19	0.64
(1,553)	1:A:218:GLN:HG3	1:A:221:ILE:HD11	16	0.64
(1,553)	1:A:218:GLN:HG3	1:A:221:ILE:HD12	16	0.64
(1,553)	1:A:218:GLN:HG3	1:A:221:ILE:HD13	16	0.64
(1,445)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:H	5	0.64
(1,445)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:H	11	0.64
(1,387)	1:A:80:LYS:HD3	1:A:107:LYS:H	9	0.64
(1,246)	1:A:87:GLU:HG3	1:A:88:ASP:H	12	0.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2394)	1:A:224:GLU:HG3	1:A:225:THR:H	7	0.64
(1,2393)	1:A:224:GLU:HB3	1:A:224:GLU:HG3	16	0.64
(1,2385)	1:A:223:LYS:HB3	1:A:226:ARG:HE	20	0.64
(1,2381)	1:A:223:LYS:HA	1:A:226:ARG:HB3	13	0.64
(1,2352)	1:A:216:LYS:HG3	1:A:217:THR:H	15	0.64
(1,2344)	1:A:215:TYR:HD1	1:A:216:LYS:HG3	18	0.64
(1,2344)	1:A:215:TYR:HD2	1:A:216:LYS:HG3	18	0.64
(1,2330)	1:A:212:GLU:HG3	1:A:216:LYS:HD3	16	0.64
(1,2295)	1:A:200:ARG:HB3	1:A:200:ARG:HG3	1	0.64
(1,2295)	1:A:200:ARG:HB3	1:A:200:ARG:HG3	5	0.64
(1,2295)	1:A:200:ARG:HB3	1:A:200:ARG:HG3	8	0.64
(1,2290)	1:A:198:GLU:HB3	1:A:198:GLU:HG3	15	0.64
(1,2277)	1:A:196:GLU:HB3	1:A:196:GLU:HG3	2	0.64
(1,2277)	1:A:196:GLU:HB3	1:A:196:GLU:HG3	7	0.64
(1,2277)	1:A:196:GLU:HB3	1:A:196:GLU:HG3	16	0.64
(1,2277)	1:A:196:GLU:HB3	1:A:196:GLU:HG3	20	0.64
(1,2225)	1:A:187:PHE:HB3	1:A:188:ALA:HB1	1	0.64
(1,2225)	1:A:187:PHE:HB3	1:A:188:ALA:HB2	1	0.64
(1,2225)	1:A:187:PHE:HB3	1:A:188:ALA:HB3	1	0.64
(1,2225)	1:A:187:PHE:HB3	1:A:188:ALA:HB1	3	0.64
(1,2225)	1:A:187:PHE:HB3	1:A:188:ALA:HB2	3	0.64
(1,2225)	1:A:187:PHE:HB3	1:A:188:ALA:HB3	3	0.64
(1,2159)	1:A:176:LEU:HG	1:A:198:GLU:HG3	15	0.64
(1,2159)	1:A:176:LEU:HG	1:A:198:GLU:HG3	20	0.64
(1,2139)	1:A:172:PRO:HD3	1:A:194:ALA:HB1	4	0.64
(1,2139)	1:A:172:PRO:HD3	1:A:194:ALA:HB2	4	0.64
(1,2139)	1:A:172:PRO:HD3	1:A:194:ALA:HB3	4	0.64
(1,2085)	1:A:163:ARG:HB3	1:A:163:ARG:HD3	2	0.64
(1,1857)	1:A:102:ASP:H	1:A:102:ASP:HB3	7	0.64
(1,1750)	1:A:91:ASP:H	1:A:91:ASP:HB3	13	0.64
(1,1655)	1:A:76:GLU:HG3	1:A:222:TRP:HH2	15	0.64
(1,1650)	1:A:76:GLU:HB3	1:A:222:TRP:HZ2	13	0.64
(1,1648)	1:A:76:GLU:HB3	1:A:76:GLU:HG3	15	0.64
(1,1501)	1:A:101:GLN:HA	1:A:107:LYS:HG3	12	0.64
(1,1501)	1:A:101:GLN:HA	1:A:107:LYS:HG3	14	0.64
(1,1341)	1:A:213:SER:HA	1:A:216:LYS:HE3	18	0.64
(1,1312)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:H	8	0.64
(1,1218)	1:A:213:SER:HA	1:A:216:LYS:HD3	9	0.64
(1,56)	1:A:203:PRO:HG3	1:A:204:THR:H	10	0.63
(1,56)	1:A:203:PRO:HG3	1:A:204:THR:H	18	0.63
(1,553)	1:A:218:GLN:HG3	1:A:221:ILE:HD11	14	0.63
(1,553)	1:A:218:GLN:HG3	1:A:221:ILE:HD12	14	0.63

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,553)	1:A:218:GLN:HG3	1:A:221:ILE:HD13	14	0.63
(1,478)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:182:ARG:H	17	0.63
(1,2418)	1:A:234:ILE:H	1:A:234:ILE:HG13	15	0.63
(1,2393)	1:A:224:GLU:HB3	1:A:224:GLU:HG3	5	0.63
(1,2393)	1:A:224:GLU:HB3	1:A:224:GLU:HG3	8	0.63
(1,2393)	1:A:224:GLU:HB3	1:A:224:GLU:HG3	13	0.63
(1,2386)	1:A:223:LYS:HG3	1:A:223:LYS:HE3	6	0.63
(1,2349)	1:A:216:LYS:HB3	1:A:216:LYS:HE3	7	0.63
(1,2337)	1:A:214:VAL:HA	1:A:216:LYS:HG3	18	0.63
(1,2337)	1:A:214:VAL:HA	1:A:216:LYS:HG3	20	0.63
(1,2330)	1:A:212:GLU:HG3	1:A:216:LYS:HD3	9	0.63
(1,2330)	1:A:212:GLU:HG3	1:A:216:LYS:HD3	17	0.63
(1,2319)	1:A:207:GLU:H	1:A:208:ARG:HG3	2	0.63
(1,2295)	1:A:200:ARG:HB3	1:A:200:ARG:HG3	7	0.63
(1,2295)	1:A:200:ARG:HB3	1:A:200:ARG:HG3	12	0.63
(1,2225)	1:A:187:PHE:HB3	1:A:188:ALA:HB1	18	0.63
(1,2225)	1:A:187:PHE:HB3	1:A:188:ALA:HB2	18	0.63
(1,2225)	1:A:187:PHE:HB3	1:A:188:ALA:HB3	18	0.63
(1,2193)	1:A:180:LEU:HD11	1:A:184:ARG:HD3	15	0.63
(1,2193)	1:A:180:LEU:HD12	1:A:184:ARG:HD3	15	0.63
(1,2193)	1:A:180:LEU:HD13	1:A:184:ARG:HD3	15	0.63
(1,2193)	1:A:180:LEU:HD21	1:A:184:ARG:HD3	15	0.63
(1,2193)	1:A:180:LEU:HD22	1:A:184:ARG:HD3	15	0.63
(1,2193)	1:A:180:LEU:HD23	1:A:184:ARG:HD3	15	0.63
(1,2186)	1:A:180:LEU:HG	1:A:181:PRO:HD3	14	0.63
(1,2139)	1:A:172:PRO:HD3	1:A:194:ALA:HB1	9	0.63
(1,2139)	1:A:172:PRO:HD3	1:A:194:ALA:HB2	9	0.63
(1,2139)	1:A:172:PRO:HD3	1:A:194:ALA:HB3	9	0.63
(1,2123)	1:A:171:ILE:HG21	1:A:172:PRO:HD3	10	0.63
(1,2123)	1:A:171:ILE:HG22	1:A:172:PRO:HD3	10	0.63
(1,2123)	1:A:171:ILE:HG23	1:A:172:PRO:HD3	10	0.63
(1,2123)	1:A:171:ILE:HG21	1:A:172:PRO:HD3	12	0.63
(1,2123)	1:A:171:ILE:HG22	1:A:172:PRO:HD3	12	0.63
(1,2123)	1:A:171:ILE:HG23	1:A:172:PRO:HD3	12	0.63
(1,2101)	1:A:166:LYS:HG3	1:A:166:LYS:HE3	14	0.63
(1,2083)	1:A:163:ARG:H	1:A:163:ARG:HG3	8	0.63
(1,2004)	1:A:144:LEU:HA	1:A:148:TRP:HB3	5	0.63
(1,1936)	1:A:134:TRP:HE1	1:A:169:SER:HB3	2	0.63
(1,1886)	1:A:115:MET:HB3	1:A:115:MET:HE1	20	0.63
(1,1886)	1:A:115:MET:HB3	1:A:115:MET:HE2	20	0.63
(1,1886)	1:A:115:MET:HB3	1:A:115:MET:HE3	20	0.63
(1,1883)	1:A:113:ALA:HB1	1:A:114:GLU:HG3	11	0.63

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1883)	1:A:113:ALA:HB2	1:A:114:GLU:HG3	11	0.63
(1,1883)	1:A:113:ALA:HB3	1:A:114:GLU:HG3	11	0.63
(1,1882)	1:A:112:PHE:HA	1:A:115:MET:HG3	10	0.63
(1,179)	1:A:95:ARG:HD3	1:A:98:ASN:H	9	0.63
(1,1750)	1:A:91:ASP:H	1:A:91:ASP:HB3	3	0.63
(1,1750)	1:A:91:ASP:H	1:A:91:ASP:HB3	8	0.63
(1,1750)	1:A:91:ASP:H	1:A:91:ASP:HB3	20	0.63
(1,1648)	1:A:76:GLU:HB3	1:A:76:GLU:HG3	4	0.63
(1,1644)	1:A:76:GLU:H	1:A:76:GLU:HB3	20	0.63
(1,1643)	1:A:75:GLU:HB3	1:A:76:GLU:H	1	0.63
(1,1643)	1:A:75:GLU:HB3	1:A:76:GLU:H	19	0.63
(1,1619)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD1	1	0.63
(1,1619)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD2	1	0.63
(1,1603)	1:A:146:ASP:HB3	1:A:147:THR:HB	4	0.63
(1,1365)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:211:GLN:HE21	15	0.63
(1,1365)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:211:GLN:HE22	15	0.63
(1,1321)	1:A:166:LYS:HE3	1:A:221:ILE:HG21	12	0.63
(1,1321)	1:A:166:LYS:HE3	1:A:221:ILE:HG22	12	0.63
(1,1321)	1:A:166:LYS:HE3	1:A:221:ILE:HG23	12	0.63
(1,1312)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:H	4	0.63
(1,1224)	1:A:223:LYS:HD3	1:A:224:GLU:HB3	6	0.63
(1,103)	1:A:197:GLU:HB3	1:A:199:SER:H	12	0.63
(1,856)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG21	19	0.62
(1,856)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG22	19	0.62
(1,856)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG23	19	0.62
(1,84)	1:A:197:GLU:HB3	1:A:198:GLU:H	12	0.62
(1,445)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:H	7	0.62
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG11	1:A:230:GLN:HG3	4	0.62
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG12	1:A:230:GLN:HG3	4	0.62
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG13	1:A:230:GLN:HG3	4	0.62
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG21	1:A:230:GLN:HG3	4	0.62
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG22	1:A:230:GLN:HG3	4	0.62
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG23	1:A:230:GLN:HG3	4	0.62
(1,2389)	1:A:223:LYS:HE3	1:A:224:GLU:HB3	18	0.62
(1,2379)	1:A:223:LYS:H	1:A:223:LYS:HE3	5	0.62
(1,2378)	1:A:223:LYS:H	1:A:223:LYS:HG3	10	0.62
(1,2349)	1:A:216:LYS:HB3	1:A:216:LYS:HE3	11	0.62
(1,2295)	1:A:200:ARG:HB3	1:A:200:ARG:HG3	10	0.62
(1,2293)	1:A:199:SER:HB3	1:A:202:PHE:HB3	16	0.62
(1,2290)	1:A:198:GLU:HB3	1:A:198:GLU:HG3	2	0.62
(1,2290)	1:A:198:GLU:HB3	1:A:198:GLU:HG3	3	0.62
(1,2290)	1:A:198:GLU:HB3	1:A:198:GLU:HG3	7	0.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2290)	1:A:198:GLU:HB3	1:A:198:GLU:HG3	10	0.62
(1,2279)	1:A:196:GLU:HG3	1:A:197:GLU:H	12	0.62
(1,2277)	1:A:196:GLU:HB3	1:A:196:GLU:HG3	9	0.62
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD11	1:A:202:PHE:HB3	2	0.62
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD12	1:A:202:PHE:HB3	2	0.62
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD13	1:A:202:PHE:HB3	2	0.62
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD21	1:A:202:PHE:HB3	2	0.62
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD22	1:A:202:PHE:HB3	2	0.62
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD23	1:A:202:PHE:HB3	2	0.62
(1,2225)	1:A:187:PHE:HB3	1:A:188:ALA:HB1	9	0.62
(1,2225)	1:A:187:PHE:HB3	1:A:188:ALA:HB2	9	0.62
(1,2225)	1:A:187:PHE:HB3	1:A:188:ALA:HB3	9	0.62
(1,2225)	1:A:187:PHE:HB3	1:A:188:ALA:HB1	11	0.62
(1,2225)	1:A:187:PHE:HB3	1:A:188:ALA:HB2	11	0.62
(1,2225)	1:A:187:PHE:HB3	1:A:188:ALA:HB3	11	0.62
(1,2199)	1:A:182:ARG:HA	1:A:182:ARG:HG3	20	0.62
(1,2186)	1:A:180:LEU:HG	1:A:181:PRO:HD3	18	0.62
(1,2126)	1:A:171:ILE:HD11	1:A:172:PRO:HG3	6	0.62
(1,2126)	1:A:171:ILE:HD12	1:A:172:PRO:HG3	6	0.62
(1,2126)	1:A:171:ILE:HD13	1:A:172:PRO:HG3	6	0.62
(1,2126)	1:A:171:ILE:HD11	1:A:172:PRO:HG3	10	0.62
(1,2126)	1:A:171:ILE:HD12	1:A:172:PRO:HG3	10	0.62
(1,2126)	1:A:171:ILE:HD13	1:A:172:PRO:HG3	10	0.62
(1,2101)	1:A:166:LYS:HG3	1:A:166:LYS:HE3	15	0.62
(1,2086)	1:A:163:ARG:HG3	1:A:164:GLN:H	5	0.62
(1,2084)	1:A:163:ARG:HA	1:A:163:ARG:HG3	20	0.62
(1,2004)	1:A:144:LEU:HA	1:A:148:TRP:HB3	4	0.62
(1,1993)	1:A:141:GLU:H	1:A:180:LEU:HB3	1	0.62
(1,1750)	1:A:91:ASP:H	1:A:91:ASP:HB3	15	0.62
(1,1747)	1:A:89:ASP:HB3	1:A:93:ALA:H	15	0.62
(1,1680)	1:A:80:LYS:HG3	1:A:81:PHE:H	18	0.62
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:108:PRO:HG3	16	0.62
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:108:PRO:HG3	16	0.62
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:108:PRO:HG3	16	0.62
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:108:PRO:HG3	16	0.62
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:108:PRO:HG3	16	0.62
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:108:PRO:HG3	16	0.62
(1,1653)	1:A:76:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG11	5	0.62
(1,1653)	1:A:76:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG12	5	0.62
(1,1653)	1:A:76:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG13	5	0.62
(1,1595)	1:A:220:THR:HA	1:A:223:LYS:HD3	7	0.62
(1,1361)	1:A:204:THR:HG21	1:A:208:ARG:HD3	11	0.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1361)	1:A:204:THR:HG22	1:A:208:ARG:HD3	11	0.62
(1,1361)	1:A:204:THR:HG23	1:A:208:ARG:HD3	11	0.62
(1,1361)	1:A:204:THR:HG21	1:A:208:ARG:HD3	19	0.62
(1,1361)	1:A:204:THR:HG22	1:A:208:ARG:HD3	19	0.62
(1,1361)	1:A:204:THR:HG23	1:A:208:ARG:HD3	19	0.62
(1,1330)	1:A:102:ASP:HA	1:A:107:LYS:HE3	20	0.62
(1,1304)	1:A:87:GLU:H	1:A:87:GLU:HG3	6	0.62
(1,1231)	1:A:111:ILE:HG21	1:A:114:GLU:HB3	6	0.62
(1,1231)	1:A:111:ILE:HG22	1:A:114:GLU:HB3	6	0.62
(1,1231)	1:A:111:ILE:HG23	1:A:114:GLU:HB3	6	0.62
(1,1227)	1:A:223:LYS:H	1:A:223:LYS:HD3	15	0.62
(1,856)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG21	12	0.61
(1,856)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG22	12	0.61
(1,856)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG23	12	0.61
(1,56)	1:A:203:PRO:HG3	1:A:204:THR:H	14	0.61
(1,478)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:182:ARG:H	14	0.61
(1,445)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:H	9	0.61
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG11	1:A:230:GLN:HG3	6	0.61
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG12	1:A:230:GLN:HG3	6	0.61
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG13	1:A:230:GLN:HG3	6	0.61
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG21	1:A:230:GLN:HG3	6	0.61
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG22	1:A:230:GLN:HG3	6	0.61
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG23	1:A:230:GLN:HG3	6	0.61
(1,2393)	1:A:224:GLU:HB3	1:A:224:GLU:HG3	9	0.61
(1,2392)	1:A:224:GLU:HA	1:A:227:ASN:HB3	20	0.61
(1,2390)	1:A:224:GLU:H	1:A:224:GLU:HG3	15	0.61
(1,2388)	1:A:223:LYS:HD3	1:A:223:LYS:HE3	11	0.61
(1,2386)	1:A:223:LYS:HG3	1:A:223:LYS:HE3	13	0.61
(1,2386)	1:A:223:LYS:HG3	1:A:223:LYS:HE3	15	0.61
(1,2352)	1:A:216:LYS:HG3	1:A:217:THR:H	7	0.61
(1,2295)	1:A:200:ARG:HB3	1:A:200:ARG:HG3	20	0.61
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD11	1:A:202:PHE:HB3	1	0.61
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD12	1:A:202:PHE:HB3	1	0.61
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD13	1:A:202:PHE:HB3	1	0.61
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD21	1:A:202:PHE:HB3	1	0.61
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD22	1:A:202:PHE:HB3	1	0.61
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD23	1:A:202:PHE:HB3	1	0.61
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD11	1:A:202:PHE:HB3	10	0.61
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD12	1:A:202:PHE:HB3	10	0.61
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD13	1:A:202:PHE:HB3	10	0.61
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD21	1:A:202:PHE:HB3	10	0.61
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD22	1:A:202:PHE:HB3	10	0.61

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD23	1:A:202:PHE:HB3	10	0.61
(1,2236)	1:A:190:GLN:H	1:A:190:GLN:HG3	13	0.61
(1,2225)	1:A:187:PHE:HB3	1:A:188:ALA:HB1	6	0.61
(1,2225)	1:A:187:PHE:HB3	1:A:188:ALA:HB2	6	0.61
(1,2225)	1:A:187:PHE:HB3	1:A:188:ALA:HB3	6	0.61
(1,2225)	1:A:187:PHE:HB3	1:A:188:ALA:HB1	7	0.61
(1,2225)	1:A:187:PHE:HB3	1:A:188:ALA:HB2	7	0.61
(1,2225)	1:A:187:PHE:HB3	1:A:188:ALA:HB3	7	0.61
(1,2206)	1:A:184:ARG:H	1:A:184:ARG:HG3	15	0.61
(1,2199)	1:A:182:ARG:HA	1:A:182:ARG:HG3	13	0.61
(1,2172)	1:A:177:ASN:HB3	1:A:178:ASN:H	8	0.61
(1,2139)	1:A:172:PRO:HD3	1:A:194:ALA:HB1	20	0.61
(1,2139)	1:A:172:PRO:HD3	1:A:194:ALA:HB2	20	0.61
(1,2139)	1:A:172:PRO:HD3	1:A:194:ALA:HB3	20	0.61
(1,2126)	1:A:171:ILE:HD11	1:A:172:PRO:HG3	4	0.61
(1,2126)	1:A:171:ILE:HD12	1:A:172:PRO:HG3	4	0.61
(1,2126)	1:A:171:ILE:HD13	1:A:172:PRO:HG3	4	0.61
(1,2123)	1:A:171:ILE:HG21	1:A:172:PRO:HD3	4	0.61
(1,2123)	1:A:171:ILE:HG22	1:A:172:PRO:HD3	4	0.61
(1,2123)	1:A:171:ILE:HG23	1:A:172:PRO:HD3	4	0.61
(1,2123)	1:A:171:ILE:HG21	1:A:172:PRO:HD3	5	0.61
(1,2123)	1:A:171:ILE:HG22	1:A:172:PRO:HD3	5	0.61
(1,2123)	1:A:171:ILE:HG23	1:A:172:PRO:HD3	5	0.61
(1,2085)	1:A:163:ARG:HB3	1:A:163:ARG:HD3	19	0.61
(1,1883)	1:A:113:ALA:HB1	1:A:114:GLU:HG3	1	0.61
(1,1883)	1:A:113:ALA:HB2	1:A:114:GLU:HG3	1	0.61
(1,1883)	1:A:113:ALA:HB3	1:A:114:GLU:HG3	1	0.61
(1,1882)	1:A:112:PHE:HA	1:A:115:MET:HG3	13	0.61
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG11	19	0.61
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG12	19	0.61
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG13	19	0.61
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG21	19	0.61
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG22	19	0.61
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG23	19	0.61
(1,1750)	1:A:91:ASP:H	1:A:91:ASP:HB3	19	0.61
(1,1680)	1:A:80:LYS:HG3	1:A:81:PHE:H	12	0.61
(1,1680)	1:A:80:LYS:HG3	1:A:81:PHE:H	13	0.61
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:108:PRO:HD3	19	0.61
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:108:PRO:HD3	19	0.61
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:108:PRO:HD3	19	0.61
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:108:PRO:HD3	19	0.61
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:108:PRO:HD3	19	0.61

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:108:PRO:HD3	19	0.61
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:108:PRO:HG3	11	0.61
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:108:PRO:HG3	11	0.61
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:108:PRO:HG3	11	0.61
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:108:PRO:HG3	11	0.61
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:108:PRO:HG3	11	0.61
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:108:PRO:HG3	11	0.61
(1,147)	1:A:208:ARG:H	1:A:208:ARG:HD3	20	0.61
(1,1354)	1:A:182:ARG:HB3	1:A:182:ARG:HD3	11	0.61
(1,135)	1:A:163:ARG:H	1:A:163:ARG:HD3	1	0.61
(1,1342)	1:A:215:TYR:HD1	1:A:216:LYS:HE3	3	0.61
(1,1342)	1:A:215:TYR:HD2	1:A:216:LYS:HE3	3	0.61
(1,1276)	1:A:212:GLU:HG3	1:A:216:LYS:HD3	4	0.61
(1,1218)	1:A:213:SER:HA	1:A:216:LYS:HD3	8	0.61
(1,750)	1:A:80:LYS:HB3	1:A:133:ALA:HB1	7	0.6
(1,750)	1:A:80:LYS:HB3	1:A:133:ALA:HB2	7	0.6
(1,750)	1:A:80:LYS:HB3	1:A:133:ALA:HB3	7	0.6
(1,616)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:83:ILE:HD11	3	0.6
(1,616)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:83:ILE:HD12	3	0.6
(1,616)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:83:ILE:HD13	3	0.6
(1,56)	1:A:203:PRO:HG3	1:A:204:THR:H	2	0.6
(1,332)	1:A:95:ARG:H	1:A:95:ARG:HD3	4	0.6
(1,320)	1:A:144:LEU:H	1:A:145:ARG:HG3	2	0.6
(1,2388)	1:A:223:LYS:HD3	1:A:223:LYS:HE3	5	0.6
(1,2388)	1:A:223:LYS:HD3	1:A:223:LYS:HE3	17	0.6
(1,2388)	1:A:223:LYS:HD3	1:A:223:LYS:HE3	19	0.6
(1,2386)	1:A:223:LYS:HG3	1:A:223:LYS:HE3	4	0.6
(1,2381)	1:A:223:LYS:HA	1:A:226:ARG:HB3	9	0.6
(1,2368)	1:A:219:GLN:HE21	1:A:223:LYS:HD3	12	0.6
(1,2368)	1:A:219:GLN:HE22	1:A:223:LYS:HD3	12	0.6
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG11	1:A:207:GLU:HB3	13	0.6
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG12	1:A:207:GLU:HB3	13	0.6
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG13	1:A:207:GLU:HB3	13	0.6
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG21	1:A:207:GLU:HB3	13	0.6
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG22	1:A:207:GLU:HB3	13	0.6
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG23	1:A:207:GLU:HB3	13	0.6
(1,2294)	1:A:200:ARG:HA	1:A:200:ARG:HG3	1	0.6
(1,2293)	1:A:199:SER:HB3	1:A:202:PHE:HB3	20	0.6
(1,2279)	1:A:196:GLU:HG3	1:A:197:GLU:H	11	0.6
(1,2279)	1:A:196:GLU:HG3	1:A:197:GLU:H	13	0.6
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD11	1:A:202:PHE:HB3	11	0.6
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD12	1:A:202:PHE:HB3	11	0.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD13	1:A:202:PHE:HB3	11	0.6
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD21	1:A:202:PHE:HB3	11	0.6
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD22	1:A:202:PHE:HB3	11	0.6
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD23	1:A:202:PHE:HB3	11	0.6
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD11	1:A:202:PHE:HB3	16	0.6
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD12	1:A:202:PHE:HB3	16	0.6
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD13	1:A:202:PHE:HB3	16	0.6
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD21	1:A:202:PHE:HB3	16	0.6
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD22	1:A:202:PHE:HB3	16	0.6
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD23	1:A:202:PHE:HB3	16	0.6
(1,2236)	1:A:190:GLN:H	1:A:190:GLN:HG3	3	0.6
(1,2236)	1:A:190:GLN:H	1:A:190:GLN:HG3	17	0.6
(1,2236)	1:A:190:GLN:H	1:A:190:GLN:HG3	20	0.6
(1,2206)	1:A:184:ARG:H	1:A:184:ARG:HG3	3	0.6
(1,2204)	1:A:183:GLU:HG3	1:A:184:ARG:HG3	4	0.6
(1,2201)	1:A:183:GLU:HA	1:A:183:GLU:HG3	18	0.6
(1,2139)	1:A:172:PRO:HD3	1:A:194:ALA:HB1	1	0.6
(1,2139)	1:A:172:PRO:HD3	1:A:194:ALA:HB2	1	0.6
(1,2139)	1:A:172:PRO:HD3	1:A:194:ALA:HB3	1	0.6
(1,2126)	1:A:171:ILE:HD11	1:A:172:PRO:HG3	7	0.6
(1,2126)	1:A:171:ILE:HD12	1:A:172:PRO:HG3	7	0.6
(1,2126)	1:A:171:ILE:HD13	1:A:172:PRO:HG3	7	0.6
(1,1968)	1:A:139:LEU:HB3	1:A:189:LEU:HD11	8	0.6
(1,1968)	1:A:139:LEU:HB3	1:A:189:LEU:HD12	8	0.6
(1,1968)	1:A:139:LEU:HB3	1:A:189:LEU:HD13	8	0.6
(1,1968)	1:A:139:LEU:HB3	1:A:189:LEU:HD21	8	0.6
(1,1968)	1:A:139:LEU:HB3	1:A:189:LEU:HD22	8	0.6
(1,1968)	1:A:139:LEU:HB3	1:A:189:LEU:HD23	8	0.6
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD11	1:A:151:PHE:HB3	18	0.6
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD12	1:A:151:PHE:HB3	18	0.6
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD13	1:A:151:PHE:HB3	18	0.6
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD21	1:A:151:PHE:HB3	18	0.6
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD22	1:A:151:PHE:HB3	18	0.6
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD23	1:A:151:PHE:HB3	18	0.6
(1,1893)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:121:HIS:HD2	3	0.6
(1,1893)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:121:HIS:HD2	9	0.6
(1,1893)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:121:HIS:HD2	14	0.6
(1,1893)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:121:HIS:HD2	20	0.6
(1,1883)	1:A:113:ALA:HB1	1:A:114:GLU:HG3	15	0.6
(1,1883)	1:A:113:ALA:HB2	1:A:114:GLU:HG3	15	0.6
(1,1883)	1:A:113:ALA:HB3	1:A:114:GLU:HG3	15	0.6
(1,1882)	1:A:112:PHE:HA	1:A:115:MET:HG3	17	0.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1875)	1:A:107:LYS:HD3	1:A:108:PRO:HA	8	0.6
(1,1852)	1:A:101:GLN:HB3	1:A:107:LYS:HG3	13	0.6
(1,1750)	1:A:91:ASP:H	1:A:91:ASP:HB3	5	0.6
(1,1750)	1:A:91:ASP:H	1:A:91:ASP:HB3	6	0.6
(1,1750)	1:A:91:ASP:H	1:A:91:ASP:HB3	12	0.6
(1,1709)	1:A:83:ILE:HA	1:A:136:ILE:HG13	7	0.6
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:108:PRO:HD3	9	0.6
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:108:PRO:HD3	9	0.6
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:108:PRO:HD3	9	0.6
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:108:PRO:HD3	9	0.6
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:108:PRO:HD3	9	0.6
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:108:PRO:HD3	9	0.6
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:108:PRO:HG3	17	0.6
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:108:PRO:HG3	17	0.6
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:108:PRO:HG3	17	0.6
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:108:PRO:HG3	17	0.6
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:108:PRO:HG3	17	0.6
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:108:PRO:HG3	17	0.6
(1,1653)	1:A:76:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG11	14	0.6
(1,1653)	1:A:76:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG12	14	0.6
(1,1653)	1:A:76:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG13	14	0.6
(1,1648)	1:A:76:GLU:HB3	1:A:76:GLU:HG3	10	0.6
(1,1595)	1:A:220:THR:HA	1:A:223:LYS:HD3	2	0.6
(1,1358)	1:A:231:ARG:HA	1:A:231:ARG:HD3	10	0.6
(1,1351)	1:A:200:ARG:HA	1:A:200:ARG:HD3	12	0.6
(1,1333)	1:A:107:LYS:H	1:A:107:LYS:HE3	16	0.6
(1,1214)	1:A:166:LYS:H	1:A:166:LYS:HD3	18	0.6
(1,1209)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:221:ILE:HD11	5	0.6
(1,1209)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:221:ILE:HD12	5	0.6
(1,1209)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:221:ILE:HD13	5	0.6
(1,922)	1:A:217:THR:HG21	1:A:218:GLN:HG3	14	0.59
(1,922)	1:A:217:THR:HG22	1:A:218:GLN:HG3	14	0.59
(1,922)	1:A:217:THR:HG23	1:A:218:GLN:HG3	14	0.59
(1,751)	1:A:133:ALA:HB1	1:A:218:GLN:HG3	7	0.59
(1,751)	1:A:133:ALA:HB2	1:A:218:GLN:HG3	7	0.59
(1,751)	1:A:133:ALA:HB3	1:A:218:GLN:HG3	7	0.59
(1,750)	1:A:80:LYS:HB3	1:A:133:ALA:HB1	20	0.59
(1,750)	1:A:80:LYS:HB3	1:A:133:ALA:HB2	20	0.59
(1,750)	1:A:80:LYS:HB3	1:A:133:ALA:HB3	20	0.59
(1,628)	1:A:111:ILE:HD11	1:A:114:GLU:HB3	2	0.59
(1,628)	1:A:111:ILE:HD12	1:A:114:GLU:HB3	2	0.59
(1,628)	1:A:111:ILE:HD13	1:A:114:GLU:HB3	2	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,553)	1:A:218:GLN:HG3	1:A:221:ILE:HD11	6	0.59
(1,553)	1:A:218:GLN:HG3	1:A:221:ILE:HD12	6	0.59
(1,553)	1:A:218:GLN:HG3	1:A:221:ILE:HD13	6	0.59
(1,445)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:H	6	0.59
(1,445)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:H	15	0.59
(1,2393)	1:A:224:GLU:HB3	1:A:224:GLU:HG3	6	0.59
(1,2388)	1:A:223:LYS:HD3	1:A:223:LYS:HE3	2	0.59
(1,2388)	1:A:223:LYS:HD3	1:A:223:LYS:HE3	18	0.59
(1,2382)	1:A:223:LYS:HA	1:A:226:ARG:HG3	5	0.59
(1,2379)	1:A:223:LYS:H	1:A:223:LYS:HE3	19	0.59
(1,2352)	1:A:216:LYS:HG3	1:A:217:THR:H	9	0.59
(1,2349)	1:A:216:LYS:HB3	1:A:216:LYS:HE3	16	0.59
(1,2321)	1:A:208:ARG:HG3	1:A:211:GLN:HE22	10	0.59
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG11	1:A:207:GLU:HB3	6	0.59
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG12	1:A:207:GLU:HB3	6	0.59
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG13	1:A:207:GLU:HB3	6	0.59
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG21	1:A:207:GLU:HB3	6	0.59
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG22	1:A:207:GLU:HB3	6	0.59
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG23	1:A:207:GLU:HB3	6	0.59
(1,2293)	1:A:199:SER:HB3	1:A:202:PHE:HB3	7	0.59
(1,2280)	1:A:196:GLU:HG3	1:A:199:SER:HB3	16	0.59
(1,2279)	1:A:196:GLU:HG3	1:A:197:GLU:H	1	0.59
(1,2236)	1:A:190:GLN:H	1:A:190:GLN:HG3	7	0.59
(1,2225)	1:A:187:PHE:HB3	1:A:188:ALA:HB1	4	0.59
(1,2225)	1:A:187:PHE:HB3	1:A:188:ALA:HB2	4	0.59
(1,2225)	1:A:187:PHE:HB3	1:A:188:ALA:HB3	4	0.59
(1,2225)	1:A:187:PHE:HB3	1:A:188:ALA:HB1	16	0.59
(1,2225)	1:A:187:PHE:HB3	1:A:188:ALA:HB2	16	0.59
(1,2225)	1:A:187:PHE:HB3	1:A:188:ALA:HB3	16	0.59
(1,2172)	1:A:177:ASN:HB3	1:A:178:ASN:H	11	0.59
(1,2139)	1:A:172:PRO:HD3	1:A:194:ALA:HB1	10	0.59
(1,2139)	1:A:172:PRO:HD3	1:A:194:ALA:HB2	10	0.59
(1,2139)	1:A:172:PRO:HD3	1:A:194:ALA:HB3	10	0.59
(1,2139)	1:A:172:PRO:HD3	1:A:194:ALA:HB1	16	0.59
(1,2139)	1:A:172:PRO:HD3	1:A:194:ALA:HB2	16	0.59
(1,2139)	1:A:172:PRO:HD3	1:A:194:ALA:HB3	16	0.59
(1,2126)	1:A:171:ILE:HD11	1:A:172:PRO:HG3	2	0.59
(1,2126)	1:A:171:ILE:HD12	1:A:172:PRO:HG3	2	0.59
(1,2126)	1:A:171:ILE:HD13	1:A:172:PRO:HG3	2	0.59
(1,2126)	1:A:171:ILE:HD11	1:A:172:PRO:HG3	11	0.59
(1,2126)	1:A:171:ILE:HD12	1:A:172:PRO:HG3	11	0.59
(1,2126)	1:A:171:ILE:HD13	1:A:172:PRO:HG3	11	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2126)	1:A:171:ILE:HD11	1:A:172:PRO:HG3	19	0.59
(1,2126)	1:A:171:ILE:HD12	1:A:172:PRO:HG3	19	0.59
(1,2126)	1:A:171:ILE:HD13	1:A:172:PRO:HG3	19	0.59
(1,2123)	1:A:171:ILE:HG21	1:A:172:PRO:HD3	11	0.59
(1,2123)	1:A:171:ILE:HG22	1:A:172:PRO:HD3	11	0.59
(1,2123)	1:A:171:ILE:HG23	1:A:172:PRO:HD3	11	0.59
(1,2123)	1:A:171:ILE:HG21	1:A:172:PRO:HD3	20	0.59
(1,2123)	1:A:171:ILE:HG22	1:A:172:PRO:HD3	20	0.59
(1,2123)	1:A:171:ILE:HG23	1:A:172:PRO:HD3	20	0.59
(1,2108)	1:A:167:TYR:HB3	1:A:221:ILE:HD11	12	0.59
(1,2108)	1:A:167:TYR:HB3	1:A:221:ILE:HD12	12	0.59
(1,2108)	1:A:167:TYR:HB3	1:A:221:ILE:HD13	12	0.59
(1,2101)	1:A:166:LYS:HG3	1:A:166:LYS:HE3	19	0.59
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD11	1:A:158:MET:HG3	16	0.59
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD12	1:A:158:MET:HG3	16	0.59
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD13	1:A:158:MET:HG3	16	0.59
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD21	1:A:158:MET:HG3	16	0.59
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD22	1:A:158:MET:HG3	16	0.59
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD23	1:A:158:MET:HG3	16	0.59
(1,1936)	1:A:134:TRP:HE1	1:A:169:SER:HB3	13	0.59
(1,1898)	1:A:123:GLN:H	1:A:123:GLN:HG3	7	0.59
(1,1895)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:122:LEU:HD11	5	0.59
(1,1895)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:122:LEU:HD12	5	0.59
(1,1895)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:122:LEU:HD13	5	0.59
(1,1895)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:122:LEU:HD21	5	0.59
(1,1895)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:122:LEU:HD22	5	0.59
(1,1895)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:122:LEU:HD23	5	0.59
(1,1895)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:122:LEU:HD11	16	0.59
(1,1895)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:122:LEU:HD12	16	0.59
(1,1895)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:122:LEU:HD13	16	0.59
(1,1895)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:122:LEU:HD21	16	0.59
(1,1895)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:122:LEU:HD22	16	0.59
(1,1895)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:122:LEU:HD23	16	0.59
(1,1875)	1:A:107:LYS:HD3	1:A:108:PRO:HA	5	0.59
(1,1875)	1:A:107:LYS:HD3	1:A:108:PRO:HA	6	0.59
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG11	17	0.59
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG12	17	0.59
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG13	17	0.59
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG21	17	0.59
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG22	17	0.59
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG23	17	0.59
(1,1857)	1:A:102:ASP:H	1:A:102:ASP:HB3	4	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1655)	1:A:76:GLU:HG3	1:A:222:TRP:HH2	16	0.59
(1,1652)	1:A:76:GLU:HG3	1:A:77:VAL:H	10	0.59
(1,1645)	1:A:76:GLU:H	1:A:76:GLU:HG3	5	0.59
(1,1644)	1:A:76:GLU:H	1:A:76:GLU:HB3	16	0.59
(1,1643)	1:A:75:GLU:HB3	1:A:76:GLU:H	12	0.59
(1,147)	1:A:208:ARG:H	1:A:208:ARG:HD3	16	0.59
(1,1392)	1:A:107:LYS:HA	1:A:107:LYS:HE3	10	0.59
(1,1360)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HG13	12	0.59
(1,1268)	1:A:210:PHE:HA	1:A:211:GLN:HG3	16	0.59
(1,1226)	1:A:223:LYS:HD3	1:A:224:GLU:H	10	0.59
(1,56)	1:A:203:PRO:HG3	1:A:204:THR:H	1	0.58
(1,56)	1:A:203:PRO:HG3	1:A:204:THR:H	7	0.58
(1,56)	1:A:203:PRO:HG3	1:A:204:THR:H	15	0.58
(1,413)	1:A:218:GLN:HG3	1:A:221:ILE:H	4	0.58
(1,27)	1:A:108:PRO:HD3	1:A:109:GLY:H	9	0.58
(1,27)	1:A:108:PRO:HD3	1:A:109:GLY:H	12	0.58
(1,27)	1:A:108:PRO:HD3	1:A:109:GLY:H	14	0.58
(1,27)	1:A:108:PRO:HD3	1:A:109:GLY:H	15	0.58
(1,2413)	1:A:232:GLN:H	1:A:232:GLN:HG3	2	0.58
(1,2413)	1:A:232:GLN:H	1:A:232:GLN:HG3	3	0.58
(1,2396)	1:A:226:ARG:HA	1:A:226:ARG:HD3	18	0.58
(1,2388)	1:A:223:LYS:HD3	1:A:223:LYS:HE3	7	0.58
(1,2349)	1:A:216:LYS:HB3	1:A:216:LYS:HE3	1	0.58
(1,2330)	1:A:212:GLU:HG3	1:A:216:LYS:HD3	5	0.58
(1,2330)	1:A:212:GLU:HG3	1:A:216:LYS:HD3	19	0.58
(1,2321)	1:A:208:ARG:HG3	1:A:211:GLN:HE22	6	0.58
(1,2290)	1:A:198:GLU:HB3	1:A:198:GLU:HG3	16	0.58
(1,2290)	1:A:198:GLU:HB3	1:A:198:GLU:HG3	18	0.58
(1,2279)	1:A:196:GLU:HG3	1:A:197:GLU:H	20	0.58
(1,2240)	1:A:190:GLN:HG3	1:A:191:THR:HG21	1	0.58
(1,2240)	1:A:190:GLN:HG3	1:A:191:THR:HG22	1	0.58
(1,2240)	1:A:190:GLN:HG3	1:A:191:THR:HG23	1	0.58
(1,2236)	1:A:190:GLN:H	1:A:190:GLN:HG3	19	0.58
(1,2225)	1:A:187:PHE:HB3	1:A:188:ALA:HB1	8	0.58
(1,2225)	1:A:187:PHE:HB3	1:A:188:ALA:HB2	8	0.58
(1,2225)	1:A:187:PHE:HB3	1:A:188:ALA:HB3	8	0.58
(1,2225)	1:A:187:PHE:HB3	1:A:188:ALA:HB1	15	0.58
(1,2225)	1:A:187:PHE:HB3	1:A:188:ALA:HB2	15	0.58
(1,2225)	1:A:187:PHE:HB3	1:A:188:ALA:HB3	15	0.58
(1,2204)	1:A:183:GLU:HG3	1:A:184:ARG:HG3	7	0.58
(1,2172)	1:A:177:ASN:HB3	1:A:178:ASN:H	6	0.58
(1,2126)	1:A:171:ILE:HD11	1:A:172:PRO:HG3	3	0.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2126)	1:A:171:ILE:HD12	1:A:172:PRO:HG3	3	0.58
(1,2126)	1:A:171:ILE:HD13	1:A:172:PRO:HG3	3	0.58
(1,2126)	1:A:171:ILE:HD11	1:A:172:PRO:HG3	8	0.58
(1,2126)	1:A:171:ILE:HD12	1:A:172:PRO:HG3	8	0.58
(1,2126)	1:A:171:ILE:HD13	1:A:172:PRO:HG3	8	0.58
(1,2123)	1:A:171:ILE:HG21	1:A:172:PRO:HD3	18	0.58
(1,2123)	1:A:171:ILE:HG22	1:A:172:PRO:HD3	18	0.58
(1,2123)	1:A:171:ILE:HG23	1:A:172:PRO:HD3	18	0.58
(1,1993)	1:A:141:GLU:H	1:A:180:LEU:HB3	6	0.58
(1,1936)	1:A:134:TRP:HE1	1:A:169:SER:HB3	12	0.58
(1,1890)	1:A:117:HIS:HE1	1:A:122:LEU:HB3	11	0.58
(1,1875)	1:A:107:LYS:HD3	1:A:108:PRO:HA	4	0.58
(1,1856)	1:A:101:GLN:HG3	1:A:109:GLY:H	7	0.58
(1,1750)	1:A:91:ASP:H	1:A:91:ASP:HB3	17	0.58
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG11	1:A:112:PHE:HB3	3	0.58
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG12	1:A:112:PHE:HB3	3	0.58
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG13	1:A:112:PHE:HB3	3	0.58
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG21	1:A:112:PHE:HB3	3	0.58
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG22	1:A:112:PHE:HB3	3	0.58
(1,1697)	1:A:82:VAL:HG23	1:A:112:PHE:HB3	3	0.58
(1,1682)	1:A:80:LYS:HE3	1:A:81:PHE:HB3	11	0.58
(1,1652)	1:A:76:GLU:HG3	1:A:77:VAL:H	4	0.58
(1,1595)	1:A:220:THR:HA	1:A:223:LYS:HD3	5	0.58
(1,1501)	1:A:101:GLN:HA	1:A:107:LYS:HG3	9	0.58
(1,147)	1:A:208:ARG:H	1:A:208:ARG:HD3	4	0.58
(1,1392)	1:A:107:LYS:HA	1:A:107:LYS:HE3	15	0.58
(1,1343)	1:A:216:LYS:H	1:A:216:LYS:HE3	20	0.58
(1,1325)	1:A:166:LYS:H	1:A:166:LYS:HE3	7	0.58
(1,1321)	1:A:166:LYS:HE3	1:A:221:ILE:HG21	20	0.58
(1,1321)	1:A:166:LYS:HE3	1:A:221:ILE:HG22	20	0.58
(1,1321)	1:A:166:LYS:HE3	1:A:221:ILE:HG23	20	0.58
(1,103)	1:A:197:GLU:HB3	1:A:199:SER:H	13	0.58
(1,84)	1:A:197:GLU:HB3	1:A:198:GLU:H	11	0.57
(1,391)	1:A:230:GLN:H	1:A:230:GLN:HG3	18	0.57
(1,320)	1:A:144:LEU:H	1:A:145:ARG:HG3	17	0.57
(1,27)	1:A:108:PRO:HD3	1:A:109:GLY:H	1	0.57
(1,27)	1:A:108:PRO:HD3	1:A:109:GLY:H	2	0.57
(1,27)	1:A:108:PRO:HD3	1:A:109:GLY:H	3	0.57
(1,27)	1:A:108:PRO:HD3	1:A:109:GLY:H	6	0.57
(1,27)	1:A:108:PRO:HD3	1:A:109:GLY:H	16	0.57
(1,27)	1:A:108:PRO:HD3	1:A:109:GLY:H	18	0.57
(1,2403)	1:A:228:MET:HA	1:A:228:MET:HG3	1	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2397)	1:A:226:ARG:HB3	1:A:226:ARG:HD3	11	0.57
(1,2396)	1:A:226:ARG:HA	1:A:226:ARG:HD3	15	0.57
(1,2392)	1:A:224:GLU:HA	1:A:227:ASN:HB3	3	0.57
(1,2385)	1:A:223:LYS:HB3	1:A:226:ARG:HE	13	0.57
(1,2379)	1:A:223:LYS:H	1:A:223:LYS:HE3	2	0.57
(1,2352)	1:A:216:LYS:HG3	1:A:217:THR:H	10	0.57
(1,2352)	1:A:216:LYS:HG3	1:A:217:THR:H	18	0.57
(1,2349)	1:A:216:LYS:HB3	1:A:216:LYS:HE3	8	0.57
(1,2344)	1:A:215:TYR:HD1	1:A:216:LYS:HG3	8	0.57
(1,2344)	1:A:215:TYR:HD2	1:A:216:LYS:HG3	8	0.57
(1,2344)	1:A:215:TYR:HD1	1:A:216:LYS:HG3	15	0.57
(1,2344)	1:A:215:TYR:HD2	1:A:216:LYS:HG3	15	0.57
(1,2329)	1:A:212:GLU:HG3	1:A:216:LYS:HG3	8	0.57
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG11	1:A:207:GLU:HB3	11	0.57
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG12	1:A:207:GLU:HB3	11	0.57
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG13	1:A:207:GLU:HB3	11	0.57
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG21	1:A:207:GLU:HB3	11	0.57
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG22	1:A:207:GLU:HB3	11	0.57
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG23	1:A:207:GLU:HB3	11	0.57
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG11	1:A:207:GLU:HB3	19	0.57
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG12	1:A:207:GLU:HB3	19	0.57
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG13	1:A:207:GLU:HB3	19	0.57
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG21	1:A:207:GLU:HB3	19	0.57
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG22	1:A:207:GLU:HB3	19	0.57
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG23	1:A:207:GLU:HB3	19	0.57
(1,2295)	1:A:200:ARG:HB3	1:A:200:ARG:HG3	13	0.57
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD11	1:A:202:PHE:HB3	20	0.57
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD12	1:A:202:PHE:HB3	20	0.57
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD13	1:A:202:PHE:HB3	20	0.57
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD21	1:A:202:PHE:HB3	20	0.57
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD22	1:A:202:PHE:HB3	20	0.57
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD23	1:A:202:PHE:HB3	20	0.57
(1,2236)	1:A:190:GLN:H	1:A:190:GLN:HG3	10	0.57
(1,2186)	1:A:180:LEU:HG	1:A:181:PRO:HD3	5	0.57
(1,2139)	1:A:172:PRO:HD3	1:A:194:ALA:HB1	19	0.57
(1,2139)	1:A:172:PRO:HD3	1:A:194:ALA:HB2	19	0.57
(1,2139)	1:A:172:PRO:HD3	1:A:194:ALA:HB3	19	0.57
(1,2123)	1:A:171:ILE:HG21	1:A:172:PRO:HD3	6	0.57
(1,2123)	1:A:171:ILE:HG22	1:A:172:PRO:HD3	6	0.57
(1,2123)	1:A:171:ILE:HG23	1:A:172:PRO:HD3	6	0.57
(1,2123)	1:A:171:ILE:HG21	1:A:172:PRO:HD3	14	0.57
(1,2123)	1:A:171:ILE:HG22	1:A:172:PRO:HD3	14	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2123)	1:A:171:ILE:HG23	1:A:172:PRO:HD3	14	0.57
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG11	11	0.57
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG12	11	0.57
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG13	11	0.57
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG21	11	0.57
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG22	11	0.57
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG23	11	0.57
(1,2084)	1:A:163:ARG:HA	1:A:163:ARG:HG3	5	0.57
(1,1993)	1:A:141:GLU:H	1:A:180:LEU:HB3	4	0.57
(1,1893)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:121:HIS:HD2	13	0.57
(1,1893)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:121:HIS:HD2	17	0.57
(1,1886)	1:A:115:MET:HB3	1:A:115:MET:HE1	19	0.57
(1,1886)	1:A:115:MET:HB3	1:A:115:MET:HE2	19	0.57
(1,1886)	1:A:115:MET:HB3	1:A:115:MET:HE3	19	0.57
(1,1885)	1:A:114:GLU:HG3	1:A:115:MET:H	6	0.57
(1,1882)	1:A:112:PHE:HA	1:A:115:MET:HG3	16	0.57
(1,1875)	1:A:107:LYS:HD3	1:A:108:PRO:HA	9	0.57
(1,1875)	1:A:107:LYS:HD3	1:A:108:PRO:HA	11	0.57
(1,1852)	1:A:101:GLN:HB3	1:A:107:LYS:HG3	8	0.57
(1,1805)	1:A:98:ASN:HA	1:A:101:GLN:HG3	10	0.57
(1,1750)	1:A:91:ASP:H	1:A:91:ASP:HB3	11	0.57
(1,1680)	1:A:80:LYS:HG3	1:A:81:PHE:H	17	0.57
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:108:PRO:HG3	19	0.57
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:108:PRO:HG3	19	0.57
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:108:PRO:HG3	19	0.57
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:108:PRO:HG3	19	0.57
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:108:PRO:HG3	19	0.57
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:108:PRO:HG3	19	0.57
(1,1643)	1:A:75:GLU:HB3	1:A:76:GLU:H	10	0.57
(1,1521)	1:A:182:ARG:HA	1:A:182:ARG:HD3	17	0.57
(1,147)	1:A:208:ARG:H	1:A:208:ARG:HD3	19	0.57
(1,1365)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:211:GLN:HE21	7	0.57
(1,1365)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:211:GLN:HE22	7	0.57
(1,1363)	1:A:205:GLN:HA	1:A:208:ARG:HD3	8	0.57
(1,1361)	1:A:204:THR:HG21	1:A:208:ARG:HD3	8	0.57
(1,1361)	1:A:204:THR:HG22	1:A:208:ARG:HD3	8	0.57
(1,1361)	1:A:204:THR:HG23	1:A:208:ARG:HD3	8	0.57
(1,1355)	1:A:182:ARG:HD3	1:A:190:GLN:HE22	10	0.57
(1,1350)	1:A:200:ARG:HB3	1:A:200:ARG:HD3	19	0.57
(1,1325)	1:A:166:LYS:H	1:A:166:LYS:HE3	8	0.57
(1,1325)	1:A:166:LYS:H	1:A:166:LYS:HE3	12	0.57
(1,1270)	1:A:211:GLN:H	1:A:211:GLN:HG3	6	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1220)	1:A:216:LYS:HD3	1:A:217:THR:H	18	0.57
(1,1213)	1:A:165:HIS:HA	1:A:166:LYS:HD3	1	0.57
(1,103)	1:A:197:GLU:HB3	1:A:199:SER:H	1	0.57
(1,616)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:83:ILE:HD11	15	0.56
(1,616)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:83:ILE:HD12	15	0.56
(1,616)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:83:ILE:HD13	15	0.56
(1,445)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:H	3	0.56
(1,27)	1:A:108:PRO:HD3	1:A:109:GLY:H	4	0.56
(1,27)	1:A:108:PRO:HD3	1:A:109:GLY:H	5	0.56
(1,27)	1:A:108:PRO:HD3	1:A:109:GLY:H	8	0.56
(1,27)	1:A:108:PRO:HD3	1:A:109:GLY:H	11	0.56
(1,27)	1:A:108:PRO:HD3	1:A:109:GLY:H	13	0.56
(1,2390)	1:A:224:GLU:H	1:A:224:GLU:HG3	17	0.56
(1,2388)	1:A:223:LYS:HD3	1:A:223:LYS:HE3	1	0.56
(1,2388)	1:A:223:LYS:HD3	1:A:223:LYS:HE3	9	0.56
(1,2388)	1:A:223:LYS:HD3	1:A:223:LYS:HE3	12	0.56
(1,2388)	1:A:223:LYS:HD3	1:A:223:LYS:HE3	14	0.56
(1,2351)	1:A:216:LYS:HG3	1:A:216:LYS:HE3	7	0.56
(1,2349)	1:A:216:LYS:HB3	1:A:216:LYS:HE3	5	0.56
(1,2225)	1:A:187:PHE:HB3	1:A:188:ALA:HB1	5	0.56
(1,2225)	1:A:187:PHE:HB3	1:A:188:ALA:HB2	5	0.56
(1,2225)	1:A:187:PHE:HB3	1:A:188:ALA:HB3	5	0.56
(1,2212)	1:A:184:ARG:HG3	1:A:185:THR:H	13	0.56
(1,2159)	1:A:176:LEU:HG	1:A:198:GLU:HG3	17	0.56
(1,2126)	1:A:171:ILE:HD11	1:A:172:PRO:HG3	5	0.56
(1,2126)	1:A:171:ILE:HD12	1:A:172:PRO:HG3	5	0.56
(1,2126)	1:A:171:ILE:HD13	1:A:172:PRO:HG3	5	0.56
(1,2019)	1:A:145:ARG:HA	1:A:145:ARG:HD3	12	0.56
(1,2009)	1:A:144:LEU:HD11	1:A:145:ARG:HD3	14	0.56
(1,2009)	1:A:144:LEU:HD12	1:A:145:ARG:HD3	14	0.56
(1,2009)	1:A:144:LEU:HD13	1:A:145:ARG:HD3	14	0.56
(1,2009)	1:A:144:LEU:HD21	1:A:145:ARG:HD3	14	0.56
(1,2009)	1:A:144:LEU:HD22	1:A:145:ARG:HD3	14	0.56
(1,2009)	1:A:144:LEU:HD23	1:A:145:ARG:HD3	14	0.56
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD11	1:A:151:PHE:HB3	7	0.56
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD12	1:A:151:PHE:HB3	7	0.56
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD13	1:A:151:PHE:HB3	7	0.56
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD21	1:A:151:PHE:HB3	7	0.56
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD22	1:A:151:PHE:HB3	7	0.56
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD23	1:A:151:PHE:HB3	7	0.56
(1,1885)	1:A:114:GLU:HG3	1:A:115:MET:H	1	0.56
(1,1875)	1:A:107:LYS:HD3	1:A:108:PRO:HA	1	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1875)	1:A:107:LYS:HD3	1:A:108:PRO:HA	2	0.56
(1,1875)	1:A:107:LYS:HD3	1:A:108:PRO:HA	7	0.56
(1,1875)	1:A:107:LYS:HD3	1:A:108:PRO:HA	12	0.56
(1,1875)	1:A:107:LYS:HD3	1:A:108:PRO:HA	18	0.56
(1,1750)	1:A:91:ASP:H	1:A:91:ASP:HB3	16	0.56
(1,1365)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:211:GLN:HE21	1	0.56
(1,1365)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:211:GLN:HE22	1	0.56
(1,1363)	1:A:205:GLN:HA	1:A:208:ARG:HD3	5	0.56
(1,1361)	1:A:204:THR:HG21	1:A:208:ARG:HD3	6	0.56
(1,1361)	1:A:204:THR:HG22	1:A:208:ARG:HD3	6	0.56
(1,1361)	1:A:204:THR:HG23	1:A:208:ARG:HD3	6	0.56
(1,1325)	1:A:166:LYS:H	1:A:166:LYS:HE3	4	0.56
(1,1270)	1:A:211:GLN:H	1:A:211:GLN:HG3	4	0.56
(1,1218)	1:A:213:SER:HA	1:A:216:LYS:HD3	11	0.56
(1,863)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG11	1	0.55
(1,863)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG12	1	0.55
(1,863)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG13	1	0.55
(1,628)	1:A:111:ILE:HD11	1:A:114:GLU:HB3	8	0.55
(1,628)	1:A:111:ILE:HD12	1:A:114:GLU:HB3	8	0.55
(1,628)	1:A:111:ILE:HD13	1:A:114:GLU:HB3	8	0.55
(1,628)	1:A:111:ILE:HD11	1:A:114:GLU:HB3	15	0.55
(1,628)	1:A:111:ILE:HD12	1:A:114:GLU:HB3	15	0.55
(1,628)	1:A:111:ILE:HD13	1:A:114:GLU:HB3	15	0.55
(1,532)	1:A:171:ILE:HD11	1:A:193:ASN:HB3	10	0.55
(1,532)	1:A:171:ILE:HD12	1:A:193:ASN:HB3	10	0.55
(1,532)	1:A:171:ILE:HD13	1:A:193:ASN:HB3	10	0.55
(1,445)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:H	8	0.55
(1,391)	1:A:230:GLN:H	1:A:230:GLN:HG3	15	0.55
(1,27)	1:A:108:PRO:HD3	1:A:109:GLY:H	7	0.55
(1,2388)	1:A:223:LYS:HD3	1:A:223:LYS:HE3	20	0.55
(1,2385)	1:A:223:LYS:HB3	1:A:226:ARG:HE	16	0.55
(1,2378)	1:A:223:LYS:H	1:A:223:LYS:HG3	6	0.55
(1,2344)	1:A:215:TYR:HD1	1:A:216:LYS:HG3	3	0.55
(1,2344)	1:A:215:TYR:HD2	1:A:216:LYS:HG3	3	0.55
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG11	1:A:207:GLU:HB3	8	0.55
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG12	1:A:207:GLU:HB3	8	0.55
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG13	1:A:207:GLU:HB3	8	0.55
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG21	1:A:207:GLU:HB3	8	0.55
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG22	1:A:207:GLU:HB3	8	0.55
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG23	1:A:207:GLU:HB3	8	0.55
(1,2298)	1:A:200:ARG:HG3	1:A:202:PHE:H	8	0.55
(1,2279)	1:A:196:GLU:HG3	1:A:197:GLU:H	4	0.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2225)	1:A:187:PHE:HB3	1:A:188:ALA:HB1	12	0.55
(1,2225)	1:A:187:PHE:HB3	1:A:188:ALA:HB2	12	0.55
(1,2225)	1:A:187:PHE:HB3	1:A:188:ALA:HB3	12	0.55
(1,2201)	1:A:183:GLU:HA	1:A:183:GLU:HG3	11	0.55
(1,2172)	1:A:177:ASN:HB3	1:A:178:ASN:H	18	0.55
(1,2101)	1:A:166:LYS:HG3	1:A:166:LYS:HE3	16	0.55
(1,2009)	1:A:144:LEU:HD11	1:A:145:ARG:HD3	11	0.55
(1,2009)	1:A:144:LEU:HD12	1:A:145:ARG:HD3	11	0.55
(1,2009)	1:A:144:LEU:HD13	1:A:145:ARG:HD3	11	0.55
(1,2009)	1:A:144:LEU:HD21	1:A:145:ARG:HD3	11	0.55
(1,2009)	1:A:144:LEU:HD22	1:A:145:ARG:HD3	11	0.55
(1,2009)	1:A:144:LEU:HD23	1:A:145:ARG:HD3	11	0.55
(1,2009)	1:A:144:LEU:HD11	1:A:145:ARG:HD3	19	0.55
(1,2009)	1:A:144:LEU:HD12	1:A:145:ARG:HD3	19	0.55
(1,2009)	1:A:144:LEU:HD13	1:A:145:ARG:HD3	19	0.55
(1,2009)	1:A:144:LEU:HD21	1:A:145:ARG:HD3	19	0.55
(1,2009)	1:A:144:LEU:HD22	1:A:145:ARG:HD3	19	0.55
(1,2009)	1:A:144:LEU:HD23	1:A:145:ARG:HD3	19	0.55
(1,1993)	1:A:141:GLU:H	1:A:180:LEU:HB3	14	0.55
(1,1894)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:121:HIS:HE1	2	0.55
(1,1893)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:121:HIS:HD2	16	0.55
(1,1893)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:121:HIS:HD2	19	0.55
(1,1885)	1:A:114:GLU:HG3	1:A:115:MET:H	11	0.55
(1,1883)	1:A:113:ALA:HB1	1:A:114:GLU:HG3	16	0.55
(1,1883)	1:A:113:ALA:HB2	1:A:114:GLU:HG3	16	0.55
(1,1883)	1:A:113:ALA:HB3	1:A:114:GLU:HG3	16	0.55
(1,1875)	1:A:107:LYS:HD3	1:A:108:PRO:HA	13	0.55
(1,1875)	1:A:107:LYS:HD3	1:A:108:PRO:HA	16	0.55
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG11	20	0.55
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG12	20	0.55
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG13	20	0.55
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG21	20	0.55
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG22	20	0.55
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG23	20	0.55
(1,1852)	1:A:101:GLN:HB3	1:A:107:LYS:HG3	16	0.55
(1,1683)	1:A:80:LYS:HE3	1:A:106:ILE:HG21	14	0.55
(1,1683)	1:A:80:LYS:HE3	1:A:106:ILE:HG22	14	0.55
(1,1683)	1:A:80:LYS:HE3	1:A:106:ILE:HG23	14	0.55
(1,1645)	1:A:76:GLU:H	1:A:76:GLU:HG3	8	0.55
(1,147)	1:A:208:ARG:H	1:A:208:ARG:HD3	13	0.55
(1,1341)	1:A:213:SER:HA	1:A:216:LYS:HE3	4	0.55
(1,1218)	1:A:213:SER:HA	1:A:216:LYS:HD3	19	0.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1209)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:221:ILE:HD11	11	0.55
(1,1209)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:221:ILE:HD12	11	0.55
(1,1209)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:221:ILE:HD13	11	0.55
(1,616)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:83:ILE:HD11	10	0.54
(1,616)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:83:ILE:HD12	10	0.54
(1,616)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:83:ILE:HD13	10	0.54
(1,480)	1:A:182:ARG:H	1:A:182:ARG:HD3	12	0.54
(1,332)	1:A:95:ARG:H	1:A:95:ARG:HD3	3	0.54
(1,332)	1:A:95:ARG:H	1:A:95:ARG:HD3	20	0.54
(1,27)	1:A:108:PRO:HD3	1:A:109:GLY:H	10	0.54
(1,2393)	1:A:224:GLU:HB3	1:A:224:GLU:HG3	3	0.54
(1,2388)	1:A:223:LYS:HD3	1:A:223:LYS:HE3	10	0.54
(1,2378)	1:A:223:LYS:H	1:A:223:LYS:HG3	13	0.54
(1,2349)	1:A:216:LYS:HB3	1:A:216:LYS:HE3	10	0.54
(1,2294)	1:A:200:ARG:HA	1:A:200:ARG:HG3	8	0.54
(1,2279)	1:A:196:GLU:HG3	1:A:197:GLU:H	7	0.54
(1,2279)	1:A:196:GLU:HG3	1:A:197:GLU:H	17	0.54
(1,2212)	1:A:184:ARG:HG3	1:A:185:THR:H	19	0.54
(1,2202)	1:A:183:GLU:HB3	1:A:184:ARG:HD3	5	0.54
(1,2201)	1:A:183:GLU:HA	1:A:183:GLU:HG3	4	0.54
(1,2201)	1:A:183:GLU:HA	1:A:183:GLU:HG3	16	0.54
(1,2149)	1:A:176:LEU:H	1:A:197:GLU:HG3	8	0.54
(1,2126)	1:A:171:ILE:HD11	1:A:172:PRO:HG3	1	0.54
(1,2126)	1:A:171:ILE:HD12	1:A:172:PRO:HG3	1	0.54
(1,2126)	1:A:171:ILE:HD13	1:A:172:PRO:HG3	1	0.54
(1,2105)	1:A:167:TYR:H	1:A:221:ILE:HG13	12	0.54
(1,2093)	1:A:164:GLN:HG3	1:A:164:GLN:HE21	1	0.54
(1,2093)	1:A:164:GLN:HG3	1:A:164:GLN:HE22	1	0.54
(1,2093)	1:A:164:GLN:HG3	1:A:164:GLN:HE21	18	0.54
(1,2093)	1:A:164:GLN:HG3	1:A:164:GLN:HE22	18	0.54
(1,2020)	1:A:145:ARG:HB3	1:A:145:ARG:HD3	1	0.54
(1,2019)	1:A:145:ARG:HA	1:A:145:ARG:HD3	6	0.54
(1,2009)	1:A:144:LEU:HD11	1:A:145:ARG:HD3	10	0.54
(1,2009)	1:A:144:LEU:HD12	1:A:145:ARG:HD3	10	0.54
(1,2009)	1:A:144:LEU:HD13	1:A:145:ARG:HD3	10	0.54
(1,2009)	1:A:144:LEU:HD21	1:A:145:ARG:HD3	10	0.54
(1,2009)	1:A:144:LEU:HD22	1:A:145:ARG:HD3	10	0.54
(1,2009)	1:A:144:LEU:HD23	1:A:145:ARG:HD3	10	0.54
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD11	1:A:151:PHE:HB3	6	0.54
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD12	1:A:151:PHE:HB3	6	0.54
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD13	1:A:151:PHE:HB3	6	0.54
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD21	1:A:151:PHE:HB3	6	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD22	1:A:151:PHE:HB3	6	0.54
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD23	1:A:151:PHE:HB3	6	0.54
(1,1875)	1:A:107:LYS:HD3	1:A:108:PRO:HA	10	0.54
(1,1635)	1:A:71:PRO:HB3	1:A:74:SER:HB3	5	0.54
(1,1618)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD1	10	0.54
(1,1618)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD2	10	0.54
(1,1535)	1:A:77:VAL:HA	1:A:78:PHE:HB3	10	0.54
(1,1321)	1:A:166:LYS:HE3	1:A:221:ILE:HG21	13	0.54
(1,1321)	1:A:166:LYS:HE3	1:A:221:ILE:HG22	13	0.54
(1,1321)	1:A:166:LYS:HE3	1:A:221:ILE:HG23	13	0.54
(1,13)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:105:GLY:H	3	0.54
(1,1285)	1:A:75:GLU:H	1:A:75:GLU:HG3	10	0.54
(1,1212)	1:A:166:LYS:HA	1:A:166:LYS:HD3	17	0.54
(1,1210)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:221:ILE:HG21	12	0.54
(1,1210)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:221:ILE:HG22	12	0.54
(1,1210)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:221:ILE:HG23	12	0.54
(1,616)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:83:ILE:HD11	1	0.53
(1,616)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:83:ILE:HD12	1	0.53
(1,616)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:83:ILE:HD13	1	0.53
(1,27)	1:A:108:PRO:HD3	1:A:109:GLY:H	17	0.53
(1,27)	1:A:108:PRO:HD3	1:A:109:GLY:H	19	0.53
(1,2413)	1:A:232:GLN:H	1:A:232:GLN:HG3	9	0.53
(1,2394)	1:A:224:GLU:HG3	1:A:225:THR:H	12	0.53
(1,2390)	1:A:224:GLU:H	1:A:224:GLU:HG3	12	0.53
(1,2388)	1:A:223:LYS:HD3	1:A:223:LYS:HE3	16	0.53
(1,2321)	1:A:208:ARG:HG3	1:A:211:GLN:HE22	11	0.53
(1,2280)	1:A:196:GLU:HG3	1:A:199:SER:HB3	17	0.53
(1,2279)	1:A:196:GLU:HG3	1:A:197:GLU:H	6	0.53
(1,2279)	1:A:196:GLU:HG3	1:A:197:GLU:H	15	0.53
(1,2172)	1:A:177:ASN:HB3	1:A:178:ASN:H	15	0.53
(1,2123)	1:A:171:ILE:HG21	1:A:172:PRO:HD3	2	0.53
(1,2123)	1:A:171:ILE:HG22	1:A:172:PRO:HD3	2	0.53
(1,2123)	1:A:171:ILE:HG23	1:A:172:PRO:HD3	2	0.53
(1,2085)	1:A:163:ARG:HB3	1:A:163:ARG:HD3	11	0.53
(1,2085)	1:A:163:ARG:HB3	1:A:163:ARG:HD3	15	0.53
(1,2021)	1:A:145:ARG:HD3	1:A:146:ASP:H	16	0.53
(1,1893)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:121:HIS:HD2	1	0.53
(1,1893)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:121:HIS:HD2	4	0.53
(1,1893)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:121:HIS:HD2	6	0.53
(1,1885)	1:A:114:GLU:HG3	1:A:115:MET:H	12	0.53
(1,1875)	1:A:107:LYS:HD3	1:A:108:PRO:HA	14	0.53
(1,183)	1:A:207:GLU:H	1:A:207:GLU:HB3	20	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1680)	1:A:80:LYS:HG3	1:A:81:PHE:H	19	0.53
(1,1679)	1:A:80:LYS:HG3	1:A:80:LYS:HE3	4	0.53
(1,1645)	1:A:76:GLU:H	1:A:76:GLU:HG3	13	0.53
(1,1644)	1:A:76:GLU:H	1:A:76:GLU:HB3	2	0.53
(1,1618)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD1	18	0.53
(1,1618)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD2	18	0.53
(1,1341)	1:A:213:SER:HA	1:A:216:LYS:HE3	15	0.53
(1,1339)	1:A:212:GLU:HG3	1:A:216:LYS:HE3	2	0.53
(1,1312)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:H	16	0.53
(1,1270)	1:A:211:GLN:H	1:A:211:GLN:HG3	3	0.53
(1,1270)	1:A:211:GLN:H	1:A:211:GLN:HG3	18	0.53
(1,103)	1:A:197:GLU:HB3	1:A:199:SER:H	11	0.53
(1,391)	1:A:230:GLN:H	1:A:230:GLN:HG3	20	0.52
(1,3)	1:A:80:LYS:HD3	1:A:81:PHE:H	20	0.52
(1,2411)	1:A:230:GLN:HB3	1:A:230:GLN:HE21	16	0.52
(1,2411)	1:A:230:GLN:HB3	1:A:230:GLN:HE22	16	0.52
(1,2396)	1:A:226:ARG:HA	1:A:226:ARG:HD3	20	0.52
(1,2363)	1:A:219:GLN:HG3	1:A:223:LYS:HG3	19	0.52
(1,2350)	1:A:216:LYS:HB3	1:A:217:THR:H	13	0.52
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG11	1:A:207:GLU:HB3	4	0.52
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG12	1:A:207:GLU:HB3	4	0.52
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG13	1:A:207:GLU:HB3	4	0.52
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG21	1:A:207:GLU:HB3	4	0.52
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG22	1:A:207:GLU:HB3	4	0.52
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG23	1:A:207:GLU:HB3	4	0.52
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG11	1:A:207:GLU:HB3	9	0.52
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG12	1:A:207:GLU:HB3	9	0.52
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG13	1:A:207:GLU:HB3	9	0.52
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG21	1:A:207:GLU:HB3	9	0.52
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG22	1:A:207:GLU:HB3	9	0.52
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG23	1:A:207:GLU:HB3	9	0.52
(1,2298)	1:A:200:ARG:HG3	1:A:202:PHE:H	1	0.52
(1,2290)	1:A:198:GLU:HB3	1:A:198:GLU:HG3	19	0.52
(1,2280)	1:A:196:GLU:HG3	1:A:199:SER:HB3	7	0.52
(1,2280)	1:A:196:GLU:HG3	1:A:199:SER:HB3	18	0.52
(1,2280)	1:A:196:GLU:HG3	1:A:199:SER:HB3	19	0.52
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD11	1:A:202:PHE:HB3	7	0.52
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD12	1:A:202:PHE:HB3	7	0.52
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD13	1:A:202:PHE:HB3	7	0.52
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD21	1:A:202:PHE:HB3	7	0.52
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD22	1:A:202:PHE:HB3	7	0.52
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD23	1:A:202:PHE:HB3	7	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD11	1:A:202:PHE:HB3	12	0.52
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD12	1:A:202:PHE:HB3	12	0.52
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD13	1:A:202:PHE:HB3	12	0.52
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD21	1:A:202:PHE:HB3	12	0.52
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD22	1:A:202:PHE:HB3	12	0.52
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD23	1:A:202:PHE:HB3	12	0.52
(1,2201)	1:A:183:GLU:HA	1:A:183:GLU:HG3	12	0.52
(1,2158)	1:A:176:LEU:HB3	1:A:197:GLU:HG3	9	0.52
(1,2085)	1:A:163:ARG:HB3	1:A:163:ARG:HD3	1	0.52
(1,2084)	1:A:163:ARG:HA	1:A:163:ARG:HG3	11	0.52
(1,2083)	1:A:163:ARG:H	1:A:163:ARG:HG3	20	0.52
(1,2082)	1:A:163:ARG:H	1:A:163:ARG:HB3	17	0.52
(1,2006)	1:A:144:LEU:HB3	1:A:180:LEU:HD11	19	0.52
(1,2006)	1:A:144:LEU:HB3	1:A:180:LEU:HD12	19	0.52
(1,2006)	1:A:144:LEU:HB3	1:A:180:LEU:HD13	19	0.52
(1,2006)	1:A:144:LEU:HB3	1:A:180:LEU:HD21	19	0.52
(1,2006)	1:A:144:LEU:HB3	1:A:180:LEU:HD22	19	0.52
(1,2006)	1:A:144:LEU:HB3	1:A:180:LEU:HD23	19	0.52
(1,1998)	1:A:141:GLU:HB3	1:A:142:ASN:H	5	0.52
(1,1968)	1:A:139:LEU:HB3	1:A:189:LEU:HD11	17	0.52
(1,1968)	1:A:139:LEU:HB3	1:A:189:LEU:HD12	17	0.52
(1,1968)	1:A:139:LEU:HB3	1:A:189:LEU:HD13	17	0.52
(1,1968)	1:A:139:LEU:HB3	1:A:189:LEU:HD21	17	0.52
(1,1968)	1:A:139:LEU:HB3	1:A:189:LEU:HD22	17	0.52
(1,1968)	1:A:139:LEU:HB3	1:A:189:LEU:HD23	17	0.52
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD11	1:A:151:PHE:HB3	1	0.52
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD12	1:A:151:PHE:HB3	1	0.52
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD13	1:A:151:PHE:HB3	1	0.52
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD21	1:A:151:PHE:HB3	1	0.52
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD22	1:A:151:PHE:HB3	1	0.52
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD23	1:A:151:PHE:HB3	1	0.52
(1,1893)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:121:HIS:HD2	18	0.52
(1,1889)	1:A:117:HIS:HB3	1:A:117:HIS:HD2	8	0.52
(1,1889)	1:A:117:HIS:HB3	1:A:117:HIS:HD2	16	0.52
(1,1889)	1:A:117:HIS:HB3	1:A:117:HIS:HD2	18	0.52
(1,183)	1:A:207:GLU:H	1:A:207:GLU:HB3	16	0.52
(1,183)	1:A:207:GLU:H	1:A:207:GLU:HB3	17	0.52
(1,1747)	1:A:89:ASP:HB3	1:A:93:ALA:H	4	0.52
(1,1652)	1:A:76:GLU:HG3	1:A:77:VAL:H	8	0.52
(1,1652)	1:A:76:GLU:HG3	1:A:77:VAL:H	14	0.52
(1,1645)	1:A:76:GLU:H	1:A:76:GLU:HG3	3	0.52
(1,1635)	1:A:71:PRO:HB3	1:A:74:SER:HB3	11	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1618)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD1	5	0.52
(1,1618)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD2	5	0.52
(1,1618)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD1	16	0.52
(1,1618)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD2	16	0.52
(1,1355)	1:A:182:ARG:HD3	1:A:190:GLN:HE22	11	0.52
(1,1270)	1:A:211:GLN:H	1:A:211:GLN:HG3	1	0.52
(1,1218)	1:A:213:SER:HA	1:A:216:LYS:HD3	20	0.52
(1,828)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:HB1	16	0.51
(1,828)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:HB2	16	0.51
(1,828)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:HB3	16	0.51
(1,751)	1:A:133:ALA:HB1	1:A:218:GLN:HG3	20	0.51
(1,751)	1:A:133:ALA:HB2	1:A:218:GLN:HG3	20	0.51
(1,751)	1:A:133:ALA:HB3	1:A:218:GLN:HG3	20	0.51
(1,445)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:H	16	0.51
(1,391)	1:A:230:GLN:H	1:A:230:GLN:HG3	11	0.51
(1,332)	1:A:95:ARG:H	1:A:95:ARG:HD3	13	0.51
(1,27)	1:A:108:PRO:HD3	1:A:109:GLY:H	20	0.51
(1,2419)	1:A:234:ILE:HA	1:A:234:ILE:HG13	17	0.51
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG11	1:A:230:GLN:HG3	1	0.51
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG12	1:A:230:GLN:HG3	1	0.51
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG13	1:A:230:GLN:HG3	1	0.51
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG21	1:A:230:GLN:HG3	1	0.51
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG22	1:A:230:GLN:HG3	1	0.51
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG23	1:A:230:GLN:HG3	1	0.51
(1,2387)	1:A:223:LYS:HG3	1:A:224:GLU:H	4	0.51
(1,2330)	1:A:212:GLU:HG3	1:A:216:LYS:HD3	2	0.51
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG11	1:A:207:GLU:HB3	5	0.51
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG12	1:A:207:GLU:HB3	5	0.51
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG13	1:A:207:GLU:HB3	5	0.51
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG21	1:A:207:GLU:HB3	5	0.51
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG22	1:A:207:GLU:HB3	5	0.51
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG23	1:A:207:GLU:HB3	5	0.51
(1,2279)	1:A:196:GLU:HG3	1:A:197:GLU:H	10	0.51
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD11	1:A:202:PHE:HB3	6	0.51
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD12	1:A:202:PHE:HB3	6	0.51
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD13	1:A:202:PHE:HB3	6	0.51
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD21	1:A:202:PHE:HB3	6	0.51
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD22	1:A:202:PHE:HB3	6	0.51
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD23	1:A:202:PHE:HB3	6	0.51
(1,2206)	1:A:184:ARG:H	1:A:184:ARG:HG3	7	0.51
(1,2201)	1:A:183:GLU:HA	1:A:183:GLU:HG3	6	0.51
(1,2201)	1:A:183:GLU:HA	1:A:183:GLU:HG3	7	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2172)	1:A:177:ASN:HB3	1:A:178:ASN:H	12	0.51
(1,2172)	1:A:177:ASN:HB3	1:A:178:ASN:H	17	0.51
(1,2139)	1:A:172:PRO:HD3	1:A:194:ALA:HB1	14	0.51
(1,2139)	1:A:172:PRO:HD3	1:A:194:ALA:HB2	14	0.51
(1,2139)	1:A:172:PRO:HD3	1:A:194:ALA:HB3	14	0.51
(1,2139)	1:A:172:PRO:HD3	1:A:194:ALA:HB1	18	0.51
(1,2139)	1:A:172:PRO:HD3	1:A:194:ALA:HB2	18	0.51
(1,2139)	1:A:172:PRO:HD3	1:A:194:ALA:HB3	18	0.51
(1,2082)	1:A:163:ARG:H	1:A:163:ARG:HB3	1	0.51
(1,2081)	1:A:162:ASN:HB3	1:A:164:GLN:HE21	17	0.51
(1,2081)	1:A:162:ASN:HB3	1:A:164:GLN:HE22	17	0.51
(1,2021)	1:A:145:ARG:HD3	1:A:146:ASP:H	13	0.51
(1,2006)	1:A:144:LEU:HB3	1:A:180:LEU:HD11	9	0.51
(1,2006)	1:A:144:LEU:HB3	1:A:180:LEU:HD12	9	0.51
(1,2006)	1:A:144:LEU:HB3	1:A:180:LEU:HD13	9	0.51
(1,2006)	1:A:144:LEU:HB3	1:A:180:LEU:HD21	9	0.51
(1,2006)	1:A:144:LEU:HB3	1:A:180:LEU:HD22	9	0.51
(1,2006)	1:A:144:LEU:HB3	1:A:180:LEU:HD23	9	0.51
(1,1998)	1:A:141:GLU:HB3	1:A:142:ASN:H	10	0.51
(1,1889)	1:A:117:HIS:HB3	1:A:117:HIS:HD2	20	0.51
(1,1886)	1:A:115:MET:HB3	1:A:115:MET:HE1	18	0.51
(1,1886)	1:A:115:MET:HB3	1:A:115:MET:HE2	18	0.51
(1,1886)	1:A:115:MET:HB3	1:A:115:MET:HE3	18	0.51
(1,1883)	1:A:113:ALA:HB1	1:A:114:GLU:HG3	9	0.51
(1,1883)	1:A:113:ALA:HB2	1:A:114:GLU:HG3	9	0.51
(1,1883)	1:A:113:ALA:HB3	1:A:114:GLU:HG3	9	0.51
(1,1870)	1:A:107:LYS:H	1:A:107:LYS:HB3	15	0.51
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG11	13	0.51
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG12	13	0.51
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG13	13	0.51
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG21	13	0.51
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG22	13	0.51
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG23	13	0.51
(1,1848)	1:A:101:GLN:HA	1:A:107:LYS:HB3	20	0.51
(1,183)	1:A:207:GLU:H	1:A:207:GLU:HB3	4	0.51
(1,183)	1:A:207:GLU:H	1:A:207:GLU:HB3	5	0.51
(1,183)	1:A:207:GLU:H	1:A:207:GLU:HB3	14	0.51
(1,1683)	1:A:80:LYS:HE3	1:A:106:ILE:HG21	7	0.51
(1,1683)	1:A:80:LYS:HE3	1:A:106:ILE:HG22	7	0.51
(1,1683)	1:A:80:LYS:HE3	1:A:106:ILE:HG23	7	0.51
(1,1679)	1:A:80:LYS:HG3	1:A:80:LYS:HE3	10	0.51
(1,1645)	1:A:76:GLU:H	1:A:76:GLU:HG3	6	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1645)	1:A:76:GLU:H	1:A:76:GLU:HG3	17	0.51
(1,147)	1:A:208:ARG:H	1:A:208:ARG:HD3	17	0.51
(1,1365)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:211:GLN:HE21	2	0.51
(1,1365)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:211:GLN:HE22	2	0.51
(1,1361)	1:A:204:THR:HG21	1:A:208:ARG:HD3	13	0.51
(1,1361)	1:A:204:THR:HG22	1:A:208:ARG:HD3	13	0.51
(1,1361)	1:A:204:THR:HG23	1:A:208:ARG:HD3	13	0.51
(1,1333)	1:A:107:LYS:H	1:A:107:LYS:HE3	12	0.51
(1,1303)	1:A:87:GLU:HG3	1:A:88:ASP:HA	16	0.51
(1,13)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:105:GLY:H	12	0.51
(1,1270)	1:A:211:GLN:H	1:A:211:GLN:HG3	8	0.51
(1,1270)	1:A:211:GLN:H	1:A:211:GLN:HG3	9	0.51
(1,1268)	1:A:210:PHE:HA	1:A:211:GLN:HG3	13	0.51
(1,1231)	1:A:111:ILE:HG21	1:A:114:GLU:HB3	9	0.51
(1,1231)	1:A:111:ILE:HG22	1:A:114:GLU:HB3	9	0.51
(1,1231)	1:A:111:ILE:HG23	1:A:114:GLU:HB3	9	0.51
(1,1218)	1:A:213:SER:HA	1:A:216:LYS:HD3	10	0.51
(1,56)	1:A:203:PRO:HG3	1:A:204:THR:H	3	0.5
(1,56)	1:A:203:PRO:HG3	1:A:204:THR:H	16	0.5
(1,391)	1:A:230:GLN:H	1:A:230:GLN:HG3	9	0.5
(1,2415)	1:A:232:GLN:HG3	1:A:232:GLN:HE22	19	0.5
(1,2411)	1:A:230:GLN:HB3	1:A:230:GLN:HE21	19	0.5
(1,2411)	1:A:230:GLN:HB3	1:A:230:GLN:HE22	19	0.5
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG11	1:A:230:GLN:HG3	17	0.5
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG12	1:A:230:GLN:HG3	17	0.5
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG13	1:A:230:GLN:HG3	17	0.5
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG21	1:A:230:GLN:HG3	17	0.5
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG22	1:A:230:GLN:HG3	17	0.5
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG23	1:A:230:GLN:HG3	17	0.5
(1,2378)	1:A:223:LYS:H	1:A:223:LYS:HG3	15	0.5
(1,2344)	1:A:215:TYR:HD1	1:A:216:LYS:HG3	9	0.5
(1,2344)	1:A:215:TYR:HD2	1:A:216:LYS:HG3	9	0.5
(1,2279)	1:A:196:GLU:HG3	1:A:197:GLU:H	14	0.5
(1,2279)	1:A:196:GLU:HG3	1:A:197:GLU:H	19	0.5
(1,2201)	1:A:183:GLU:HA	1:A:183:GLU:HG3	14	0.5
(1,2172)	1:A:177:ASN:HB3	1:A:178:ASN:H	19	0.5
(1,2172)	1:A:177:ASN:HB3	1:A:178:ASN:H	20	0.5
(1,2123)	1:A:171:ILE:HG21	1:A:172:PRO:HD3	19	0.5
(1,2123)	1:A:171:ILE:HG22	1:A:172:PRO:HD3	19	0.5
(1,2123)	1:A:171:ILE:HG23	1:A:172:PRO:HD3	19	0.5
(1,2093)	1:A:164:GLN:HG3	1:A:164:GLN:HE21	14	0.5
(1,2093)	1:A:164:GLN:HG3	1:A:164:GLN:HE22	14	0.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2086)	1:A:163:ARG:HG3	1:A:164:GLN:H	11	0.5
(1,2085)	1:A:163:ARG:HB3	1:A:163:ARG:HD3	6	0.5
(1,2085)	1:A:163:ARG:HB3	1:A:163:ARG:HD3	18	0.5
(1,2082)	1:A:163:ARG:H	1:A:163:ARG:HB3	6	0.5
(1,2082)	1:A:163:ARG:H	1:A:163:ARG:HB3	19	0.5
(1,2037)	1:A:152:GLN:HG3	1:A:153:PHE:H	12	0.5
(1,1992)	1:A:141:GLU:H	1:A:144:LEU:HB3	9	0.5
(1,1936)	1:A:134:TRP:HE1	1:A:169:SER:HB3	3	0.5
(1,1898)	1:A:123:GLN:H	1:A:123:GLN:HG3	14	0.5
(1,1883)	1:A:113:ALA:HB1	1:A:114:GLU:HG3	3	0.5
(1,1883)	1:A:113:ALA:HB2	1:A:114:GLU:HG3	3	0.5
(1,1883)	1:A:113:ALA:HB3	1:A:114:GLU:HG3	3	0.5
(1,1853)	1:A:101:GLN:HB3	1:A:108:PRO:HA	17	0.5
(1,1853)	1:A:101:GLN:HB3	1:A:108:PRO:HA	19	0.5
(1,183)	1:A:207:GLU:H	1:A:207:GLU:HB3	1	0.5
(1,183)	1:A:207:GLU:H	1:A:207:GLU:HB3	2	0.5
(1,183)	1:A:207:GLU:H	1:A:207:GLU:HB3	3	0.5
(1,183)	1:A:207:GLU:H	1:A:207:GLU:HB3	6	0.5
(1,183)	1:A:207:GLU:H	1:A:207:GLU:HB3	8	0.5
(1,183)	1:A:207:GLU:H	1:A:207:GLU:HB3	11	0.5
(1,183)	1:A:207:GLU:H	1:A:207:GLU:HB3	19	0.5
(1,1680)	1:A:80:LYS:HG3	1:A:81:PHE:H	1	0.5
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:108:PRO:HD3	1	0.5
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:108:PRO:HD3	1	0.5
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:108:PRO:HD3	1	0.5
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:108:PRO:HD3	1	0.5
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:108:PRO:HD3	1	0.5
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:108:PRO:HD3	1	0.5
(1,1332)	1:A:101:GLN:HE21	1:A:107:LYS:HE3	5	0.5
(1,1332)	1:A:101:GLN:HE22	1:A:107:LYS:HE3	5	0.5
(1,13)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:105:GLY:H	14	0.5
(1,1276)	1:A:212:GLU:HG3	1:A:216:LYS:HD3	1	0.5
(1,1270)	1:A:211:GLN:H	1:A:211:GLN:HG3	5	0.5
(1,1270)	1:A:211:GLN:H	1:A:211:GLN:HG3	7	0.5
(1,1270)	1:A:211:GLN:H	1:A:211:GLN:HG3	15	0.5
(1,1270)	1:A:211:GLN:H	1:A:211:GLN:HG3	19	0.5
(1,1227)	1:A:223:LYS:H	1:A:223:LYS:HD3	4	0.5
(1,103)	1:A:197:GLU:HB3	1:A:199:SER:H	3	0.5
(1,810)	1:A:173:MET:HE1	1:A:197:GLU:HB3	4	0.49
(1,810)	1:A:173:MET:HE2	1:A:197:GLU:HB3	4	0.49
(1,810)	1:A:173:MET:HE3	1:A:197:GLU:HB3	4	0.49
(1,595)	1:A:158:MET:HG3	1:A:158:MET:HE1	6	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,595)	1:A:158:MET:HG3	1:A:158:MET:HE2	6	0.49
(1,595)	1:A:158:MET:HG3	1:A:158:MET:HE3	6	0.49
(1,595)	1:A:158:MET:HG3	1:A:158:MET:HE1	12	0.49
(1,595)	1:A:158:MET:HG3	1:A:158:MET:HE2	12	0.49
(1,595)	1:A:158:MET:HG3	1:A:158:MET:HE3	12	0.49
(1,595)	1:A:158:MET:HG3	1:A:158:MET:HE1	18	0.49
(1,595)	1:A:158:MET:HG3	1:A:158:MET:HE2	18	0.49
(1,595)	1:A:158:MET:HG3	1:A:158:MET:HE3	18	0.49
(1,595)	1:A:158:MET:HG3	1:A:158:MET:HE1	20	0.49
(1,595)	1:A:158:MET:HG3	1:A:158:MET:HE2	20	0.49
(1,595)	1:A:158:MET:HG3	1:A:158:MET:HE3	20	0.49
(1,56)	1:A:203:PRO:HG3	1:A:204:THR:H	4	0.49
(1,56)	1:A:203:PRO:HG3	1:A:204:THR:H	11	0.49
(1,478)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:182:ARG:H	18	0.49
(1,2419)	1:A:234:ILE:HA	1:A:234:ILE:HG13	12	0.49
(1,2396)	1:A:226:ARG:HA	1:A:226:ARG:HD3	6	0.49
(1,2391)	1:A:224:GLU:HA	1:A:224:GLU:HG3	20	0.49
(1,2381)	1:A:223:LYS:HA	1:A:226:ARG:HB3	6	0.49
(1,2378)	1:A:223:LYS:H	1:A:223:LYS:HG3	4	0.49
(1,2331)	1:A:212:GLU:HG3	1:A:216:LYS:HE3	13	0.49
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG11	1:A:207:GLU:HB3	7	0.49
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG12	1:A:207:GLU:HB3	7	0.49
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG13	1:A:207:GLU:HB3	7	0.49
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG21	1:A:207:GLU:HB3	7	0.49
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG22	1:A:207:GLU:HB3	7	0.49
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG23	1:A:207:GLU:HB3	7	0.49
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG11	1:A:207:GLU:HB3	17	0.49
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG12	1:A:207:GLU:HB3	17	0.49
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG13	1:A:207:GLU:HB3	17	0.49
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG21	1:A:207:GLU:HB3	17	0.49
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG22	1:A:207:GLU:HB3	17	0.49
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG23	1:A:207:GLU:HB3	17	0.49
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD11	1:A:202:PHE:HB3	4	0.49
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD12	1:A:202:PHE:HB3	4	0.49
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD13	1:A:202:PHE:HB3	4	0.49
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD21	1:A:202:PHE:HB3	4	0.49
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD22	1:A:202:PHE:HB3	4	0.49
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD23	1:A:202:PHE:HB3	4	0.49
(1,2201)	1:A:183:GLU:HA	1:A:183:GLU:HG3	15	0.49
(1,2159)	1:A:176:LEU:HG	1:A:198:GLU:HG3	2	0.49
(1,2159)	1:A:176:LEU:HG	1:A:198:GLU:HG3	7	0.49
(1,2159)	1:A:176:LEU:HG	1:A:198:GLU:HG3	10	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2132)	1:A:172:PRO:HG3	1:A:192:ILE:HG21	3	0.49
(1,2132)	1:A:172:PRO:HG3	1:A:192:ILE:HG22	3	0.49
(1,2132)	1:A:172:PRO:HG3	1:A:192:ILE:HG23	3	0.49
(1,2101)	1:A:166:LYS:HG3	1:A:166:LYS:HE3	4	0.49
(1,2085)	1:A:163:ARG:HB3	1:A:163:ARG:HD3	9	0.49
(1,2082)	1:A:163:ARG:H	1:A:163:ARG:HB3	18	0.49
(1,2009)	1:A:144:LEU:HD11	1:A:145:ARG:HD3	15	0.49
(1,2009)	1:A:144:LEU:HD12	1:A:145:ARG:HD3	15	0.49
(1,2009)	1:A:144:LEU:HD13	1:A:145:ARG:HD3	15	0.49
(1,2009)	1:A:144:LEU:HD21	1:A:145:ARG:HD3	15	0.49
(1,2009)	1:A:144:LEU:HD22	1:A:145:ARG:HD3	15	0.49
(1,2009)	1:A:144:LEU:HD23	1:A:145:ARG:HD3	15	0.49
(1,2004)	1:A:144:LEU:HA	1:A:148:TRP:HB3	3	0.49
(1,1998)	1:A:141:GLU:HB3	1:A:142:ASN:H	17	0.49
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG11	16	0.49
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG12	16	0.49
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG13	16	0.49
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG21	16	0.49
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG22	16	0.49
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG23	16	0.49
(1,183)	1:A:207:GLU:H	1:A:207:GLU:HB3	9	0.49
(1,183)	1:A:207:GLU:H	1:A:207:GLU:HB3	13	0.49
(1,183)	1:A:207:GLU:H	1:A:207:GLU:HB3	15	0.49
(1,1743)	1:A:89:ASP:H	1:A:89:ASP:HB3	19	0.49
(1,1718)	1:A:84:LEU:HB3	1:A:137:LEU:HD11	4	0.49
(1,1718)	1:A:84:LEU:HB3	1:A:137:LEU:HD12	4	0.49
(1,1718)	1:A:84:LEU:HB3	1:A:137:LEU:HD13	4	0.49
(1,1718)	1:A:84:LEU:HB3	1:A:137:LEU:HD21	4	0.49
(1,1718)	1:A:84:LEU:HB3	1:A:137:LEU:HD22	4	0.49
(1,1718)	1:A:84:LEU:HB3	1:A:137:LEU:HD23	4	0.49
(1,1675)	1:A:80:LYS:H	1:A:80:LYS:HE3	1	0.49
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:108:PRO:HD3	20	0.49
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:108:PRO:HD3	20	0.49
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:108:PRO:HD3	20	0.49
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:108:PRO:HD3	20	0.49
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:108:PRO:HD3	20	0.49
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:108:PRO:HD3	20	0.49
(1,1653)	1:A:76:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG11	12	0.49
(1,1653)	1:A:76:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG12	12	0.49
(1,1653)	1:A:76:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG13	12	0.49
(1,1652)	1:A:76:GLU:HG3	1:A:77:VAL:H	5	0.49
(1,1647)	1:A:76:GLU:HA	1:A:76:GLU:HG3	10	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,147)	1:A:208:ARG:H	1:A:208:ARG:HD3	6	0.49
(1,1363)	1:A:205:GLN:HA	1:A:208:ARG:HD3	4	0.49
(1,1324)	1:A:166:LYS:HA	1:A:166:LYS:HE3	4	0.49
(1,1270)	1:A:211:GLN:H	1:A:211:GLN:HG3	2	0.49
(1,1270)	1:A:211:GLN:H	1:A:211:GLN:HG3	11	0.49
(1,1270)	1:A:211:GLN:H	1:A:211:GLN:HG3	12	0.49
(1,1270)	1:A:211:GLN:H	1:A:211:GLN:HG3	14	0.49
(1,1218)	1:A:213:SER:HA	1:A:216:LYS:HD3	17	0.49
(1,1212)	1:A:166:LYS:HA	1:A:166:LYS:HD3	8	0.49
(1,922)	1:A:217:THR:HG21	1:A:218:GLN:HG3	16	0.48
(1,922)	1:A:217:THR:HG22	1:A:218:GLN:HG3	16	0.48
(1,922)	1:A:217:THR:HG23	1:A:218:GLN:HG3	16	0.48
(1,56)	1:A:203:PRO:HG3	1:A:204:THR:H	6	0.48
(1,56)	1:A:203:PRO:HG3	1:A:204:THR:H	13	0.48
(1,391)	1:A:230:GLN:H	1:A:230:GLN:HG3	6	0.48
(1,2414)	1:A:232:GLN:HA	1:A:232:GLN:HG3	12	0.48
(1,2391)	1:A:224:GLU:HA	1:A:224:GLU:HG3	15	0.48
(1,2363)	1:A:219:GLN:HG3	1:A:223:LYS:HG3	3	0.48
(1,2352)	1:A:216:LYS:HG3	1:A:217:THR:H	8	0.48
(1,2352)	1:A:216:LYS:HG3	1:A:217:THR:H	20	0.48
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG11	1:A:207:GLU:HB3	1	0.48
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG12	1:A:207:GLU:HB3	1	0.48
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG13	1:A:207:GLU:HB3	1	0.48
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG21	1:A:207:GLU:HB3	1	0.48
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG22	1:A:207:GLU:HB3	1	0.48
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG23	1:A:207:GLU:HB3	1	0.48
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG11	1:A:207:GLU:HB3	2	0.48
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG12	1:A:207:GLU:HB3	2	0.48
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG13	1:A:207:GLU:HB3	2	0.48
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG21	1:A:207:GLU:HB3	2	0.48
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG22	1:A:207:GLU:HB3	2	0.48
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG23	1:A:207:GLU:HB3	2	0.48
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG11	1:A:207:GLU:HB3	16	0.48
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG12	1:A:207:GLU:HB3	16	0.48
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG13	1:A:207:GLU:HB3	16	0.48
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG21	1:A:207:GLU:HB3	16	0.48
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG22	1:A:207:GLU:HB3	16	0.48
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG23	1:A:207:GLU:HB3	16	0.48
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG11	1:A:207:GLU:HB3	20	0.48
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG12	1:A:207:GLU:HB3	20	0.48
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG13	1:A:207:GLU:HB3	20	0.48
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG21	1:A:207:GLU:HB3	20	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG22	1:A:207:GLU:HB3	20	0.48
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG23	1:A:207:GLU:HB3	20	0.48
(1,2296)	1:A:200:ARG:HG3	1:A:200:ARG:HD3	13	0.48
(1,2244)	1:A:192:ILE:HG13	1:A:193:ASN:H	10	0.48
(1,2126)	1:A:171:ILE:HD11	1:A:172:PRO:HG3	9	0.48
(1,2126)	1:A:171:ILE:HD12	1:A:172:PRO:HG3	9	0.48
(1,2126)	1:A:171:ILE:HD13	1:A:172:PRO:HG3	9	0.48
(1,2101)	1:A:166:LYS:HG3	1:A:166:LYS:HE3	20	0.48
(1,2083)	1:A:163:ARG:H	1:A:163:ARG:HG3	11	0.48
(1,2082)	1:A:163:ARG:H	1:A:163:ARG:HB3	9	0.48
(1,2082)	1:A:163:ARG:H	1:A:163:ARG:HB3	11	0.48
(1,2082)	1:A:163:ARG:H	1:A:163:ARG:HB3	13	0.48
(1,2020)	1:A:145:ARG:HB3	1:A:145:ARG:HD3	4	0.48
(1,2020)	1:A:145:ARG:HB3	1:A:145:ARG:HD3	8	0.48
(1,2020)	1:A:145:ARG:HB3	1:A:145:ARG:HD3	9	0.48
(1,2020)	1:A:145:ARG:HB3	1:A:145:ARG:HD3	17	0.48
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD11	1:A:151:PHE:HB3	3	0.48
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD12	1:A:151:PHE:HB3	3	0.48
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD13	1:A:151:PHE:HB3	3	0.48
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD21	1:A:151:PHE:HB3	3	0.48
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD22	1:A:151:PHE:HB3	3	0.48
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD23	1:A:151:PHE:HB3	3	0.48
(1,1894)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:121:HIS:HE1	15	0.48
(1,1856)	1:A:101:GLN:HG3	1:A:109:GLY:H	8	0.48
(1,1855)	1:A:101:GLN:HG3	1:A:102:ASP:H	7	0.48
(1,183)	1:A:207:GLU:H	1:A:207:GLU:HB3	7	0.48
(1,179)	1:A:95:ARG:HD3	1:A:98:ASN:H	12	0.48
(1,1645)	1:A:76:GLU:H	1:A:76:GLU:HG3	18	0.48
(1,1644)	1:A:76:GLU:H	1:A:76:GLU:HB3	9	0.48
(1,1619)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD1	7	0.48
(1,1619)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD2	7	0.48
(1,1618)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD1	19	0.48
(1,1618)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD2	19	0.48
(1,1595)	1:A:220:THR:HA	1:A:223:LYS:HD3	11	0.48
(1,1535)	1:A:77:VAL:HA	1:A:78:PHE:HB3	8	0.48
(1,1521)	1:A:182:ARG:HA	1:A:182:ARG:HD3	15	0.48
(1,1499)	1:A:223:LYS:HA	1:A:223:LYS:HD3	11	0.48
(1,1354)	1:A:182:ARG:HB3	1:A:182:ARG:HD3	2	0.48
(1,1342)	1:A:215:TYR:HD1	1:A:216:LYS:HE3	16	0.48
(1,1342)	1:A:215:TYR:HD2	1:A:216:LYS:HE3	16	0.48
(1,1340)	1:A:216:LYS:HA	1:A:216:LYS:HE3	16	0.48
(1,1333)	1:A:107:LYS:H	1:A:107:LYS:HE3	14	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1324)	1:A:166:LYS:HA	1:A:166:LYS:HE3	3	0.48
(1,1304)	1:A:87:GLU:H	1:A:87:GLU:HG3	5	0.48
(1,1304)	1:A:87:GLU:H	1:A:87:GLU:HG3	7	0.48
(1,1270)	1:A:211:GLN:H	1:A:211:GLN:HG3	20	0.48
(1,1231)	1:A:111:ILE:HG21	1:A:114:GLU:HB3	13	0.48
(1,1231)	1:A:111:ILE:HG22	1:A:114:GLU:HB3	13	0.48
(1,1231)	1:A:111:ILE:HG23	1:A:114:GLU:HB3	13	0.48
(1,628)	1:A:111:ILE:HD11	1:A:114:GLU:HB3	16	0.47
(1,628)	1:A:111:ILE:HD12	1:A:114:GLU:HB3	16	0.47
(1,628)	1:A:111:ILE:HD13	1:A:114:GLU:HB3	16	0.47
(1,595)	1:A:158:MET:HG3	1:A:158:MET:HE1	1	0.47
(1,595)	1:A:158:MET:HG3	1:A:158:MET:HE2	1	0.47
(1,595)	1:A:158:MET:HG3	1:A:158:MET:HE3	1	0.47
(1,478)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:182:ARG:H	4	0.47
(1,478)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:182:ARG:H	11	0.47
(1,478)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:182:ARG:H	12	0.47
(1,391)	1:A:230:GLN:H	1:A:230:GLN:HG3	4	0.47
(1,391)	1:A:230:GLN:H	1:A:230:GLN:HG3	12	0.47
(1,2419)	1:A:234:ILE:HA	1:A:234:ILE:HG13	4	0.47
(1,2391)	1:A:224:GLU:HA	1:A:224:GLU:HG3	7	0.47
(1,2378)	1:A:223:LYS:H	1:A:223:LYS:HG3	16	0.47
(1,2368)	1:A:219:GLN:HE21	1:A:223:LYS:HD3	8	0.47
(1,2368)	1:A:219:GLN:HE22	1:A:223:LYS:HD3	8	0.47
(1,2352)	1:A:216:LYS:HG3	1:A:217:THR:H	2	0.47
(1,2352)	1:A:216:LYS:HG3	1:A:217:THR:H	17	0.47
(1,2350)	1:A:216:LYS:HB3	1:A:217:THR:H	9	0.47
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG11	1:A:207:GLU:HB3	15	0.47
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG12	1:A:207:GLU:HB3	15	0.47
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG13	1:A:207:GLU:HB3	15	0.47
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG21	1:A:207:GLU:HB3	15	0.47
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG22	1:A:207:GLU:HB3	15	0.47
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG23	1:A:207:GLU:HB3	15	0.47
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD11	1:A:202:PHE:HB3	5	0.47
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD12	1:A:202:PHE:HB3	5	0.47
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD13	1:A:202:PHE:HB3	5	0.47
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD21	1:A:202:PHE:HB3	5	0.47
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD22	1:A:202:PHE:HB3	5	0.47
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD23	1:A:202:PHE:HB3	5	0.47
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD11	1:A:202:PHE:HB3	14	0.47
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD12	1:A:202:PHE:HB3	14	0.47
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD13	1:A:202:PHE:HB3	14	0.47
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD21	1:A:202:PHE:HB3	14	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD22	1:A:202:PHE:HB3	14	0.47
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD23	1:A:202:PHE:HB3	14	0.47
(1,2206)	1:A:184:ARG:H	1:A:184:ARG:HG3	20	0.47
(1,2159)	1:A:176:LEU:HG	1:A:198:GLU:HG3	3	0.47
(1,2159)	1:A:176:LEU:HG	1:A:198:GLU:HG3	11	0.47
(1,2126)	1:A:171:ILE:HD11	1:A:172:PRO:HG3	12	0.47
(1,2126)	1:A:171:ILE:HD12	1:A:172:PRO:HG3	12	0.47
(1,2126)	1:A:171:ILE:HD13	1:A:172:PRO:HG3	12	0.47
(1,2123)	1:A:171:ILE:HG21	1:A:172:PRO:HD3	7	0.47
(1,2123)	1:A:171:ILE:HG22	1:A:172:PRO:HD3	7	0.47
(1,2123)	1:A:171:ILE:HG23	1:A:172:PRO:HD3	7	0.47
(1,2084)	1:A:163:ARG:HA	1:A:163:ARG:HG3	8	0.47
(1,2084)	1:A:163:ARG:HA	1:A:163:ARG:HG3	14	0.47
(1,2082)	1:A:163:ARG:H	1:A:163:ARG:HB3	2	0.47
(1,2020)	1:A:145:ARG:HB3	1:A:145:ARG:HD3	7	0.47
(1,1898)	1:A:123:GLN:H	1:A:123:GLN:HG3	2	0.47
(1,1898)	1:A:123:GLN:H	1:A:123:GLN:HG3	13	0.47
(1,1898)	1:A:123:GLN:H	1:A:123:GLN:HG3	16	0.47
(1,1893)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:121:HIS:HD2	10	0.47
(1,1885)	1:A:114:GLU:HG3	1:A:115:MET:H	19	0.47
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG11	8	0.47
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG12	8	0.47
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG13	8	0.47
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG21	8	0.47
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG22	8	0.47
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG23	8	0.47
(1,1856)	1:A:101:GLN:HG3	1:A:109:GLY:H	10	0.47
(1,183)	1:A:207:GLU:H	1:A:207:GLU:HB3	10	0.47
(1,1751)	1:A:91:ASP:H	1:A:92:GLU:HB3	19	0.47
(1,1743)	1:A:89:ASP:H	1:A:89:ASP:HB3	13	0.47
(1,1739)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:88:ASP:H	15	0.47
(1,1683)	1:A:80:LYS:HE3	1:A:106:ILE:HG21	8	0.47
(1,1683)	1:A:80:LYS:HE3	1:A:106:ILE:HG22	8	0.47
(1,1683)	1:A:80:LYS:HE3	1:A:106:ILE:HG23	8	0.47
(1,1680)	1:A:80:LYS:HG3	1:A:81:PHE:H	2	0.47
(1,1641)	1:A:74:SER:HA	1:A:74:SER:HB3	3	0.47
(1,1641)	1:A:74:SER:HA	1:A:74:SER:HB3	17	0.47
(1,1580)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HA	18	0.47
(1,1580)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HA	19	0.47
(1,1361)	1:A:204:THR:HG21	1:A:208:ARG:HD3	9	0.47
(1,1361)	1:A:204:THR:HG22	1:A:208:ARG:HD3	9	0.47
(1,1361)	1:A:204:THR:HG23	1:A:208:ARG:HD3	9	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1359)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HD11	12	0.47
(1,1359)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HD12	12	0.47
(1,1359)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HD13	12	0.47
(1,1304)	1:A:87:GLU:H	1:A:87:GLU:HG3	2	0.47
(1,1304)	1:A:87:GLU:H	1:A:87:GLU:HG3	16	0.47
(1,1304)	1:A:87:GLU:H	1:A:87:GLU:HG3	18	0.47
(1,1304)	1:A:87:GLU:H	1:A:87:GLU:HG3	20	0.47
(1,13)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:105:GLY:H	9	0.47
(1,13)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:105:GLY:H	10	0.47
(1,1270)	1:A:211:GLN:H	1:A:211:GLN:HG3	17	0.47
(1,1213)	1:A:165:HIS:HA	1:A:166:LYS:HD3	6	0.47
(1,1210)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:221:ILE:HG21	19	0.47
(1,1210)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:221:ILE:HG22	19	0.47
(1,1210)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:221:ILE:HG23	19	0.47
(1,100)	1:A:145:ARG:HB3	1:A:146:ASP:H	11	0.47
(1,863)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG11	12	0.46
(1,863)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG12	12	0.46
(1,863)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG13	12	0.46
(1,628)	1:A:111:ILE:HD11	1:A:114:GLU:HB3	20	0.46
(1,628)	1:A:111:ILE:HD12	1:A:114:GLU:HB3	20	0.46
(1,628)	1:A:111:ILE:HD13	1:A:114:GLU:HB3	20	0.46
(1,478)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:182:ARG:H	20	0.46
(1,2402)	1:A:227:ASN:HB3	1:A:228:MET:H	13	0.46
(1,2396)	1:A:226:ARG:HA	1:A:226:ARG:HD3	13	0.46
(1,2392)	1:A:224:GLU:HA	1:A:227:ASN:HB3	13	0.46
(1,2344)	1:A:215:TYR:HD1	1:A:216:LYS:HG3	12	0.46
(1,2344)	1:A:215:TYR:HD2	1:A:216:LYS:HG3	12	0.46
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD11	1:A:202:PHE:HB3	9	0.46
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD12	1:A:202:PHE:HB3	9	0.46
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD13	1:A:202:PHE:HB3	9	0.46
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD21	1:A:202:PHE:HB3	9	0.46
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD22	1:A:202:PHE:HB3	9	0.46
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD23	1:A:202:PHE:HB3	9	0.46
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD11	1:A:202:PHE:HB3	15	0.46
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD12	1:A:202:PHE:HB3	15	0.46
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD13	1:A:202:PHE:HB3	15	0.46
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD21	1:A:202:PHE:HB3	15	0.46
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD22	1:A:202:PHE:HB3	15	0.46
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD23	1:A:202:PHE:HB3	15	0.46
(1,2240)	1:A:190:GLN:HG3	1:A:191:THR:HG21	10	0.46
(1,2240)	1:A:190:GLN:HG3	1:A:191:THR:HG22	10	0.46
(1,2240)	1:A:190:GLN:HG3	1:A:191:THR:HG23	10	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2210)	1:A:184:ARG:HB3	1:A:185:THR:H	12	0.46
(1,2204)	1:A:183:GLU:HG3	1:A:184:ARG:HG3	3	0.46
(1,2159)	1:A:176:LEU:HG	1:A:198:GLU:HG3	6	0.46
(1,2123)	1:A:171:ILE:HG21	1:A:172:PRO:HD3	9	0.46
(1,2123)	1:A:171:ILE:HG22	1:A:172:PRO:HD3	9	0.46
(1,2123)	1:A:171:ILE:HG23	1:A:172:PRO:HD3	9	0.46
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD11	1:A:158:MET:HG3	10	0.46
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD12	1:A:158:MET:HG3	10	0.46
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD13	1:A:158:MET:HG3	10	0.46
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD21	1:A:158:MET:HG3	10	0.46
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD22	1:A:158:MET:HG3	10	0.46
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD23	1:A:158:MET:HG3	10	0.46
(1,2037)	1:A:152:GLN:HG3	1:A:153:PHE:H	16	0.46
(1,2004)	1:A:144:LEU:HA	1:A:148:TRP:HB3	9	0.46
(1,1934)	1:A:132:SER:HB3	1:A:134:TRP:H	12	0.46
(1,1893)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:121:HIS:HD2	11	0.46
(1,1893)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:121:HIS:HD2	12	0.46
(1,1870)	1:A:107:LYS:H	1:A:107:LYS:HB3	19	0.46
(1,1855)	1:A:101:GLN:HG3	1:A:102:ASP:H	6	0.46
(1,183)	1:A:207:GLU:H	1:A:207:GLU:HB3	18	0.46
(1,1737)	1:A:86:ALA:HB1	1:A:88:ASP:HB3	18	0.46
(1,1737)	1:A:86:ALA:HB2	1:A:88:ASP:HB3	18	0.46
(1,1737)	1:A:86:ALA:HB3	1:A:88:ASP:HB3	18	0.46
(1,1652)	1:A:76:GLU:HG3	1:A:77:VAL:H	3	0.46
(1,1645)	1:A:76:GLU:H	1:A:76:GLU:HG3	12	0.46
(1,1641)	1:A:74:SER:HA	1:A:74:SER:HB3	1	0.46
(1,1641)	1:A:74:SER:HA	1:A:74:SER:HB3	5	0.46
(1,1641)	1:A:74:SER:HA	1:A:74:SER:HB3	6	0.46
(1,1641)	1:A:74:SER:HA	1:A:74:SER:HB3	15	0.46
(1,1641)	1:A:74:SER:HA	1:A:74:SER:HB3	16	0.46
(1,1635)	1:A:71:PRO:HB3	1:A:74:SER:HB3	10	0.46
(1,1618)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD1	9	0.46
(1,1618)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD2	9	0.46
(1,1603)	1:A:146:ASP:HB3	1:A:147:THR:HB	16	0.46
(1,1595)	1:A:220:THR:HA	1:A:223:LYS:HD3	13	0.46
(1,147)	1:A:208:ARG:H	1:A:208:ARG:HD3	11	0.46
(1,1363)	1:A:205:GLN:HA	1:A:208:ARG:HD3	11	0.46
(1,1361)	1:A:204:THR:HG21	1:A:208:ARG:HD3	16	0.46
(1,1361)	1:A:204:THR:HG22	1:A:208:ARG:HD3	16	0.46
(1,1361)	1:A:204:THR:HG23	1:A:208:ARG:HD3	16	0.46
(1,1339)	1:A:212:GLU:HG3	1:A:216:LYS:HE3	17	0.46
(1,1337)	1:A:216:LYS:HD3	1:A:216:LYS:HE3	3	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1337)	1:A:216:LYS:HD3	1:A:216:LYS:HE3	6	0.46
(1,1304)	1:A:87:GLU:H	1:A:87:GLU:HG3	4	0.46
(1,1304)	1:A:87:GLU:H	1:A:87:GLU:HG3	17	0.46
(1,1270)	1:A:211:GLN:H	1:A:211:GLN:HG3	10	0.46
(1,1231)	1:A:111:ILE:HG21	1:A:114:GLU:HB3	15	0.46
(1,1231)	1:A:111:ILE:HG22	1:A:114:GLU:HB3	15	0.46
(1,1231)	1:A:111:ILE:HG23	1:A:114:GLU:HB3	15	0.46
(1,1220)	1:A:216:LYS:HD3	1:A:217:THR:H	16	0.46
(1,1218)	1:A:213:SER:HA	1:A:216:LYS:HD3	6	0.46
(1,1218)	1:A:213:SER:HA	1:A:216:LYS:HD3	15	0.46
(1,673)	1:A:115:MET:HA	1:A:115:MET:HE1	9	0.45
(1,673)	1:A:115:MET:HA	1:A:115:MET:HE2	9	0.45
(1,673)	1:A:115:MET:HA	1:A:115:MET:HE3	9	0.45
(1,673)	1:A:115:MET:HA	1:A:115:MET:HE1	14	0.45
(1,673)	1:A:115:MET:HA	1:A:115:MET:HE2	14	0.45
(1,673)	1:A:115:MET:HA	1:A:115:MET:HE3	14	0.45
(1,616)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:83:ILE:HD11	12	0.45
(1,616)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:83:ILE:HD12	12	0.45
(1,616)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:83:ILE:HD13	12	0.45
(1,595)	1:A:158:MET:HG3	1:A:158:MET:HE1	9	0.45
(1,595)	1:A:158:MET:HG3	1:A:158:MET:HE2	9	0.45
(1,595)	1:A:158:MET:HG3	1:A:158:MET:HE3	9	0.45
(1,56)	1:A:203:PRO:HG3	1:A:204:THR:H	5	0.45
(1,56)	1:A:203:PRO:HG3	1:A:204:THR:H	9	0.45
(1,478)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:182:ARG:H	6	0.45
(1,391)	1:A:230:GLN:H	1:A:230:GLN:HG3	8	0.45
(1,262)	1:A:183:GLU:HB3	1:A:185:THR:H	7	0.45
(1,2419)	1:A:234:ILE:HA	1:A:234:ILE:HG13	5	0.45
(1,2415)	1:A:232:GLN:HG3	1:A:232:GLN:HE22	15	0.45
(1,2414)	1:A:232:GLN:HA	1:A:232:GLN:HG3	11	0.45
(1,2411)	1:A:230:GLN:HB3	1:A:230:GLN:HE21	3	0.45
(1,2411)	1:A:230:GLN:HB3	1:A:230:GLN:HE22	3	0.45
(1,2402)	1:A:227:ASN:HB3	1:A:228:MET:H	20	0.45
(1,2391)	1:A:224:GLU:HA	1:A:224:GLU:HG3	14	0.45
(1,2363)	1:A:219:GLN:HG3	1:A:223:LYS:HG3	7	0.45
(1,2286)	1:A:198:GLU:H	1:A:198:GLU:HB3	18	0.45
(1,2280)	1:A:196:GLU:HG3	1:A:199:SER:HB3	1	0.45
(1,2279)	1:A:196:GLU:HG3	1:A:197:GLU:H	2	0.45
(1,2279)	1:A:196:GLU:HG3	1:A:197:GLU:H	3	0.45
(1,2172)	1:A:177:ASN:HB3	1:A:178:ASN:H	7	0.45
(1,2159)	1:A:176:LEU:HG	1:A:198:GLU:HG3	12	0.45
(1,2086)	1:A:163:ARG:HG3	1:A:164:GLN:H	20	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2082)	1:A:163:ARG:H	1:A:163:ARG:HB3	12	0.45
(1,2059)	1:A:159:ASN:HB3	1:A:160:SER:H	2	0.45
(1,2057)	1:A:159:ASN:HA	1:A:162:ASN:HB3	13	0.45
(1,2021)	1:A:145:ARG:HD3	1:A:146:ASP:H	2	0.45
(1,1889)	1:A:117:HIS:HB3	1:A:117:HIS:HD2	4	0.45
(1,1889)	1:A:117:HIS:HB3	1:A:117:HIS:HD2	12	0.45
(1,1883)	1:A:113:ALA:HB1	1:A:114:GLU:HG3	20	0.45
(1,1883)	1:A:113:ALA:HB2	1:A:114:GLU:HG3	20	0.45
(1,1883)	1:A:113:ALA:HB3	1:A:114:GLU:HG3	20	0.45
(1,1852)	1:A:101:GLN:HB3	1:A:107:LYS:HG3	12	0.45
(1,1743)	1:A:89:ASP:H	1:A:89:ASP:HB3	9	0.45
(1,1681)	1:A:80:LYS:HG3	1:A:106:ILE:HG21	12	0.45
(1,1681)	1:A:80:LYS:HG3	1:A:106:ILE:HG22	12	0.45
(1,1681)	1:A:80:LYS:HG3	1:A:106:ILE:HG23	12	0.45
(1,1676)	1:A:80:LYS:HA	1:A:80:LYS:HG3	6	0.45
(1,1653)	1:A:76:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG11	3	0.45
(1,1653)	1:A:76:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG12	3	0.45
(1,1653)	1:A:76:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG13	3	0.45
(1,1653)	1:A:76:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG11	8	0.45
(1,1653)	1:A:76:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG12	8	0.45
(1,1653)	1:A:76:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG13	8	0.45
(1,1653)	1:A:76:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG11	18	0.45
(1,1653)	1:A:76:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG12	18	0.45
(1,1653)	1:A:76:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG13	18	0.45
(1,1653)	1:A:76:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG11	19	0.45
(1,1653)	1:A:76:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG12	19	0.45
(1,1653)	1:A:76:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG13	19	0.45
(1,1652)	1:A:76:GLU:HG3	1:A:77:VAL:H	12	0.45
(1,1645)	1:A:76:GLU:H	1:A:76:GLU:HG3	7	0.45
(1,1641)	1:A:74:SER:HA	1:A:74:SER:HB3	9	0.45
(1,1619)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD1	2	0.45
(1,1619)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD2	2	0.45
(1,1618)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD1	13	0.45
(1,1618)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD2	13	0.45
(1,1580)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HA	1	0.45
(1,1499)	1:A:223:LYS:HA	1:A:223:LYS:HD3	17	0.45
(1,147)	1:A:208:ARG:H	1:A:208:ARG:HD3	5	0.45
(1,1337)	1:A:216:LYS:HD3	1:A:216:LYS:HE3	2	0.45
(1,1337)	1:A:216:LYS:HD3	1:A:216:LYS:HE3	9	0.45
(1,1337)	1:A:216:LYS:HD3	1:A:216:LYS:HE3	11	0.45
(1,1337)	1:A:216:LYS:HD3	1:A:216:LYS:HE3	13	0.45
(1,1337)	1:A:216:LYS:HD3	1:A:216:LYS:HE3	16	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1337)	1:A:216:LYS:HD3	1:A:216:LYS:HE3	17	0.45
(1,1337)	1:A:216:LYS:HD3	1:A:216:LYS:HE3	19	0.45
(1,1337)	1:A:216:LYS:HD3	1:A:216:LYS:HE3	20	0.45
(1,1312)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:H	10	0.45
(1,1284)	1:A:75:GLU:HB3	1:A:75:GLU:HG3	1	0.45
(1,1284)	1:A:75:GLU:HB3	1:A:75:GLU:HG3	16	0.45
(1,1284)	1:A:75:GLU:HB3	1:A:75:GLU:HG3	20	0.45
(1,628)	1:A:111:ILE:HD11	1:A:114:GLU:HB3	3	0.44
(1,628)	1:A:111:ILE:HD12	1:A:114:GLU:HB3	3	0.44
(1,628)	1:A:111:ILE:HD13	1:A:114:GLU:HB3	3	0.44
(1,56)	1:A:203:PRO:HG3	1:A:204:THR:H	8	0.44
(1,553)	1:A:218:GLN:HG3	1:A:221:ILE:HD11	8	0.44
(1,553)	1:A:218:GLN:HG3	1:A:221:ILE:HD12	8	0.44
(1,553)	1:A:218:GLN:HG3	1:A:221:ILE:HD13	8	0.44
(1,478)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:182:ARG:H	8	0.44
(1,43)	1:A:182:ARG:HB3	1:A:190:GLN:HE22	5	0.44
(1,391)	1:A:230:GLN:H	1:A:230:GLN:HG3	14	0.44
(1,320)	1:A:144:LEU:H	1:A:145:ARG:HG3	4	0.44
(1,2415)	1:A:232:GLN:HG3	1:A:232:GLN:HE22	4	0.44
(1,2414)	1:A:232:GLN:HA	1:A:232:GLN:HG3	10	0.44
(1,2411)	1:A:230:GLN:HB3	1:A:230:GLN:HE21	1	0.44
(1,2411)	1:A:230:GLN:HB3	1:A:230:GLN:HE22	1	0.44
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG11	1:A:230:GLN:HG3	3	0.44
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG12	1:A:230:GLN:HG3	3	0.44
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG13	1:A:230:GLN:HG3	3	0.44
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG21	1:A:230:GLN:HG3	3	0.44
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG22	1:A:230:GLN:HG3	3	0.44
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG23	1:A:230:GLN:HG3	3	0.44
(1,2391)	1:A:224:GLU:HA	1:A:224:GLU:HG3	1	0.44
(1,2387)	1:A:223:LYS:HG3	1:A:224:GLU:H	15	0.44
(1,2379)	1:A:223:LYS:H	1:A:223:LYS:HE3	11	0.44
(1,2378)	1:A:223:LYS:H	1:A:223:LYS:HG3	20	0.44
(1,2352)	1:A:216:LYS:HG3	1:A:217:THR:H	6	0.44
(1,2331)	1:A:212:GLU:HG3	1:A:216:LYS:HE3	9	0.44
(1,2277)	1:A:196:GLU:HB3	1:A:196:GLU:HG3	18	0.44
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD11	1:A:202:PHE:HB3	19	0.44
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD12	1:A:202:PHE:HB3	19	0.44
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD13	1:A:202:PHE:HB3	19	0.44
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD21	1:A:202:PHE:HB3	19	0.44
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD22	1:A:202:PHE:HB3	19	0.44
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD23	1:A:202:PHE:HB3	19	0.44
(1,2248)	1:A:194:ALA:HB1	1:A:196:GLU:HG3	12	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2248)	1:A:194:ALA:HB2	1:A:196:GLU:HG3	12	0.44
(1,2248)	1:A:194:ALA:HB3	1:A:196:GLU:HG3	12	0.44
(1,2201)	1:A:183:GLU:HA	1:A:183:GLU:HG3	3	0.44
(1,2159)	1:A:176:LEU:HG	1:A:198:GLU:HG3	16	0.44
(1,2139)	1:A:172:PRO:HD3	1:A:194:ALA:HB1	8	0.44
(1,2139)	1:A:172:PRO:HD3	1:A:194:ALA:HB2	8	0.44
(1,2139)	1:A:172:PRO:HD3	1:A:194:ALA:HB3	8	0.44
(1,2086)	1:A:163:ARG:HG3	1:A:164:GLN:H	18	0.44
(1,2082)	1:A:163:ARG:H	1:A:163:ARG:HB3	4	0.44
(1,2021)	1:A:145:ARG:HD3	1:A:146:ASP:H	3	0.44
(1,1968)	1:A:139:LEU:HB3	1:A:189:LEU:HD11	6	0.44
(1,1968)	1:A:139:LEU:HB3	1:A:189:LEU:HD12	6	0.44
(1,1968)	1:A:139:LEU:HB3	1:A:189:LEU:HD13	6	0.44
(1,1968)	1:A:139:LEU:HB3	1:A:189:LEU:HD21	6	0.44
(1,1968)	1:A:139:LEU:HB3	1:A:189:LEU:HD22	6	0.44
(1,1968)	1:A:139:LEU:HB3	1:A:189:LEU:HD23	6	0.44
(1,1889)	1:A:117:HIS:HB3	1:A:117:HIS:HD2	13	0.44
(1,1883)	1:A:113:ALA:HB1	1:A:114:GLU:HG3	12	0.44
(1,1883)	1:A:113:ALA:HB2	1:A:114:GLU:HG3	12	0.44
(1,1883)	1:A:113:ALA:HB3	1:A:114:GLU:HG3	12	0.44
(1,1870)	1:A:107:LYS:H	1:A:107:LYS:HB3	17	0.44
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG11	6	0.44
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG12	6	0.44
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG13	6	0.44
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG21	6	0.44
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG22	6	0.44
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG23	6	0.44
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG11	15	0.44
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG12	15	0.44
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG13	15	0.44
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG21	15	0.44
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG22	15	0.44
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG23	15	0.44
(1,1739)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:88:ASP:H	14	0.44
(1,1681)	1:A:80:LYS:HG3	1:A:106:ILE:HG21	18	0.44
(1,1681)	1:A:80:LYS:HG3	1:A:106:ILE:HG22	18	0.44
(1,1681)	1:A:80:LYS:HG3	1:A:106:ILE:HG23	18	0.44
(1,1652)	1:A:76:GLU:HG3	1:A:77:VAL:H	18	0.44
(1,1647)	1:A:76:GLU:HA	1:A:76:GLU:HG3	4	0.44
(1,1645)	1:A:76:GLU:H	1:A:76:GLU:HG3	14	0.44
(1,1618)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD1	12	0.44
(1,1618)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD2	12	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1580)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HA	12	0.44
(1,1580)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HA	15	0.44
(1,1521)	1:A:182:ARG:HA	1:A:182:ARG:HD3	13	0.44
(1,147)	1:A:208:ARG:H	1:A:208:ARG:HD3	8	0.44
(1,1363)	1:A:205:GLN:HA	1:A:208:ARG:HD3	20	0.44
(1,1361)	1:A:204:THR:HG21	1:A:208:ARG:HD3	17	0.44
(1,1361)	1:A:204:THR:HG22	1:A:208:ARG:HD3	17	0.44
(1,1361)	1:A:204:THR:HG23	1:A:208:ARG:HD3	17	0.44
(1,1337)	1:A:216:LYS:HD3	1:A:216:LYS:HE3	14	0.44
(1,1332)	1:A:101:GLN:HE21	1:A:107:LYS:HE3	2	0.44
(1,1332)	1:A:101:GLN:HE22	1:A:107:LYS:HE3	2	0.44
(1,1304)	1:A:87:GLU:H	1:A:87:GLU:HG3	1	0.44
(1,1284)	1:A:75:GLU:HB3	1:A:75:GLU:HG3	3	0.44
(1,1231)	1:A:111:ILE:HG21	1:A:114:GLU:HB3	17	0.44
(1,1231)	1:A:111:ILE:HG22	1:A:114:GLU:HB3	17	0.44
(1,1231)	1:A:111:ILE:HG23	1:A:114:GLU:HB3	17	0.44
(1,1225)	1:A:223:LYS:HD3	1:A:226:ARG:HE	13	0.44
(1,1218)	1:A:213:SER:HA	1:A:216:LYS:HD3	4	0.44
(1,1218)	1:A:213:SER:HA	1:A:216:LYS:HD3	7	0.44
(1,100)	1:A:145:ARG:HB3	1:A:146:ASP:H	9	0.44
(1,856)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG21	7	0.43
(1,856)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG22	7	0.43
(1,856)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG23	7	0.43
(1,642)	1:A:209:ILE:HG21	1:A:210:PHE:HB3	10	0.43
(1,642)	1:A:209:ILE:HG22	1:A:210:PHE:HB3	10	0.43
(1,642)	1:A:209:ILE:HG23	1:A:210:PHE:HB3	10	0.43
(1,616)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:83:ILE:HD11	11	0.43
(1,616)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:83:ILE:HD12	11	0.43
(1,616)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:83:ILE:HD13	11	0.43
(1,56)	1:A:203:PRO:HG3	1:A:204:THR:H	19	0.43
(1,56)	1:A:203:PRO:HG3	1:A:204:THR:H	20	0.43
(1,478)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:182:ARG:H	1	0.43
(1,2391)	1:A:224:GLU:HA	1:A:224:GLU:HG3	12	0.43
(1,2383)	1:A:223:LYS:HB3	1:A:223:LYS:HD3	1	0.43
(1,2383)	1:A:223:LYS:HB3	1:A:223:LYS:HD3	9	0.43
(1,2383)	1:A:223:LYS:HB3	1:A:223:LYS:HD3	12	0.43
(1,2383)	1:A:223:LYS:HB3	1:A:223:LYS:HD3	14	0.43
(1,2351)	1:A:216:LYS:HG3	1:A:216:LYS:HE3	10	0.43
(1,2349)	1:A:216:LYS:HB3	1:A:216:LYS:HE3	6	0.43
(1,2330)	1:A:212:GLU:HG3	1:A:216:LYS:HD3	6	0.43
(1,2279)	1:A:196:GLU:HG3	1:A:197:GLU:H	16	0.43
(1,2210)	1:A:184:ARG:HB3	1:A:185:THR:H	17	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2126)	1:A:171:ILE:HD11	1:A:172:PRO:HG3	20	0.43
(1,2126)	1:A:171:ILE:HD12	1:A:172:PRO:HG3	20	0.43
(1,2126)	1:A:171:ILE:HD13	1:A:172:PRO:HG3	20	0.43
(1,2123)	1:A:171:ILE:HG21	1:A:172:PRO:HD3	15	0.43
(1,2123)	1:A:171:ILE:HG22	1:A:172:PRO:HD3	15	0.43
(1,2123)	1:A:171:ILE:HG23	1:A:172:PRO:HD3	15	0.43
(1,2113)	1:A:169:SER:HB3	1:A:170:VAL:H	7	0.43
(1,2101)	1:A:166:LYS:HG3	1:A:166:LYS:HE3	13	0.43
(1,2079)	1:A:162:ASN:H	1:A:164:GLN:HG3	6	0.43
(1,2021)	1:A:145:ARG:HD3	1:A:146:ASP:H	18	0.43
(1,1889)	1:A:117:HIS:HB3	1:A:117:HIS:HD2	9	0.43
(1,1889)	1:A:117:HIS:HB3	1:A:117:HIS:HD2	19	0.43
(1,1885)	1:A:114:GLU:HG3	1:A:115:MET:H	15	0.43
(1,1883)	1:A:113:ALA:HB1	1:A:114:GLU:HG3	4	0.43
(1,1883)	1:A:113:ALA:HB2	1:A:114:GLU:HG3	4	0.43
(1,1883)	1:A:113:ALA:HB3	1:A:114:GLU:HG3	4	0.43
(1,1883)	1:A:113:ALA:HB1	1:A:114:GLU:HG3	6	0.43
(1,1883)	1:A:113:ALA:HB2	1:A:114:GLU:HG3	6	0.43
(1,1883)	1:A:113:ALA:HB3	1:A:114:GLU:HG3	6	0.43
(1,1883)	1:A:113:ALA:HB1	1:A:114:GLU:HG3	10	0.43
(1,1883)	1:A:113:ALA:HB2	1:A:114:GLU:HG3	10	0.43
(1,1883)	1:A:113:ALA:HB3	1:A:114:GLU:HG3	10	0.43
(1,183)	1:A:207:GLU:H	1:A:207:GLU:HB3	12	0.43
(1,1679)	1:A:80:LYS:HG3	1:A:80:LYS:HE3	20	0.43
(1,1652)	1:A:76:GLU:HG3	1:A:77:VAL:H	6	0.43
(1,1649)	1:A:76:GLU:HB3	1:A:77:VAL:H	6	0.43
(1,1618)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD1	15	0.43
(1,1618)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD2	15	0.43
(1,1572)	1:A:221:ILE:HA	1:A:224:GLU:HB3	16	0.43
(1,1355)	1:A:182:ARG:HD3	1:A:190:GLN:HE22	1	0.43
(1,1304)	1:A:87:GLU:H	1:A:87:GLU:HG3	3	0.43
(1,1284)	1:A:75:GLU:HB3	1:A:75:GLU:HG3	2	0.43
(1,1284)	1:A:75:GLU:HB3	1:A:75:GLU:HG3	15	0.43
(1,1231)	1:A:111:ILE:HG21	1:A:114:GLU:HB3	2	0.43
(1,1231)	1:A:111:ILE:HG22	1:A:114:GLU:HB3	2	0.43
(1,1231)	1:A:111:ILE:HG23	1:A:114:GLU:HB3	2	0.43
(1,1226)	1:A:223:LYS:HD3	1:A:224:GLU:H	17	0.43
(1,84)	1:A:197:GLU:HB3	1:A:198:GLU:H	18	0.42
(1,828)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:HB1	10	0.42
(1,828)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:HB2	10	0.42
(1,828)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:HB3	10	0.42
(1,828)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:HB1	15	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,828)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:HB2	15	0.42
(1,828)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:HB3	15	0.42
(1,79)	1:A:98:ASN:HB3	1:A:98:ASN:HD22	8	0.42
(1,751)	1:A:133:ALA:HB1	1:A:218:GLN:HG3	9	0.42
(1,751)	1:A:133:ALA:HB2	1:A:218:GLN:HG3	9	0.42
(1,751)	1:A:133:ALA:HB3	1:A:218:GLN:HG3	9	0.42
(1,628)	1:A:111:ILE:HD11	1:A:114:GLU:HB3	7	0.42
(1,628)	1:A:111:ILE:HD12	1:A:114:GLU:HB3	7	0.42
(1,628)	1:A:111:ILE:HD13	1:A:114:GLU:HB3	7	0.42
(1,628)	1:A:111:ILE:HD11	1:A:114:GLU:HB3	14	0.42
(1,628)	1:A:111:ILE:HD12	1:A:114:GLU:HB3	14	0.42
(1,628)	1:A:111:ILE:HD13	1:A:114:GLU:HB3	14	0.42
(1,616)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:83:ILE:HD11	9	0.42
(1,616)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:83:ILE:HD12	9	0.42
(1,616)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:83:ILE:HD13	9	0.42
(1,478)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:182:ARG:H	7	0.42
(1,332)	1:A:95:ARG:H	1:A:95:ARG:HD3	15	0.42
(1,2414)	1:A:232:GLN:HA	1:A:232:GLN:HG3	5	0.42
(1,2413)	1:A:232:GLN:H	1:A:232:GLN:HG3	10	0.42
(1,2391)	1:A:224:GLU:HA	1:A:224:GLU:HG3	6	0.42
(1,2385)	1:A:223:LYS:HB3	1:A:226:ARG:HE	6	0.42
(1,2381)	1:A:223:LYS:HA	1:A:226:ARG:HB3	1	0.42
(1,2381)	1:A:223:LYS:HA	1:A:226:ARG:HB3	7	0.42
(1,2322)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG11	16	0.42
(1,2322)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG12	16	0.42
(1,2322)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG13	16	0.42
(1,2322)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG21	16	0.42
(1,2322)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG22	16	0.42
(1,2322)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG23	16	0.42
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG11	1:A:207:GLU:HB3	3	0.42
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG12	1:A:207:GLU:HB3	3	0.42
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG13	1:A:207:GLU:HB3	3	0.42
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG21	1:A:207:GLU:HB3	3	0.42
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG22	1:A:207:GLU:HB3	3	0.42
(1,2314)	1:A:206:VAL:HG23	1:A:207:GLU:HB3	3	0.42
(1,2297)	1:A:200:ARG:HG3	1:A:201:GLY:H	2	0.42
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD11	1:A:202:PHE:HB3	3	0.42
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD12	1:A:202:PHE:HB3	3	0.42
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD13	1:A:202:PHE:HB3	3	0.42
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD21	1:A:202:PHE:HB3	3	0.42
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD22	1:A:202:PHE:HB3	3	0.42
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD23	1:A:202:PHE:HB3	3	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2210)	1:A:184:ARG:HB3	1:A:185:THR:H	6	0.42
(1,2201)	1:A:183:GLU:HA	1:A:183:GLU:HG3	2	0.42
(1,2201)	1:A:183:GLU:HA	1:A:183:GLU:HG3	13	0.42
(1,2084)	1:A:163:ARG:HA	1:A:163:ARG:HG3	6	0.42
(1,2084)	1:A:163:ARG:HA	1:A:163:ARG:HG3	18	0.42
(1,2082)	1:A:163:ARG:H	1:A:163:ARG:HB3	10	0.42
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD11	1:A:158:MET:HG3	18	0.42
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD12	1:A:158:MET:HG3	18	0.42
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD13	1:A:158:MET:HG3	18	0.42
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD21	1:A:158:MET:HG3	18	0.42
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD22	1:A:158:MET:HG3	18	0.42
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD23	1:A:158:MET:HG3	18	0.42
(1,2004)	1:A:144:LEU:HA	1:A:148:TRP:HB3	11	0.42
(1,1998)	1:A:141:GLU:HB3	1:A:142:ASN:H	8	0.42
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD11	1:A:151:PHE:HB3	8	0.42
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD12	1:A:151:PHE:HB3	8	0.42
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD13	1:A:151:PHE:HB3	8	0.42
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD21	1:A:151:PHE:HB3	8	0.42
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD22	1:A:151:PHE:HB3	8	0.42
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD23	1:A:151:PHE:HB3	8	0.42
(1,1883)	1:A:113:ALA:HB1	1:A:114:GLU:HG3	2	0.42
(1,1883)	1:A:113:ALA:HB2	1:A:114:GLU:HG3	2	0.42
(1,1883)	1:A:113:ALA:HB3	1:A:114:GLU:HG3	2	0.42
(1,1683)	1:A:80:LYS:HE3	1:A:106:ILE:HG21	5	0.42
(1,1683)	1:A:80:LYS:HE3	1:A:106:ILE:HG22	5	0.42
(1,1683)	1:A:80:LYS:HE3	1:A:106:ILE:HG23	5	0.42
(1,1650)	1:A:76:GLU:HB3	1:A:222:TRP:HZ2	10	0.42
(1,1649)	1:A:76:GLU:HB3	1:A:77:VAL:H	13	0.42
(1,1645)	1:A:76:GLU:H	1:A:76:GLU:HG3	19	0.42
(1,1643)	1:A:75:GLU:HB3	1:A:76:GLU:H	7	0.42
(1,1580)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HA	10	0.42
(1,145)	1:A:207:GLU:HB3	1:A:208:ARG:H	19	0.42
(1,1435)	1:A:75:GLU:HA	1:A:75:GLU:HG3	10	0.42
(1,1343)	1:A:216:LYS:H	1:A:216:LYS:HE3	14	0.42
(1,1337)	1:A:216:LYS:HD3	1:A:216:LYS:HE3	15	0.42
(1,1325)	1:A:166:LYS:H	1:A:166:LYS:HE3	13	0.42
(1,1304)	1:A:87:GLU:H	1:A:87:GLU:HG3	19	0.42
(1,13)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:105:GLY:H	2	0.42
(1,13)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:105:GLY:H	11	0.42
(1,1284)	1:A:75:GLU:HB3	1:A:75:GLU:HG3	5	0.42
(1,1284)	1:A:75:GLU:HB3	1:A:75:GLU:HG3	12	0.42
(1,1284)	1:A:75:GLU:HB3	1:A:75:GLU:HG3	13	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1231)	1:A:111:ILE:HG21	1:A:114:GLU:HB3	19	0.42
(1,1231)	1:A:111:ILE:HG22	1:A:114:GLU:HB3	19	0.42
(1,1231)	1:A:111:ILE:HG23	1:A:114:GLU:HB3	19	0.42
(1,1226)	1:A:223:LYS:HD3	1:A:224:GLU:H	11	0.42
(1,103)	1:A:197:GLU:HB3	1:A:199:SER:H	5	0.42
(1,856)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG21	6	0.41
(1,856)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG22	6	0.41
(1,856)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG23	6	0.41
(1,856)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG21	8	0.41
(1,856)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG22	8	0.41
(1,856)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG23	8	0.41
(1,810)	1:A:173:MET:HE1	1:A:197:GLU:HB3	14	0.41
(1,810)	1:A:173:MET:HE2	1:A:197:GLU:HB3	14	0.41
(1,810)	1:A:173:MET:HE3	1:A:197:GLU:HB3	14	0.41
(1,753)	1:A:133:ALA:HB1	1:A:215:TYR:HB3	13	0.41
(1,753)	1:A:133:ALA:HB2	1:A:215:TYR:HB3	13	0.41
(1,753)	1:A:133:ALA:HB3	1:A:215:TYR:HB3	13	0.41
(1,595)	1:A:158:MET:HG3	1:A:158:MET:HE1	2	0.41
(1,595)	1:A:158:MET:HG3	1:A:158:MET:HE2	2	0.41
(1,595)	1:A:158:MET:HG3	1:A:158:MET:HE3	2	0.41
(1,595)	1:A:158:MET:HG3	1:A:158:MET:HE1	7	0.41
(1,595)	1:A:158:MET:HG3	1:A:158:MET:HE2	7	0.41
(1,595)	1:A:158:MET:HG3	1:A:158:MET:HE3	7	0.41
(1,478)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:182:ARG:H	9	0.41
(1,391)	1:A:230:GLN:H	1:A:230:GLN:HG3	10	0.41
(1,262)	1:A:183:GLU:HB3	1:A:185:THR:H	10	0.41
(1,2413)	1:A:232:GLN:H	1:A:232:GLN:HG3	15	0.41
(1,2411)	1:A:230:GLN:HB3	1:A:230:GLN:HE21	17	0.41
(1,2411)	1:A:230:GLN:HB3	1:A:230:GLN:HE22	17	0.41
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG11	1:A:230:GLN:HG3	2	0.41
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG12	1:A:230:GLN:HG3	2	0.41
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG13	1:A:230:GLN:HG3	2	0.41
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG21	1:A:230:GLN:HG3	2	0.41
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG22	1:A:230:GLN:HG3	2	0.41
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG23	1:A:230:GLN:HG3	2	0.41
(1,2394)	1:A:224:GLU:HG3	1:A:225:THR:H	3	0.41
(1,2394)	1:A:224:GLU:HG3	1:A:225:THR:H	8	0.41
(1,2391)	1:A:224:GLU:HA	1:A:224:GLU:HG3	11	0.41
(1,2391)	1:A:224:GLU:HA	1:A:224:GLU:HG3	17	0.41
(1,2351)	1:A:216:LYS:HG3	1:A:216:LYS:HE3	1	0.41
(1,2349)	1:A:216:LYS:HB3	1:A:216:LYS:HE3	17	0.41
(1,2297)	1:A:200:ARG:HG3	1:A:201:GLY:H	4	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2212)	1:A:184:ARG:HG3	1:A:185:THR:H	10	0.41
(1,2204)	1:A:183:GLU:HG3	1:A:184:ARG:HG3	1	0.41
(1,2204)	1:A:183:GLU:HG3	1:A:184:ARG:HG3	5	0.41
(1,2149)	1:A:176:LEU:H	1:A:197:GLU:HG3	10	0.41
(1,2123)	1:A:171:ILE:HG21	1:A:172:PRO:HD3	8	0.41
(1,2123)	1:A:171:ILE:HG22	1:A:172:PRO:HD3	8	0.41
(1,2123)	1:A:171:ILE:HG23	1:A:172:PRO:HD3	8	0.41
(1,2096)	1:A:166:LYS:H	1:A:166:LYS:HG3	16	0.41
(1,2091)	1:A:164:GLN:HB3	1:A:164:GLN:HE21	13	0.41
(1,2091)	1:A:164:GLN:HB3	1:A:164:GLN:HE22	13	0.41
(1,1936)	1:A:134:TRP:HE1	1:A:169:SER:HB3	8	0.41
(1,1914)	1:A:125:LEU:HD11	1:A:157:LEU:HB3	6	0.41
(1,1914)	1:A:125:LEU:HD12	1:A:157:LEU:HB3	6	0.41
(1,1914)	1:A:125:LEU:HD13	1:A:157:LEU:HB3	6	0.41
(1,1914)	1:A:125:LEU:HD21	1:A:157:LEU:HB3	6	0.41
(1,1914)	1:A:125:LEU:HD22	1:A:157:LEU:HB3	6	0.41
(1,1914)	1:A:125:LEU:HD23	1:A:157:LEU:HB3	6	0.41
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD11	1:A:151:PHE:HB3	20	0.41
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD12	1:A:151:PHE:HB3	20	0.41
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD13	1:A:151:PHE:HB3	20	0.41
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD21	1:A:151:PHE:HB3	20	0.41
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD22	1:A:151:PHE:HB3	20	0.41
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD23	1:A:151:PHE:HB3	20	0.41
(1,1870)	1:A:107:LYS:H	1:A:107:LYS:HB3	20	0.41
(1,1866)	1:A:105:GLY:HA2	1:A:107:LYS:HE3	15	0.41
(1,1866)	1:A:105:GLY:HA3	1:A:107:LYS:HE3	15	0.41
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG11	5	0.41
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG12	5	0.41
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG13	5	0.41
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG21	5	0.41
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG22	5	0.41
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG23	5	0.41
(1,1739)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:88:ASP:H	9	0.41
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:108:PRO:HD3	13	0.41
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:108:PRO:HD3	13	0.41
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:108:PRO:HD3	13	0.41
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:108:PRO:HD3	13	0.41
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:108:PRO:HD3	13	0.41
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:108:PRO:HD3	13	0.41
(1,1649)	1:A:76:GLU:HB3	1:A:77:VAL:H	3	0.41
(1,1649)	1:A:76:GLU:HB3	1:A:77:VAL:H	5	0.41
(1,1649)	1:A:76:GLU:HB3	1:A:77:VAL:H	12	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1649)	1:A:76:GLU:HB3	1:A:77:VAL:H	18	0.41
(1,1580)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HA	3	0.41
(1,1580)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HA	9	0.41
(1,1499)	1:A:223:LYS:HA	1:A:223:LYS:HD3	13	0.41
(1,145)	1:A:207:GLU:HB3	1:A:208:ARG:H	4	0.41
(1,1366)	1:A:70:GLY:HA2	1:A:71:PRO:HG3	16	0.41
(1,1366)	1:A:70:GLY:HA3	1:A:71:PRO:HG3	16	0.41
(1,1360)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HG13	1	0.41
(1,1359)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HD11	15	0.41
(1,1359)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HD12	15	0.41
(1,1359)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HD13	15	0.41
(1,1337)	1:A:216:LYS:HD3	1:A:216:LYS:HE3	4	0.41
(1,1329)	1:A:101:GLN:HA	1:A:107:LYS:HE3	3	0.41
(1,1323)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:166:LYS:HE3	1	0.41
(1,1323)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:166:LYS:HE3	18	0.41
(1,1321)	1:A:166:LYS:HE3	1:A:221:ILE:HG21	3	0.41
(1,1321)	1:A:166:LYS:HE3	1:A:221:ILE:HG22	3	0.41
(1,1321)	1:A:166:LYS:HE3	1:A:221:ILE:HG23	3	0.41
(1,1312)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:H	14	0.41
(1,1284)	1:A:75:GLU:HB3	1:A:75:GLU:HG3	19	0.41
(1,1231)	1:A:111:ILE:HG21	1:A:114:GLU:HB3	10	0.41
(1,1231)	1:A:111:ILE:HG22	1:A:114:GLU:HB3	10	0.41
(1,1231)	1:A:111:ILE:HG23	1:A:114:GLU:HB3	10	0.41
(1,1225)	1:A:223:LYS:HD3	1:A:226:ARG:HE	3	0.41
(1,100)	1:A:145:ARG:HB3	1:A:146:ASP:H	12	0.41
(1,863)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG11	19	0.4
(1,863)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG12	19	0.4
(1,863)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG13	19	0.4
(1,828)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:HB1	14	0.4
(1,828)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:HB2	14	0.4
(1,828)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:HB3	14	0.4
(1,79)	1:A:98:ASN:HB3	1:A:98:ASN:HD22	20	0.4
(1,595)	1:A:158:MET:HG3	1:A:158:MET:HE1	14	0.4
(1,595)	1:A:158:MET:HG3	1:A:158:MET:HE2	14	0.4
(1,595)	1:A:158:MET:HG3	1:A:158:MET:HE3	14	0.4
(1,595)	1:A:158:MET:HG3	1:A:158:MET:HE1	16	0.4
(1,595)	1:A:158:MET:HG3	1:A:158:MET:HE2	16	0.4
(1,595)	1:A:158:MET:HG3	1:A:158:MET:HE3	16	0.4
(1,595)	1:A:158:MET:HG3	1:A:158:MET:HE1	19	0.4
(1,595)	1:A:158:MET:HG3	1:A:158:MET:HE2	19	0.4
(1,595)	1:A:158:MET:HG3	1:A:158:MET:HE3	19	0.4
(1,478)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:182:ARG:H	13	0.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2419)	1:A:234:ILE:HA	1:A:234:ILE:HG13	6	0.4
(1,2415)	1:A:232:GLN:HG3	1:A:232:GLN:HE22	2	0.4
(1,2387)	1:A:223:LYS:HG3	1:A:224:GLU:H	13	0.4
(1,2387)	1:A:223:LYS:HG3	1:A:224:GLU:H	16	0.4
(1,2363)	1:A:219:GLN:HG3	1:A:223:LYS:HG3	13	0.4
(1,2349)	1:A:216:LYS:HB3	1:A:216:LYS:HE3	9	0.4
(1,2296)	1:A:200:ARG:HG3	1:A:200:ARG:HD3	9	0.4
(1,2293)	1:A:199:SER:HB3	1:A:202:PHE:HB3	8	0.4
(1,2279)	1:A:196:GLU:HG3	1:A:197:GLU:H	9	0.4
(1,2201)	1:A:183:GLU:HA	1:A:183:GLU:HG3	1	0.4
(1,2193)	1:A:180:LEU:HD11	1:A:184:ARG:HD3	14	0.4
(1,2193)	1:A:180:LEU:HD12	1:A:184:ARG:HD3	14	0.4
(1,2193)	1:A:180:LEU:HD13	1:A:184:ARG:HD3	14	0.4
(1,2193)	1:A:180:LEU:HD21	1:A:184:ARG:HD3	14	0.4
(1,2193)	1:A:180:LEU:HD22	1:A:184:ARG:HD3	14	0.4
(1,2193)	1:A:180:LEU:HD23	1:A:184:ARG:HD3	14	0.4
(1,2147)	1:A:175:PRO:HA	1:A:197:GLU:HG3	5	0.4
(1,2147)	1:A:175:PRO:HA	1:A:197:GLU:HG3	6	0.4
(1,2135)	1:A:172:PRO:HD3	1:A:192:ILE:HB	15	0.4
(1,2096)	1:A:166:LYS:H	1:A:166:LYS:HG3	15	0.4
(1,2082)	1:A:163:ARG:H	1:A:163:ARG:HB3	7	0.4
(1,2082)	1:A:163:ARG:H	1:A:163:ARG:HB3	16	0.4
(1,2057)	1:A:159:ASN:HA	1:A:162:ASN:HB3	12	0.4
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD11	1:A:158:MET:HG3	2	0.4
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD12	1:A:158:MET:HG3	2	0.4
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD13	1:A:158:MET:HG3	2	0.4
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD21	1:A:158:MET:HG3	2	0.4
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD22	1:A:158:MET:HG3	2	0.4
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD23	1:A:158:MET:HG3	2	0.4
(1,2035)	1:A:152:GLN:H	1:A:152:GLN:HG3	4	0.4
(1,1936)	1:A:134:TRP:HE1	1:A:169:SER:HB3	1	0.4
(1,1936)	1:A:134:TRP:HE1	1:A:169:SER:HB3	15	0.4
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD11	1:A:151:PHE:HB3	16	0.4
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD12	1:A:151:PHE:HB3	16	0.4
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD13	1:A:151:PHE:HB3	16	0.4
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD21	1:A:151:PHE:HB3	16	0.4
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD22	1:A:151:PHE:HB3	16	0.4
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD23	1:A:151:PHE:HB3	16	0.4
(1,1895)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:122:LEU:HD11	19	0.4
(1,1895)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:122:LEU:HD12	19	0.4
(1,1895)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:122:LEU:HD13	19	0.4
(1,1895)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:122:LEU:HD21	19	0.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1895)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:122:LEU:HD22	19	0.4
(1,1895)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:122:LEU:HD23	19	0.4
(1,1886)	1:A:115:MET:HB3	1:A:115:MET:HE1	11	0.4
(1,1886)	1:A:115:MET:HB3	1:A:115:MET:HE2	11	0.4
(1,1886)	1:A:115:MET:HB3	1:A:115:MET:HE3	11	0.4
(1,1886)	1:A:115:MET:HB3	1:A:115:MET:HE1	15	0.4
(1,1886)	1:A:115:MET:HB3	1:A:115:MET:HE2	15	0.4
(1,1886)	1:A:115:MET:HB3	1:A:115:MET:HE3	15	0.4
(1,1774)	1:A:94:LEU:HD11	1:A:97:GLN:HB3	20	0.4
(1,1774)	1:A:94:LEU:HD12	1:A:97:GLN:HB3	20	0.4
(1,1774)	1:A:94:LEU:HD13	1:A:97:GLN:HB3	20	0.4
(1,1774)	1:A:94:LEU:HD21	1:A:97:GLN:HB3	20	0.4
(1,1774)	1:A:94:LEU:HD22	1:A:97:GLN:HB3	20	0.4
(1,1774)	1:A:94:LEU:HD23	1:A:97:GLN:HB3	20	0.4
(1,1748)	1:A:89:ASP:HB3	1:A:138:LEU:HD11	7	0.4
(1,1748)	1:A:89:ASP:HB3	1:A:138:LEU:HD12	7	0.4
(1,1748)	1:A:89:ASP:HB3	1:A:138:LEU:HD13	7	0.4
(1,1748)	1:A:89:ASP:HB3	1:A:138:LEU:HD21	7	0.4
(1,1748)	1:A:89:ASP:HB3	1:A:138:LEU:HD22	7	0.4
(1,1748)	1:A:89:ASP:HB3	1:A:138:LEU:HD23	7	0.4
(1,1709)	1:A:83:ILE:HA	1:A:136:ILE:HG13	8	0.4
(1,1653)	1:A:76:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG11	13	0.4
(1,1653)	1:A:76:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG12	13	0.4
(1,1653)	1:A:76:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG13	13	0.4
(1,1652)	1:A:76:GLU:HG3	1:A:77:VAL:H	13	0.4
(1,1649)	1:A:76:GLU:HB3	1:A:77:VAL:H	8	0.4
(1,1649)	1:A:76:GLU:HB3	1:A:77:VAL:H	14	0.4
(1,1645)	1:A:76:GLU:H	1:A:76:GLU:HG3	4	0.4
(1,1643)	1:A:75:GLU:HB3	1:A:76:GLU:H	18	0.4
(1,1595)	1:A:220:THR:HA	1:A:223:LYS:HD3	4	0.4
(1,1580)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HA	2	0.4
(1,1580)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HA	4	0.4
(1,1580)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HA	7	0.4
(1,1580)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HA	8	0.4
(1,1580)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HA	11	0.4
(1,1580)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HA	17	0.4
(1,145)	1:A:207:GLU:HB3	1:A:208:ARG:H	17	0.4
(1,1363)	1:A:205:GLN:HA	1:A:208:ARG:HD3	9	0.4
(1,1363)	1:A:205:GLN:HA	1:A:208:ARG:HD3	18	0.4
(1,1360)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HG13	15	0.4
(1,1359)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HD11	2	0.4
(1,1359)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HD12	2	0.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1359)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HD13	2	0.4
(1,1323)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:166:LYS:HE3	5	0.4
(1,1316)	1:A:209:ILE:HB	1:A:210:PHE:HB3	13	0.4
(1,1316)	1:A:209:ILE:HB	1:A:210:PHE:HB3	19	0.4
(1,1312)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:H	20	0.4
(1,1304)	1:A:87:GLU:H	1:A:87:GLU:HG3	12	0.4
(1,13)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:105:GLY:H	18	0.4
(1,1263)	1:A:230:GLN:HA	1:A:230:GLN:HG3	18	0.4
(1,1231)	1:A:111:ILE:HG21	1:A:114:GLU:HB3	11	0.4
(1,1231)	1:A:111:ILE:HG22	1:A:114:GLU:HB3	11	0.4
(1,1231)	1:A:111:ILE:HG23	1:A:114:GLU:HB3	11	0.4
(1,1227)	1:A:223:LYS:H	1:A:223:LYS:HD3	5	0.4
(1,1226)	1:A:223:LYS:HD3	1:A:224:GLU:H	5	0.4
(1,103)	1:A:197:GLU:HB3	1:A:199:SER:H	6	0.4
(1,856)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG21	18	0.39
(1,856)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG22	18	0.39
(1,856)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG23	18	0.39
(1,595)	1:A:158:MET:HG3	1:A:158:MET:HE1	3	0.39
(1,595)	1:A:158:MET:HG3	1:A:158:MET:HE2	3	0.39
(1,595)	1:A:158:MET:HG3	1:A:158:MET:HE3	3	0.39
(1,478)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:182:ARG:H	15	0.39
(1,478)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:182:ARG:H	16	0.39
(1,471)	1:A:196:GLU:H	1:A:196:GLU:HB3	1	0.39
(1,43)	1:A:182:ARG:HB3	1:A:190:GLN:HE22	18	0.39
(1,391)	1:A:230:GLN:H	1:A:230:GLN:HG3	19	0.39
(1,2397)	1:A:226:ARG:HB3	1:A:226:ARG:HD3	5	0.39
(1,2394)	1:A:224:GLU:HG3	1:A:225:THR:H	11	0.39
(1,2379)	1:A:223:LYS:H	1:A:223:LYS:HE3	18	0.39
(1,2349)	1:A:216:LYS:HB3	1:A:216:LYS:HE3	19	0.39
(1,2296)	1:A:200:ARG:HG3	1:A:200:ARG:HD3	4	0.39
(1,2296)	1:A:200:ARG:HG3	1:A:200:ARG:HD3	11	0.39
(1,2279)	1:A:196:GLU:HG3	1:A:197:GLU:H	8	0.39
(1,2206)	1:A:184:ARG:H	1:A:184:ARG:HG3	12	0.39
(1,215)	1:A:224:GLU:H	1:A:224:GLU:HB3	10	0.39
(1,2149)	1:A:176:LEU:H	1:A:197:GLU:HG3	2	0.39
(1,2108)	1:A:167:TYR:HB3	1:A:221:ILE:HD11	10	0.39
(1,2108)	1:A:167:TYR:HB3	1:A:221:ILE:HD12	10	0.39
(1,2108)	1:A:167:TYR:HB3	1:A:221:ILE:HD13	10	0.39
(1,2096)	1:A:166:LYS:H	1:A:166:LYS:HG3	9	0.39
(1,2057)	1:A:159:ASN:HA	1:A:162:ASN:HB3	15	0.39
(1,2019)	1:A:145:ARG:HA	1:A:145:ARG:HD3	10	0.39
(1,2019)	1:A:145:ARG:HA	1:A:145:ARG:HD3	14	0.39

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2019)	1:A:145:ARG:HA	1:A:145:ARG:HD3	15	0.39
(1,1892)	1:A:120:GLN:HG3	1:A:120:GLN:HE21	8	0.39
(1,1892)	1:A:120:GLN:HG3	1:A:120:GLN:HE22	8	0.39
(1,1892)	1:A:120:GLN:HG3	1:A:120:GLN:HE21	17	0.39
(1,1892)	1:A:120:GLN:HG3	1:A:120:GLN:HE22	17	0.39
(1,1885)	1:A:114:GLU:HG3	1:A:115:MET:H	16	0.39
(1,1883)	1:A:113:ALA:HB1	1:A:114:GLU:HG3	13	0.39
(1,1883)	1:A:113:ALA:HB2	1:A:114:GLU:HG3	13	0.39
(1,1883)	1:A:113:ALA:HB3	1:A:114:GLU:HG3	13	0.39
(1,1882)	1:A:112:PHE:HA	1:A:115:MET:HG3	11	0.39
(1,1748)	1:A:89:ASP:HB3	1:A:138:LEU:HD11	5	0.39
(1,1748)	1:A:89:ASP:HB3	1:A:138:LEU:HD12	5	0.39
(1,1748)	1:A:89:ASP:HB3	1:A:138:LEU:HD13	5	0.39
(1,1748)	1:A:89:ASP:HB3	1:A:138:LEU:HD21	5	0.39
(1,1748)	1:A:89:ASP:HB3	1:A:138:LEU:HD22	5	0.39
(1,1748)	1:A:89:ASP:HB3	1:A:138:LEU:HD23	5	0.39
(1,1747)	1:A:89:ASP:HB3	1:A:93:ALA:H	2	0.39
(1,1743)	1:A:89:ASP:H	1:A:89:ASP:HB3	20	0.39
(1,1680)	1:A:80:LYS:HG3	1:A:81:PHE:H	4	0.39
(1,1675)	1:A:80:LYS:H	1:A:80:LYS:HE3	2	0.39
(1,1674)	1:A:80:LYS:H	1:A:80:LYS:HG3	15	0.39
(1,167)	1:A:145:ARG:H	1:A:145:ARG:HG3	20	0.39
(1,1653)	1:A:76:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG11	6	0.39
(1,1653)	1:A:76:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG12	6	0.39
(1,1653)	1:A:76:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG13	6	0.39
(1,1653)	1:A:76:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG11	17	0.39
(1,1653)	1:A:76:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG12	17	0.39
(1,1653)	1:A:76:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG13	17	0.39
(1,1652)	1:A:76:GLU:HG3	1:A:77:VAL:H	7	0.39
(1,1649)	1:A:76:GLU:HB3	1:A:77:VAL:H	7	0.39
(1,1646)	1:A:76:GLU:HA	1:A:76:GLU:HB3	3	0.39
(1,1646)	1:A:76:GLU:HA	1:A:76:GLU:HB3	5	0.39
(1,1646)	1:A:76:GLU:HA	1:A:76:GLU:HB3	6	0.39
(1,1646)	1:A:76:GLU:HA	1:A:76:GLU:HB3	7	0.39
(1,1646)	1:A:76:GLU:HA	1:A:76:GLU:HB3	8	0.39
(1,1646)	1:A:76:GLU:HA	1:A:76:GLU:HB3	12	0.39
(1,1646)	1:A:76:GLU:HA	1:A:76:GLU:HB3	13	0.39
(1,1646)	1:A:76:GLU:HA	1:A:76:GLU:HB3	14	0.39
(1,1646)	1:A:76:GLU:HA	1:A:76:GLU:HB3	17	0.39
(1,1646)	1:A:76:GLU:HA	1:A:76:GLU:HB3	18	0.39
(1,1646)	1:A:76:GLU:HA	1:A:76:GLU:HB3	19	0.39
(1,1618)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD1	11	0.39

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1618)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD2	11	0.39
(1,1618)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD1	14	0.39
(1,1618)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD2	14	0.39
(1,1580)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HA	20	0.39
(1,145)	1:A:207:GLU:HB3	1:A:208:ARG:H	16	0.39
(1,1366)	1:A:70:GLY:HA2	1:A:71:PRO:HG3	7	0.39
(1,1366)	1:A:70:GLY:HA3	1:A:71:PRO:HG3	7	0.39
(1,1364)	1:A:208:ARG:HA	1:A:208:ARG:HD3	11	0.39
(1,1364)	1:A:208:ARG:HA	1:A:208:ARG:HD3	18	0.39
(1,1341)	1:A:213:SER:HA	1:A:216:LYS:HE3	13	0.39
(1,1323)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:166:LYS:HE3	14	0.39
(1,1312)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:H	9	0.39
(1,1231)	1:A:111:ILE:HG21	1:A:114:GLU:HB3	14	0.39
(1,1231)	1:A:111:ILE:HG22	1:A:114:GLU:HB3	14	0.39
(1,1231)	1:A:111:ILE:HG23	1:A:114:GLU:HB3	14	0.39
(1,922)	1:A:217:THR:HG21	1:A:218:GLN:HG3	15	0.38
(1,922)	1:A:217:THR:HG22	1:A:218:GLN:HG3	15	0.38
(1,922)	1:A:217:THR:HG23	1:A:218:GLN:HG3	15	0.38
(1,922)	1:A:217:THR:HG21	1:A:218:GLN:HG3	19	0.38
(1,922)	1:A:217:THR:HG22	1:A:218:GLN:HG3	19	0.38
(1,922)	1:A:217:THR:HG23	1:A:218:GLN:HG3	19	0.38
(1,79)	1:A:98:ASN:HB3	1:A:98:ASN:HD22	3	0.38
(1,79)	1:A:98:ASN:HB3	1:A:98:ASN:HD22	4	0.38
(1,79)	1:A:98:ASN:HB3	1:A:98:ASN:HD22	7	0.38
(1,595)	1:A:158:MET:HG3	1:A:158:MET:HE1	8	0.38
(1,595)	1:A:158:MET:HG3	1:A:158:MET:HE2	8	0.38
(1,595)	1:A:158:MET:HG3	1:A:158:MET:HE3	8	0.38
(1,595)	1:A:158:MET:HG3	1:A:158:MET:HE1	15	0.38
(1,595)	1:A:158:MET:HG3	1:A:158:MET:HE2	15	0.38
(1,595)	1:A:158:MET:HG3	1:A:158:MET:HE3	15	0.38
(1,56)	1:A:203:PRO:HG3	1:A:204:THR:H	17	0.38
(1,471)	1:A:196:GLU:H	1:A:196:GLU:HB3	11	0.38
(1,391)	1:A:230:GLN:H	1:A:230:GLN:HG3	13	0.38
(1,391)	1:A:230:GLN:H	1:A:230:GLN:HG3	17	0.38
(1,2415)	1:A:232:GLN:HG3	1:A:232:GLN:HE22	3	0.38
(1,2381)	1:A:223:LYS:HA	1:A:226:ARG:HB3	2	0.38
(1,2352)	1:A:216:LYS:HG3	1:A:217:THR:H	1	0.38
(1,2350)	1:A:216:LYS:HB3	1:A:217:THR:H	14	0.38
(1,2208)	1:A:184:ARG:HA	1:A:184:ARG:HG3	5	0.38
(1,2208)	1:A:184:ARG:HA	1:A:184:ARG:HG3	10	0.38
(1,2208)	1:A:184:ARG:HA	1:A:184:ARG:HG3	16	0.38
(1,2201)	1:A:183:GLU:HA	1:A:183:GLU:HG3	9	0.38

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2199)	1:A:182:ARG:HA	1:A:182:ARG:HG3	7	0.38
(1,215)	1:A:224:GLU:H	1:A:224:GLU:HB3	13	0.38
(1,1998)	1:A:141:GLU:HB3	1:A:142:ASN:H	1	0.38
(1,1998)	1:A:141:GLU:HB3	1:A:142:ASN:H	3	0.38
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD11	1:A:151:PHE:HB3	13	0.38
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD12	1:A:151:PHE:HB3	13	0.38
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD13	1:A:151:PHE:HB3	13	0.38
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD21	1:A:151:PHE:HB3	13	0.38
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD22	1:A:151:PHE:HB3	13	0.38
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD23	1:A:151:PHE:HB3	13	0.38
(1,1892)	1:A:120:GLN:HG3	1:A:120:GLN:HE21	3	0.38
(1,1892)	1:A:120:GLN:HG3	1:A:120:GLN:HE22	3	0.38
(1,1886)	1:A:115:MET:HB3	1:A:115:MET:HE1	3	0.38
(1,1886)	1:A:115:MET:HB3	1:A:115:MET:HE2	3	0.38
(1,1886)	1:A:115:MET:HB3	1:A:115:MET:HE3	3	0.38
(1,1885)	1:A:114:GLU:HG3	1:A:115:MET:H	2	0.38
(1,1885)	1:A:114:GLU:HG3	1:A:115:MET:H	9	0.38
(1,1885)	1:A:114:GLU:HG3	1:A:115:MET:H	20	0.38
(1,1882)	1:A:112:PHE:HA	1:A:115:MET:HG3	19	0.38
(1,1856)	1:A:101:GLN:HG3	1:A:109:GLY:H	13	0.38
(1,1852)	1:A:101:GLN:HB3	1:A:107:LYS:HG3	14	0.38
(1,1743)	1:A:89:ASP:H	1:A:89:ASP:HB3	12	0.38
(1,1743)	1:A:89:ASP:H	1:A:89:ASP:HB3	18	0.38
(1,1739)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:88:ASP:H	10	0.38
(1,1734)	1:A:85:HIS:HB3	1:A:111:ILE:HD11	9	0.38
(1,1734)	1:A:85:HIS:HB3	1:A:111:ILE:HD12	9	0.38
(1,1734)	1:A:85:HIS:HB3	1:A:111:ILE:HD13	9	0.38
(1,1683)	1:A:80:LYS:HE3	1:A:106:ILE:HG21	9	0.38
(1,1683)	1:A:80:LYS:HE3	1:A:106:ILE:HG22	9	0.38
(1,1683)	1:A:80:LYS:HE3	1:A:106:ILE:HG23	9	0.38
(1,1681)	1:A:80:LYS:HG3	1:A:106:ILE:HG21	17	0.38
(1,1681)	1:A:80:LYS:HG3	1:A:106:ILE:HG22	17	0.38
(1,1681)	1:A:80:LYS:HG3	1:A:106:ILE:HG23	17	0.38
(1,1681)	1:A:80:LYS:HG3	1:A:106:ILE:HG21	19	0.38
(1,1681)	1:A:80:LYS:HG3	1:A:106:ILE:HG22	19	0.38
(1,1681)	1:A:80:LYS:HG3	1:A:106:ILE:HG23	19	0.38
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:108:PRO:HD3	8	0.38
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:108:PRO:HD3	8	0.38
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:108:PRO:HD3	8	0.38
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:108:PRO:HD3	8	0.38
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:108:PRO:HD3	8	0.38
(1,1665)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:108:PRO:HD3	8	0.38

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1655)	1:A:76:GLU:HG3	1:A:222:TRP:HH2	4	0.38
(1,1653)	1:A:76:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG11	7	0.38
(1,1653)	1:A:76:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG12	7	0.38
(1,1653)	1:A:76:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG13	7	0.38
(1,1650)	1:A:76:GLU:HB3	1:A:222:TRP:HZ2	1	0.38
(1,1650)	1:A:76:GLU:HB3	1:A:222:TRP:HZ2	4	0.38
(1,1646)	1:A:76:GLU:HA	1:A:76:GLU:HB3	1	0.38
(1,1595)	1:A:220:THR:HA	1:A:223:LYS:HD3	17	0.38
(1,1580)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HA	5	0.38
(1,1580)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HA	6	0.38
(1,1499)	1:A:223:LYS:HA	1:A:223:LYS:HD3	15	0.38
(1,1366)	1:A:70:GLY:HA2	1:A:71:PRO:HG3	11	0.38
(1,1366)	1:A:70:GLY:HA3	1:A:71:PRO:HG3	11	0.38
(1,1363)	1:A:205:GLN:HA	1:A:208:ARG:HD3	3	0.38
(1,1363)	1:A:205:GLN:HA	1:A:208:ARG:HD3	13	0.38
(1,1359)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HD11	1	0.38
(1,1359)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HD12	1	0.38
(1,1359)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HD13	1	0.38
(1,1359)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HD11	7	0.38
(1,1359)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HD12	7	0.38
(1,1359)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HD13	7	0.38
(1,1349)	1:A:200:ARG:HG3	1:A:200:ARG:HD3	5	0.38
(1,1349)	1:A:200:ARG:HG3	1:A:200:ARG:HD3	6	0.38
(1,1349)	1:A:200:ARG:HG3	1:A:200:ARG:HD3	7	0.38
(1,1349)	1:A:200:ARG:HG3	1:A:200:ARG:HD3	8	0.38
(1,1343)	1:A:216:LYS:H	1:A:216:LYS:HE3	3	0.38
(1,1343)	1:A:216:LYS:H	1:A:216:LYS:HE3	13	0.38
(1,1323)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:166:LYS:HE3	13	0.38
(1,1312)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:H	15	0.38
(1,1303)	1:A:87:GLU:HG3	1:A:88:ASP:HA	5	0.38
(1,1285)	1:A:75:GLU:H	1:A:75:GLU:HG3	16	0.38
(1,1231)	1:A:111:ILE:HG21	1:A:114:GLU:HB3	12	0.38
(1,1231)	1:A:111:ILE:HG22	1:A:114:GLU:HB3	12	0.38
(1,1231)	1:A:111:ILE:HG23	1:A:114:GLU:HB3	12	0.38
(1,1220)	1:A:216:LYS:HD3	1:A:217:THR:H	9	0.38
(1,100)	1:A:145:ARG:HB3	1:A:146:ASP:H	8	0.38
(1,856)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG21	17	0.37
(1,856)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG22	17	0.37
(1,856)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG23	17	0.37
(1,84)	1:A:197:GLU:HB3	1:A:198:GLU:H	5	0.37
(1,810)	1:A:173:MET:HE1	1:A:197:GLU:HB3	20	0.37
(1,810)	1:A:173:MET:HE2	1:A:197:GLU:HB3	20	0.37

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,810)	1:A:173:MET:HE3	1:A:197:GLU:HB3	20	0.37
(1,616)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:83:ILE:HD11	18	0.37
(1,616)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:83:ILE:HD12	18	0.37
(1,616)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:83:ILE:HD13	18	0.37
(1,595)	1:A:158:MET:HG3	1:A:158:MET:HE1	5	0.37
(1,595)	1:A:158:MET:HG3	1:A:158:MET:HE2	5	0.37
(1,595)	1:A:158:MET:HG3	1:A:158:MET:HE3	5	0.37
(1,391)	1:A:230:GLN:H	1:A:230:GLN:HG3	1	0.37
(1,391)	1:A:230:GLN:H	1:A:230:GLN:HG3	3	0.37
(1,262)	1:A:183:GLU:HB3	1:A:185:THR:H	18	0.37
(1,2419)	1:A:234:ILE:HA	1:A:234:ILE:HG13	3	0.37
(1,2381)	1:A:223:LYS:HA	1:A:226:ARG:HB3	17	0.37
(1,2363)	1:A:219:GLN:HG3	1:A:223:LYS:HG3	15	0.37
(1,2352)	1:A:216:LYS:HG3	1:A:217:THR:H	19	0.37
(1,2350)	1:A:216:LYS:HB3	1:A:217:THR:H	20	0.37
(1,2344)	1:A:215:TYR:HD1	1:A:216:LYS:HG3	20	0.37
(1,2344)	1:A:215:TYR:HD2	1:A:216:LYS:HG3	20	0.37
(1,2292)	1:A:199:SER:H	1:A:199:SER:HB3	17	0.37
(1,2210)	1:A:184:ARG:HB3	1:A:185:THR:H	3	0.37
(1,2210)	1:A:184:ARG:HB3	1:A:185:THR:H	15	0.37
(1,2208)	1:A:184:ARG:HA	1:A:184:ARG:HG3	11	0.37
(1,2208)	1:A:184:ARG:HA	1:A:184:ARG:HG3	13	0.37
(1,2208)	1:A:184:ARG:HA	1:A:184:ARG:HG3	14	0.37
(1,215)	1:A:224:GLU:H	1:A:224:GLU:HB3	4	0.37
(1,2098)	1:A:166:LYS:HB3	1:A:166:LYS:HE3	11	0.37
(1,2096)	1:A:166:LYS:H	1:A:166:LYS:HG3	20	0.37
(1,2088)	1:A:164:GLN:H	1:A:164:GLN:HG3	1	0.37
(1,1998)	1:A:141:GLU:HB3	1:A:142:ASN:H	2	0.37
(1,1998)	1:A:141:GLU:HB3	1:A:142:ASN:H	20	0.37
(1,1936)	1:A:134:TRP:HE1	1:A:169:SER:HB3	18	0.37
(1,1934)	1:A:132:SER:HB3	1:A:134:TRP:H	5	0.37
(1,1914)	1:A:125:LEU:HD11	1:A:157:LEU:HB3	13	0.37
(1,1914)	1:A:125:LEU:HD12	1:A:157:LEU:HB3	13	0.37
(1,1914)	1:A:125:LEU:HD13	1:A:157:LEU:HB3	13	0.37
(1,1914)	1:A:125:LEU:HD21	1:A:157:LEU:HB3	13	0.37
(1,1914)	1:A:125:LEU:HD22	1:A:157:LEU:HB3	13	0.37
(1,1914)	1:A:125:LEU:HD23	1:A:157:LEU:HB3	13	0.37
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD11	1:A:151:PHE:HB3	15	0.37
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD12	1:A:151:PHE:HB3	15	0.37
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD13	1:A:151:PHE:HB3	15	0.37
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD21	1:A:151:PHE:HB3	15	0.37
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD22	1:A:151:PHE:HB3	15	0.37

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD23	1:A:151:PHE:HB3	15	0.37
(1,1898)	1:A:123:GLN:H	1:A:123:GLN:HG3	3	0.37
(1,1885)	1:A:114:GLU:HG3	1:A:115:MET:H	3	0.37
(1,1885)	1:A:114:GLU:HG3	1:A:115:MET:H	10	0.37
(1,1880)	1:A:110:ILE:HD11	1:A:116:PRO:HG3	14	0.37
(1,1880)	1:A:110:ILE:HD12	1:A:116:PRO:HG3	14	0.37
(1,1880)	1:A:110:ILE:HD13	1:A:116:PRO:HG3	14	0.37
(1,1743)	1:A:89:ASP:H	1:A:89:ASP:HB3	8	0.37
(1,1739)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:88:ASP:H	13	0.37
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:108:PRO:HG3	9	0.37
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:108:PRO:HG3	9	0.37
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:108:PRO:HG3	9	0.37
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:108:PRO:HG3	9	0.37
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:108:PRO:HG3	9	0.37
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:108:PRO:HG3	9	0.37
(1,1641)	1:A:74:SER:HA	1:A:74:SER:HB3	18	0.37
(1,1618)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD1	1	0.37
(1,1618)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD2	1	0.37
(1,1486)	1:A:145:ARG:HA	1:A:145:ARG:HG3	9	0.37
(1,145)	1:A:207:GLU:HB3	1:A:208:ARG:H	20	0.37
(1,1422)	1:A:211:GLN:HA	1:A:211:GLN:HG3	13	0.37
(1,1354)	1:A:182:ARG:HB3	1:A:182:ARG:HD3	9	0.37
(1,1349)	1:A:200:ARG:HG3	1:A:200:ARG:HD3	10	0.37
(1,1349)	1:A:200:ARG:HG3	1:A:200:ARG:HD3	18	0.37
(1,1349)	1:A:200:ARG:HG3	1:A:200:ARG:HD3	20	0.37
(1,1327)	1:A:107:LYS:HD3	1:A:107:LYS:HE3	17	0.37
(1,1325)	1:A:166:LYS:H	1:A:166:LYS:HE3	11	0.37
(1,1316)	1:A:209:ILE:HB	1:A:210:PHE:HB3	4	0.37
(1,1312)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:H	11	0.37
(1,13)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:105:GLY:H	15	0.37
(1,1285)	1:A:75:GLU:H	1:A:75:GLU:HG3	3	0.37
(1,1285)	1:A:75:GLU:H	1:A:75:GLU:HG3	20	0.37
(1,1231)	1:A:111:ILE:HG21	1:A:114:GLU:HB3	16	0.37
(1,1231)	1:A:111:ILE:HG22	1:A:114:GLU:HB3	16	0.37
(1,1231)	1:A:111:ILE:HG23	1:A:114:GLU:HB3	16	0.37
(1,1231)	1:A:111:ILE:HG21	1:A:114:GLU:HB3	20	0.37
(1,1231)	1:A:111:ILE:HG22	1:A:114:GLU:HB3	20	0.37
(1,1231)	1:A:111:ILE:HG23	1:A:114:GLU:HB3	20	0.37
(1,1227)	1:A:223:LYS:H	1:A:223:LYS:HD3	11	0.37
(1,1218)	1:A:213:SER:HA	1:A:216:LYS:HD3	2	0.37
(1,1215)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:167:TYR:H	18	0.37
(1,1212)	1:A:166:LYS:HA	1:A:166:LYS:HD3	18	0.37

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,100)	1:A:145:ARG:HB3	1:A:146:ASP:H	17	0.37
(1,856)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG21	4	0.36
(1,856)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG22	4	0.36
(1,856)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG23	4	0.36
(1,810)	1:A:173:MET:HE1	1:A:197:GLU:HB3	2	0.36
(1,810)	1:A:173:MET:HE2	1:A:197:GLU:HB3	2	0.36
(1,810)	1:A:173:MET:HE3	1:A:197:GLU:HB3	2	0.36
(1,79)	1:A:98:ASN:HB3	1:A:98:ASN:HD22	2	0.36
(1,79)	1:A:98:ASN:HB3	1:A:98:ASN:HD22	6	0.36
(1,79)	1:A:98:ASN:HB3	1:A:98:ASN:HD22	11	0.36
(1,595)	1:A:158:MET:HG3	1:A:158:MET:HE1	10	0.36
(1,595)	1:A:158:MET:HG3	1:A:158:MET:HE2	10	0.36
(1,595)	1:A:158:MET:HG3	1:A:158:MET:HE3	10	0.36
(1,480)	1:A:182:ARG:H	1:A:182:ARG:HD3	2	0.36
(1,471)	1:A:196:GLU:H	1:A:196:GLU:HB3	13	0.36
(1,391)	1:A:230:GLN:H	1:A:230:GLN:HG3	16	0.36
(1,387)	1:A:80:LYS:HD3	1:A:107:LYS:H	11	0.36
(1,2419)	1:A:234:ILE:HA	1:A:234:ILE:HG13	19	0.36
(1,2418)	1:A:234:ILE:H	1:A:234:ILE:HG13	11	0.36
(1,2411)	1:A:230:GLN:HB3	1:A:230:GLN:HE21	8	0.36
(1,2411)	1:A:230:GLN:HB3	1:A:230:GLN:HE22	8	0.36
(1,2384)	1:A:223:LYS:HB3	1:A:224:GLU:HG3	15	0.36
(1,2351)	1:A:216:LYS:HG3	1:A:216:LYS:HE3	8	0.36
(1,2349)	1:A:216:LYS:HB3	1:A:216:LYS:HE3	2	0.36
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG11	18	0.36
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG12	18	0.36
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG13	18	0.36
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG21	18	0.36
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG22	18	0.36
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG23	18	0.36
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG11	19	0.36
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG12	19	0.36
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG13	19	0.36
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG21	19	0.36
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG22	19	0.36
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG23	19	0.36
(1,2296)	1:A:200:ARG:HG3	1:A:200:ARG:HD3	1	0.36
(1,2296)	1:A:200:ARG:HG3	1:A:200:ARG:HD3	16	0.36
(1,2290)	1:A:198:GLU:HB3	1:A:198:GLU:HG3	5	0.36
(1,2208)	1:A:184:ARG:HA	1:A:184:ARG:HG3	6	0.36
(1,2208)	1:A:184:ARG:HA	1:A:184:ARG:HG3	8	0.36
(1,2208)	1:A:184:ARG:HA	1:A:184:ARG:HG3	19	0.36

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,215)	1:A:224:GLU:H	1:A:224:GLU:HB3	16	0.36
(1,2108)	1:A:167:TYR:HB3	1:A:221:ILE:HD11	15	0.36
(1,2108)	1:A:167:TYR:HB3	1:A:221:ILE:HD12	15	0.36
(1,2108)	1:A:167:TYR:HB3	1:A:221:ILE:HD13	15	0.36
(1,2082)	1:A:163:ARG:H	1:A:163:ARG:HB3	5	0.36
(1,2035)	1:A:152:GLN:H	1:A:152:GLN:HG3	15	0.36
(1,1999)	1:A:141:GLU:HG3	1:A:142:ASN:H	14	0.36
(1,1992)	1:A:141:GLU:H	1:A:144:LEU:HB3	18	0.36
(1,1968)	1:A:139:LEU:HB3	1:A:189:LEU:HD11	14	0.36
(1,1968)	1:A:139:LEU:HB3	1:A:189:LEU:HD12	14	0.36
(1,1968)	1:A:139:LEU:HB3	1:A:189:LEU:HD13	14	0.36
(1,1968)	1:A:139:LEU:HB3	1:A:189:LEU:HD21	14	0.36
(1,1968)	1:A:139:LEU:HB3	1:A:189:LEU:HD22	14	0.36
(1,1968)	1:A:139:LEU:HB3	1:A:189:LEU:HD23	14	0.36
(1,1936)	1:A:134:TRP:HE1	1:A:169:SER:HB3	20	0.36
(1,1894)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:121:HIS:HE1	7	0.36
(1,1884)	1:A:114:GLU:HA	1:A:114:GLU:HG3	7	0.36
(1,1871)	1:A:107:LYS:HA	1:A:107:LYS:HD3	8	0.36
(1,1871)	1:A:107:LYS:HA	1:A:107:LYS:HD3	13	0.36
(1,1852)	1:A:101:GLN:HB3	1:A:107:LYS:HG3	5	0.36
(1,1816)	1:A:100:LEU:HB3	1:A:101:GLN:H	20	0.36
(1,1734)	1:A:85:HIS:HB3	1:A:111:ILE:HD11	6	0.36
(1,1734)	1:A:85:HIS:HB3	1:A:111:ILE:HD12	6	0.36
(1,1734)	1:A:85:HIS:HB3	1:A:111:ILE:HD13	6	0.36
(1,1595)	1:A:220:THR:HA	1:A:223:LYS:HD3	8	0.36
(1,1364)	1:A:208:ARG:HA	1:A:208:ARG:HD3	5	0.36
(1,1363)	1:A:205:GLN:HA	1:A:208:ARG:HD3	14	0.36
(1,1349)	1:A:200:ARG:HG3	1:A:200:ARG:HD3	3	0.36
(1,1349)	1:A:200:ARG:HG3	1:A:200:ARG:HD3	17	0.36
(1,1337)	1:A:216:LYS:HD3	1:A:216:LYS:HE3	18	0.36
(1,1327)	1:A:107:LYS:HD3	1:A:107:LYS:HE3	19	0.36
(1,1324)	1:A:166:LYS:HA	1:A:166:LYS:HE3	13	0.36
(1,1323)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:166:LYS:HE3	2	0.36
(1,1316)	1:A:209:ILE:HB	1:A:210:PHE:HB3	5	0.36
(1,1312)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:H	19	0.36
(1,13)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:105:GLY:H	1	0.36
(1,1231)	1:A:111:ILE:HG21	1:A:114:GLU:HB3	4	0.36
(1,1231)	1:A:111:ILE:HG22	1:A:114:GLU:HB3	4	0.36
(1,1231)	1:A:111:ILE:HG23	1:A:114:GLU:HB3	4	0.36
(1,1220)	1:A:216:LYS:HD3	1:A:217:THR:H	5	0.36
(1,1217)	1:A:216:LYS:HA	1:A:216:LYS:HD3	14	0.36
(1,79)	1:A:98:ASN:HB3	1:A:98:ASN:HD22	15	0.35

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,79)	1:A:98:ASN:HB3	1:A:98:ASN:HD22	19	0.35
(1,750)	1:A:80:LYS:HB3	1:A:133:ALA:HB1	8	0.35
(1,750)	1:A:80:LYS:HB3	1:A:133:ALA:HB2	8	0.35
(1,750)	1:A:80:LYS:HB3	1:A:133:ALA:HB3	8	0.35
(1,616)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:83:ILE:HD11	17	0.35
(1,616)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:83:ILE:HD12	17	0.35
(1,616)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:83:ILE:HD13	17	0.35
(1,478)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:182:ARG:H	2	0.35
(1,478)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:182:ARG:H	3	0.35
(1,478)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:182:ARG:H	5	0.35
(1,478)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:182:ARG:H	10	0.35
(1,478)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:182:ARG:H	19	0.35
(1,43)	1:A:182:ARG:HB3	1:A:190:GLN:HE22	11	0.35
(1,2419)	1:A:234:ILE:HA	1:A:234:ILE:HG13	16	0.35
(1,2394)	1:A:224:GLU:HG3	1:A:225:THR:H	9	0.35
(1,2384)	1:A:223:LYS:HB3	1:A:224:GLU:HG3	5	0.35
(1,2297)	1:A:200:ARG:HG3	1:A:201:GLY:H	5	0.35
(1,2297)	1:A:200:ARG:HG3	1:A:201:GLY:H	13	0.35
(1,2293)	1:A:199:SER:HB3	1:A:202:PHE:HB3	6	0.35
(1,2290)	1:A:198:GLU:HB3	1:A:198:GLU:HG3	4	0.35
(1,2210)	1:A:184:ARG:HB3	1:A:185:THR:H	8	0.35
(1,2208)	1:A:184:ARG:HA	1:A:184:ARG:HG3	1	0.35
(1,2197)	1:A:181:PRO:HG3	1:A:184:ARG:HD3	18	0.35
(1,215)	1:A:224:GLU:H	1:A:224:GLU:HB3	18	0.35
(1,215)	1:A:224:GLU:H	1:A:224:GLU:HB3	19	0.35
(1,2101)	1:A:166:LYS:HG3	1:A:166:LYS:HE3	12	0.35
(1,2096)	1:A:166:LYS:H	1:A:166:LYS:HG3	3	0.35
(1,2096)	1:A:166:LYS:H	1:A:166:LYS:HG3	7	0.35
(1,2096)	1:A:166:LYS:H	1:A:166:LYS:HG3	12	0.35
(1,2096)	1:A:166:LYS:H	1:A:166:LYS:HG3	14	0.35
(1,2094)	1:A:164:GLN:HG3	1:A:165:HIS:H	8	0.35
(1,2082)	1:A:163:ARG:H	1:A:163:ARG:HB3	20	0.35
(1,1998)	1:A:141:GLU:HB3	1:A:142:ASN:H	12	0.35
(1,1886)	1:A:115:MET:HB3	1:A:115:MET:HE1	12	0.35
(1,1886)	1:A:115:MET:HB3	1:A:115:MET:HE2	12	0.35
(1,1886)	1:A:115:MET:HB3	1:A:115:MET:HE3	12	0.35
(1,1885)	1:A:114:GLU:HG3	1:A:115:MET:H	13	0.35
(1,1871)	1:A:107:LYS:HA	1:A:107:LYS:HD3	16	0.35
(1,1852)	1:A:101:GLN:HB3	1:A:107:LYS:HG3	6	0.35
(1,1652)	1:A:76:GLU:HG3	1:A:77:VAL:H	19	0.35
(1,1649)	1:A:76:GLU:HB3	1:A:77:VAL:H	17	0.35
(1,1649)	1:A:76:GLU:HB3	1:A:77:VAL:H	19	0.35

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1641)	1:A:74:SER:HA	1:A:74:SER:HB3	7	0.35
(1,1618)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD1	3	0.35
(1,1618)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD2	3	0.35
(1,1618)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD1	8	0.35
(1,1618)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD2	8	0.35
(1,1580)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HA	14	0.35
(1,1526)	1:A:192:ILE:HA	1:A:193:ASN:HB3	19	0.35
(1,1499)	1:A:223:LYS:HA	1:A:223:LYS:HD3	10	0.35
(1,147)	1:A:208:ARG:H	1:A:208:ARG:HD3	3	0.35
(1,1364)	1:A:208:ARG:HA	1:A:208:ARG:HD3	16	0.35
(1,1363)	1:A:205:GLN:HA	1:A:208:ARG:HD3	19	0.35
(1,135)	1:A:163:ARG:H	1:A:163:ARG:HD3	11	0.35
(1,1349)	1:A:200:ARG:HG3	1:A:200:ARG:HD3	12	0.35
(1,1323)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:166:LYS:HE3	6	0.35
(1,1323)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:166:LYS:HE3	9	0.35
(1,1321)	1:A:166:LYS:HE3	1:A:221:ILE:HG21	2	0.35
(1,1321)	1:A:166:LYS:HE3	1:A:221:ILE:HG22	2	0.35
(1,1321)	1:A:166:LYS:HE3	1:A:221:ILE:HG23	2	0.35
(1,1321)	1:A:166:LYS:HE3	1:A:221:ILE:HG21	4	0.35
(1,1321)	1:A:166:LYS:HE3	1:A:221:ILE:HG22	4	0.35
(1,1321)	1:A:166:LYS:HE3	1:A:221:ILE:HG23	4	0.35
(1,1316)	1:A:209:ILE:HB	1:A:210:PHE:HB3	8	0.35
(1,1312)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:H	12	0.35
(1,1303)	1:A:87:GLU:HG3	1:A:88:ASP:HA	20	0.35
(1,1285)	1:A:75:GLU:H	1:A:75:GLU:HG3	1	0.35
(1,1231)	1:A:111:ILE:HG21	1:A:114:GLU:HB3	1	0.35
(1,1231)	1:A:111:ILE:HG22	1:A:114:GLU:HB3	1	0.35
(1,1231)	1:A:111:ILE:HG23	1:A:114:GLU:HB3	1	0.35
(1,1212)	1:A:166:LYS:HA	1:A:166:LYS:HD3	1	0.35
(1,100)	1:A:145:ARG:HB3	1:A:146:ASP:H	6	0.35
(1,922)	1:A:217:THR:HG21	1:A:218:GLN:HG3	17	0.34
(1,922)	1:A:217:THR:HG22	1:A:218:GLN:HG3	17	0.34
(1,922)	1:A:217:THR:HG23	1:A:218:GLN:HG3	17	0.34
(1,828)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:HB1	9	0.34
(1,828)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:HB2	9	0.34
(1,828)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:HB3	9	0.34
(1,828)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:HB1	12	0.34
(1,828)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:HB2	12	0.34
(1,828)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:HB3	12	0.34
(1,79)	1:A:98:ASN:HB3	1:A:98:ASN:HD22	5	0.34
(1,79)	1:A:98:ASN:HB3	1:A:98:ASN:HD22	9	0.34
(1,79)	1:A:98:ASN:HB3	1:A:98:ASN:HD22	13	0.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,79)	1:A:98:ASN:HB3	1:A:98:ASN:HD22	17	0.34
(1,734)	1:A:192:ILE:HG21	1:A:193:ASN:HB3	18	0.34
(1,734)	1:A:192:ILE:HG22	1:A:193:ASN:HB3	18	0.34
(1,734)	1:A:192:ILE:HG23	1:A:193:ASN:HB3	18	0.34
(1,616)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:83:ILE:HD11	6	0.34
(1,616)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:83:ILE:HD12	6	0.34
(1,616)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:83:ILE:HD13	6	0.34
(1,480)	1:A:182:ARG:H	1:A:182:ARG:HD3	8	0.34
(1,387)	1:A:80:LYS:HD3	1:A:107:LYS:H	7	0.34
(1,387)	1:A:80:LYS:HD3	1:A:107:LYS:H	20	0.34
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG11	1:A:230:GLN:HG3	20	0.34
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG12	1:A:230:GLN:HG3	20	0.34
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG13	1:A:230:GLN:HG3	20	0.34
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG21	1:A:230:GLN:HG3	20	0.34
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG22	1:A:230:GLN:HG3	20	0.34
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG23	1:A:230:GLN:HG3	20	0.34
(1,2394)	1:A:224:GLU:HG3	1:A:225:THR:H	5	0.34
(1,2283)	1:A:197:GLU:HA	1:A:197:GLU:HG3	6	0.34
(1,2201)	1:A:183:GLU:HA	1:A:183:GLU:HG3	17	0.34
(1,215)	1:A:224:GLU:H	1:A:224:GLU:HB3	5	0.34
(1,215)	1:A:224:GLU:H	1:A:224:GLU:HB3	20	0.34
(1,2149)	1:A:176:LEU:H	1:A:197:GLU:HG3	16	0.34
(1,2115)	1:A:169:SER:HB3	1:A:209:ILE:HG21	13	0.34
(1,2115)	1:A:169:SER:HB3	1:A:209:ILE:HG22	13	0.34
(1,2115)	1:A:169:SER:HB3	1:A:209:ILE:HG23	13	0.34
(1,2096)	1:A:166:LYS:H	1:A:166:LYS:HG3	2	0.34
(1,2096)	1:A:166:LYS:H	1:A:166:LYS:HG3	4	0.34
(1,2084)	1:A:163:ARG:HA	1:A:163:ARG:HG3	17	0.34
(1,2065)	1:A:160:SER:HB3	1:A:161:VAL:HG11	3	0.34
(1,2065)	1:A:160:SER:HB3	1:A:161:VAL:HG12	3	0.34
(1,2065)	1:A:160:SER:HB3	1:A:161:VAL:HG13	3	0.34
(1,2065)	1:A:160:SER:HB3	1:A:161:VAL:HG21	3	0.34
(1,2065)	1:A:160:SER:HB3	1:A:161:VAL:HG22	3	0.34
(1,2065)	1:A:160:SER:HB3	1:A:161:VAL:HG23	3	0.34
(1,2035)	1:A:152:GLN:H	1:A:152:GLN:HG3	14	0.34
(1,2006)	1:A:144:LEU:HB3	1:A:180:LEU:HD11	14	0.34
(1,2006)	1:A:144:LEU:HB3	1:A:180:LEU:HD12	14	0.34
(1,2006)	1:A:144:LEU:HB3	1:A:180:LEU:HD13	14	0.34
(1,2006)	1:A:144:LEU:HB3	1:A:180:LEU:HD21	14	0.34
(1,2006)	1:A:144:LEU:HB3	1:A:180:LEU:HD22	14	0.34
(1,2006)	1:A:144:LEU:HB3	1:A:180:LEU:HD23	14	0.34
(1,1999)	1:A:141:GLU:HG3	1:A:142:ASN:H	18	0.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1998)	1:A:141:GLU:HB3	1:A:142:ASN:H	13	0.34
(1,1968)	1:A:139:LEU:HB3	1:A:189:LEU:HD11	15	0.34
(1,1968)	1:A:139:LEU:HB3	1:A:189:LEU:HD12	15	0.34
(1,1968)	1:A:139:LEU:HB3	1:A:189:LEU:HD13	15	0.34
(1,1968)	1:A:139:LEU:HB3	1:A:189:LEU:HD21	15	0.34
(1,1968)	1:A:139:LEU:HB3	1:A:189:LEU:HD22	15	0.34
(1,1968)	1:A:139:LEU:HB3	1:A:189:LEU:HD23	15	0.34
(1,1955)	1:A:138:LEU:H	1:A:138:LEU:HB3	8	0.34
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD11	1:A:151:PHE:HB3	17	0.34
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD12	1:A:151:PHE:HB3	17	0.34
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD13	1:A:151:PHE:HB3	17	0.34
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD21	1:A:151:PHE:HB3	17	0.34
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD22	1:A:151:PHE:HB3	17	0.34
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD23	1:A:151:PHE:HB3	17	0.34
(1,1880)	1:A:110:ILE:HD11	1:A:116:PRO:HG3	9	0.34
(1,1880)	1:A:110:ILE:HD12	1:A:116:PRO:HG3	9	0.34
(1,1880)	1:A:110:ILE:HD13	1:A:116:PRO:HG3	9	0.34
(1,1871)	1:A:107:LYS:HA	1:A:107:LYS:HD3	5	0.34
(1,1856)	1:A:101:GLN:HG3	1:A:109:GLY:H	9	0.34
(1,1853)	1:A:101:GLN:HB3	1:A:108:PRO:HA	20	0.34
(1,1852)	1:A:101:GLN:HB3	1:A:107:LYS:HG3	4	0.34
(1,1751)	1:A:91:ASP:H	1:A:92:GLU:HB3	8	0.34
(1,1743)	1:A:89:ASP:H	1:A:89:ASP:HB3	14	0.34
(1,1743)	1:A:89:ASP:H	1:A:89:ASP:HB3	17	0.34
(1,1675)	1:A:80:LYS:H	1:A:80:LYS:HE3	17	0.34
(1,1646)	1:A:76:GLU:HA	1:A:76:GLU:HB3	4	0.34
(1,1646)	1:A:76:GLU:HA	1:A:76:GLU:HB3	10	0.34
(1,1618)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD1	7	0.34
(1,1618)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD2	7	0.34
(1,1618)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD1	17	0.34
(1,1618)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD2	17	0.34
(1,1486)	1:A:145:ARG:HA	1:A:145:ARG:HG3	8	0.34
(1,1486)	1:A:145:ARG:HA	1:A:145:ARG:HG3	17	0.34
(1,1422)	1:A:211:GLN:HA	1:A:211:GLN:HG3	16	0.34
(1,1372)	1:A:163:ARG:HD3	1:A:164:GLN:H	19	0.34
(1,1364)	1:A:208:ARG:HA	1:A:208:ARG:HD3	3	0.34
(1,1364)	1:A:208:ARG:HA	1:A:208:ARG:HD3	9	0.34
(1,1364)	1:A:208:ARG:HA	1:A:208:ARG:HD3	10	0.34
(1,1364)	1:A:208:ARG:HA	1:A:208:ARG:HD3	13	0.34
(1,1364)	1:A:208:ARG:HA	1:A:208:ARG:HD3	14	0.34
(1,1364)	1:A:208:ARG:HA	1:A:208:ARG:HD3	19	0.34
(1,1350)	1:A:200:ARG:HB3	1:A:200:ARG:HD3	13	0.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1349)	1:A:200:ARG:HG3	1:A:200:ARG:HD3	19	0.34
(1,1327)	1:A:107:LYS:HD3	1:A:107:LYS:HE3	15	0.34
(1,1324)	1:A:166:LYS:HA	1:A:166:LYS:HE3	11	0.34
(1,1321)	1:A:166:LYS:HE3	1:A:221:ILE:HG21	5	0.34
(1,1321)	1:A:166:LYS:HE3	1:A:221:ILE:HG22	5	0.34
(1,1321)	1:A:166:LYS:HE3	1:A:221:ILE:HG23	5	0.34
(1,1316)	1:A:209:ILE:HB	1:A:210:PHE:HB3	1	0.34
(1,1316)	1:A:209:ILE:HB	1:A:210:PHE:HB3	16	0.34
(1,1312)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:H	3	0.34
(1,13)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:105:GLY:H	4	0.34
(1,1285)	1:A:75:GLU:H	1:A:75:GLU:HG3	9	0.34
(1,1227)	1:A:223:LYS:H	1:A:223:LYS:HD3	7	0.34
(1,952)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG11	4	0.33
(1,952)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG12	4	0.33
(1,952)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG13	4	0.33
(1,952)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG11	14	0.33
(1,952)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG12	14	0.33
(1,952)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG13	14	0.33
(1,952)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG11	20	0.33
(1,952)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG12	20	0.33
(1,952)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG13	20	0.33
(1,856)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG21	11	0.33
(1,856)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG22	11	0.33
(1,856)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG23	11	0.33
(1,828)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:HB1	19	0.33
(1,828)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:HB2	19	0.33
(1,828)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:HB3	19	0.33
(1,828)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:HB1	20	0.33
(1,828)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:HB2	20	0.33
(1,828)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:HB3	20	0.33
(1,79)	1:A:98:ASN:HB3	1:A:98:ASN:HD22	1	0.33
(1,686)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:106:ILE:HG21	15	0.33
(1,686)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:106:ILE:HG22	15	0.33
(1,686)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:106:ILE:HG23	15	0.33
(1,616)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:83:ILE:HD11	13	0.33
(1,616)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:83:ILE:HD12	13	0.33
(1,616)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:83:ILE:HD13	13	0.33
(1,567)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:209:ILE:HD11	4	0.33
(1,567)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:209:ILE:HD12	4	0.33
(1,567)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:209:ILE:HD13	4	0.33
(1,3)	1:A:80:LYS:HD3	1:A:81:PHE:H	9	0.33
(1,2415)	1:A:232:GLN:HG3	1:A:232:GLN:HE22	1	0.33

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2415)	1:A:232:GLN:HG3	1:A:232:GLN:HE22	9	0.33
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG11	1:A:230:GLN:HG3	8	0.33
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG12	1:A:230:GLN:HG3	8	0.33
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG13	1:A:230:GLN:HG3	8	0.33
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG21	1:A:230:GLN:HG3	8	0.33
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG22	1:A:230:GLN:HG3	8	0.33
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG23	1:A:230:GLN:HG3	8	0.33
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG11	1:A:230:GLN:HG3	11	0.33
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG12	1:A:230:GLN:HG3	11	0.33
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG13	1:A:230:GLN:HG3	11	0.33
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG21	1:A:230:GLN:HG3	11	0.33
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG22	1:A:230:GLN:HG3	11	0.33
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG23	1:A:230:GLN:HG3	11	0.33
(1,2396)	1:A:226:ARG:HA	1:A:226:ARG:HD3	12	0.33
(1,2393)	1:A:224:GLU:HB3	1:A:224:GLU:HG3	17	0.33
(1,2386)	1:A:223:LYS:HG3	1:A:223:LYS:HE3	16	0.33
(1,2344)	1:A:215:TYR:HD1	1:A:216:LYS:HG3	4	0.33
(1,2344)	1:A:215:TYR:HD2	1:A:216:LYS:HG3	4	0.33
(1,2276)	1:A:196:GLU:HA	1:A:196:GLU:HG3	5	0.33
(1,2240)	1:A:190:GLN:HG3	1:A:191:THR:HG21	7	0.33
(1,2240)	1:A:190:GLN:HG3	1:A:191:THR:HG22	7	0.33
(1,2240)	1:A:190:GLN:HG3	1:A:191:THR:HG23	7	0.33
(1,2216)	1:A:185:THR:HG21	1:A:189:LEU:HB3	10	0.33
(1,2216)	1:A:185:THR:HG22	1:A:189:LEU:HB3	10	0.33
(1,2216)	1:A:185:THR:HG23	1:A:189:LEU:HB3	10	0.33
(1,2208)	1:A:184:ARG:HA	1:A:184:ARG:HG3	3	0.33
(1,2208)	1:A:184:ARG:HA	1:A:184:ARG:HG3	9	0.33
(1,2206)	1:A:184:ARG:H	1:A:184:ARG:HG3	13	0.33
(1,2199)	1:A:182:ARG:HA	1:A:182:ARG:HG3	10	0.33
(1,2159)	1:A:176:LEU:HG	1:A:198:GLU:HG3	8	0.33
(1,215)	1:A:224:GLU:H	1:A:224:GLU:HB3	2	0.33
(1,215)	1:A:224:GLU:H	1:A:224:GLU:HB3	15	0.33
(1,2139)	1:A:172:PRO:HD3	1:A:194:ALA:HB1	7	0.33
(1,2139)	1:A:172:PRO:HD3	1:A:194:ALA:HB2	7	0.33
(1,2139)	1:A:172:PRO:HD3	1:A:194:ALA:HB3	7	0.33
(1,2114)	1:A:169:SER:HB3	1:A:171:ILE:HD11	16	0.33
(1,2114)	1:A:169:SER:HB3	1:A:171:ILE:HD12	16	0.33
(1,2114)	1:A:169:SER:HB3	1:A:171:ILE:HD13	16	0.33
(1,2100)	1:A:166:LYS:HB3	1:A:221:ILE:HG21	16	0.33
(1,2100)	1:A:166:LYS:HB3	1:A:221:ILE:HG22	16	0.33
(1,2100)	1:A:166:LYS:HB3	1:A:221:ILE:HG23	16	0.33
(1,2096)	1:A:166:LYS:H	1:A:166:LYS:HG3	5	0.33

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2096)	1:A:166:LYS:H	1:A:166:LYS:HG3	11	0.33
(1,2091)	1:A:164:GLN:HB3	1:A:164:GLN:HE21	18	0.33
(1,2091)	1:A:164:GLN:HB3	1:A:164:GLN:HE22	18	0.33
(1,2084)	1:A:163:ARG:HA	1:A:163:ARG:HG3	1	0.33
(1,2083)	1:A:163:ARG:H	1:A:163:ARG:HG3	5	0.33
(1,2081)	1:A:162:ASN:HB3	1:A:164:GLN:HE21	20	0.33
(1,2081)	1:A:162:ASN:HB3	1:A:164:GLN:HE22	20	0.33
(1,2065)	1:A:160:SER:HB3	1:A:161:VAL:HG11	14	0.33
(1,2065)	1:A:160:SER:HB3	1:A:161:VAL:HG12	14	0.33
(1,2065)	1:A:160:SER:HB3	1:A:161:VAL:HG13	14	0.33
(1,2065)	1:A:160:SER:HB3	1:A:161:VAL:HG21	14	0.33
(1,2065)	1:A:160:SER:HB3	1:A:161:VAL:HG22	14	0.33
(1,2065)	1:A:160:SER:HB3	1:A:161:VAL:HG23	14	0.33
(1,2037)	1:A:152:GLN:HG3	1:A:153:PHE:H	4	0.33
(1,2021)	1:A:145:ARG:HD3	1:A:146:ASP:H	5	0.33
(1,2019)	1:A:145:ARG:HA	1:A:145:ARG:HD3	11	0.33
(1,2006)	1:A:144:LEU:HB3	1:A:180:LEU:HD11	18	0.33
(1,2006)	1:A:144:LEU:HB3	1:A:180:LEU:HD12	18	0.33
(1,2006)	1:A:144:LEU:HB3	1:A:180:LEU:HD13	18	0.33
(1,2006)	1:A:144:LEU:HB3	1:A:180:LEU:HD21	18	0.33
(1,2006)	1:A:144:LEU:HB3	1:A:180:LEU:HD22	18	0.33
(1,2006)	1:A:144:LEU:HB3	1:A:180:LEU:HD23	18	0.33
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD11	1:A:151:PHE:HB3	4	0.33
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD12	1:A:151:PHE:HB3	4	0.33
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD13	1:A:151:PHE:HB3	4	0.33
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD21	1:A:151:PHE:HB3	4	0.33
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD22	1:A:151:PHE:HB3	4	0.33
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD23	1:A:151:PHE:HB3	4	0.33
(1,1895)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:122:LEU:HD11	13	0.33
(1,1895)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:122:LEU:HD12	13	0.33
(1,1895)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:122:LEU:HD13	13	0.33
(1,1895)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:122:LEU:HD21	13	0.33
(1,1895)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:122:LEU:HD22	13	0.33
(1,1895)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:122:LEU:HD23	13	0.33
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG11	7	0.33
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG12	7	0.33
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG13	7	0.33
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG21	7	0.33
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG22	7	0.33
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG23	7	0.33
(1,1805)	1:A:98:ASN:HA	1:A:101:GLN:HG3	7	0.33
(1,1676)	1:A:80:LYS:HA	1:A:80:LYS:HG3	8	0.33

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1675)	1:A:80:LYS:H	1:A:80:LYS:HE3	20	0.33
(1,1646)	1:A:76:GLU:HA	1:A:76:GLU:HB3	11	0.33
(1,1643)	1:A:75:GLU:HB3	1:A:76:GLU:H	2	0.33
(1,1526)	1:A:192:ILE:HA	1:A:193:ASN:HB3	13	0.33
(1,1486)	1:A:145:ARG:HA	1:A:145:ARG:HG3	4	0.33
(1,1370)	1:A:163:ARG:HB3	1:A:163:ARG:HD3	4	0.33
(1,1363)	1:A:205:GLN:HA	1:A:208:ARG:HD3	16	0.33
(1,1361)	1:A:204:THR:HG21	1:A:208:ARG:HD3	14	0.33
(1,1361)	1:A:204:THR:HG22	1:A:208:ARG:HD3	14	0.33
(1,1361)	1:A:204:THR:HG23	1:A:208:ARG:HD3	14	0.33
(1,1316)	1:A:209:ILE:HB	1:A:210:PHE:HB3	2	0.33
(1,1316)	1:A:209:ILE:HB	1:A:210:PHE:HB3	3	0.33
(1,1303)	1:A:87:GLU:HG3	1:A:88:ASP:HA	7	0.33
(1,1285)	1:A:75:GLU:H	1:A:75:GLU:HG3	13	0.33
(1,1285)	1:A:75:GLU:H	1:A:75:GLU:HG3	15	0.33
(1,1227)	1:A:223:LYS:H	1:A:223:LYS:HD3	2	0.33
(1,1220)	1:A:216:LYS:HD3	1:A:217:THR:H	6	0.33
(1,952)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG11	5	0.32
(1,952)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG12	5	0.32
(1,952)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG13	5	0.32
(1,952)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG11	6	0.32
(1,952)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG12	6	0.32
(1,952)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG13	6	0.32
(1,952)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG11	8	0.32
(1,952)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG12	8	0.32
(1,952)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG13	8	0.32
(1,952)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG11	10	0.32
(1,952)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG12	10	0.32
(1,952)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG13	10	0.32
(1,952)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG11	18	0.32
(1,952)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG12	18	0.32
(1,952)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG13	18	0.32
(1,828)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:HB1	11	0.32
(1,828)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:HB2	11	0.32
(1,828)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:HB3	11	0.32
(1,79)	1:A:98:ASN:HB3	1:A:98:ASN:HD22	14	0.32
(1,628)	1:A:111:ILE:HD11	1:A:114:GLU:HB3	6	0.32
(1,628)	1:A:111:ILE:HD12	1:A:114:GLU:HB3	6	0.32
(1,628)	1:A:111:ILE:HD13	1:A:114:GLU:HB3	6	0.32
(1,616)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:83:ILE:HD11	8	0.32
(1,616)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:83:ILE:HD12	8	0.32
(1,616)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:83:ILE:HD13	8	0.32

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,616)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:83:ILE:HD11	14	0.32
(1,616)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:83:ILE:HD12	14	0.32
(1,616)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:83:ILE:HD13	14	0.32
(1,471)	1:A:196:GLU:H	1:A:196:GLU:HB3	3	0.32
(1,2421)	1:A:234:ILE:HG13	1:A:235:ALA:H	17	0.32
(1,2415)	1:A:232:GLN:HG3	1:A:232:GLN:HE22	5	0.32
(1,2388)	1:A:223:LYS:HD3	1:A:223:LYS:HE3	8	0.32
(1,2383)	1:A:223:LYS:HB3	1:A:223:LYS:HD3	3	0.32
(1,2381)	1:A:223:LYS:HA	1:A:226:ARG:HB3	4	0.32
(1,2381)	1:A:223:LYS:HA	1:A:226:ARG:HB3	18	0.32
(1,2298)	1:A:200:ARG:HG3	1:A:202:PHE:H	13	0.32
(1,2296)	1:A:200:ARG:HG3	1:A:200:ARG:HD3	2	0.32
(1,2295)	1:A:200:ARG:HB3	1:A:200:ARG:HG3	19	0.32
(1,2293)	1:A:199:SER:HB3	1:A:202:PHE:HB3	9	0.32
(1,2292)	1:A:199:SER:H	1:A:199:SER:HB3	19	0.32
(1,2290)	1:A:198:GLU:HB3	1:A:198:GLU:HG3	1	0.32
(1,2248)	1:A:194:ALA:HB1	1:A:196:GLU:HG3	20	0.32
(1,2248)	1:A:194:ALA:HB2	1:A:196:GLU:HG3	20	0.32
(1,2248)	1:A:194:ALA:HB3	1:A:196:GLU:HG3	20	0.32
(1,2216)	1:A:185:THR:HG21	1:A:189:LEU:HB3	1	0.32
(1,2216)	1:A:185:THR:HG22	1:A:189:LEU:HB3	1	0.32
(1,2216)	1:A:185:THR:HG23	1:A:189:LEU:HB3	1	0.32
(1,2208)	1:A:184:ARG:HA	1:A:184:ARG:HG3	2	0.32
(1,2205)	1:A:184:ARG:H	1:A:184:ARG:HB3	6	0.32
(1,2199)	1:A:182:ARG:HA	1:A:182:ARG:HG3	4	0.32
(1,2172)	1:A:177:ASN:HB3	1:A:178:ASN:H	1	0.32
(1,2123)	1:A:171:ILE:HG21	1:A:172:PRO:HD3	17	0.32
(1,2123)	1:A:171:ILE:HG22	1:A:172:PRO:HD3	17	0.32
(1,2123)	1:A:171:ILE:HG23	1:A:172:PRO:HD3	17	0.32
(1,2106)	1:A:167:TYR:HB3	1:A:221:ILE:H	10	0.32
(1,2105)	1:A:167:TYR:H	1:A:221:ILE:HG13	1	0.32
(1,2096)	1:A:166:LYS:H	1:A:166:LYS:HG3	13	0.32
(1,2035)	1:A:152:GLN:H	1:A:152:GLN:HG3	19	0.32
(1,2006)	1:A:144:LEU:HB3	1:A:180:LEU:HD11	1	0.32
(1,2006)	1:A:144:LEU:HB3	1:A:180:LEU:HD12	1	0.32
(1,2006)	1:A:144:LEU:HB3	1:A:180:LEU:HD13	1	0.32
(1,2006)	1:A:144:LEU:HB3	1:A:180:LEU:HD21	1	0.32
(1,2006)	1:A:144:LEU:HB3	1:A:180:LEU:HD22	1	0.32
(1,2006)	1:A:144:LEU:HB3	1:A:180:LEU:HD23	1	0.32
(1,2006)	1:A:144:LEU:HB3	1:A:180:LEU:HD11	12	0.32
(1,2006)	1:A:144:LEU:HB3	1:A:180:LEU:HD12	12	0.32
(1,2006)	1:A:144:LEU:HB3	1:A:180:LEU:HD13	12	0.32

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2006)	1:A:144:LEU:HB3	1:A:180:LEU:HD21	12	0.32
(1,2006)	1:A:144:LEU:HB3	1:A:180:LEU:HD22	12	0.32
(1,2006)	1:A:144:LEU:HB3	1:A:180:LEU:HD23	12	0.32
(1,2004)	1:A:144:LEU:HA	1:A:148:TRP:HB3	12	0.32
(1,1917)	1:A:126:ASP:HB3	1:A:129:VAL:HG11	15	0.32
(1,1917)	1:A:126:ASP:HB3	1:A:129:VAL:HG12	15	0.32
(1,1917)	1:A:126:ASP:HB3	1:A:129:VAL:HG13	15	0.32
(1,1917)	1:A:126:ASP:HB3	1:A:129:VAL:HG21	15	0.32
(1,1917)	1:A:126:ASP:HB3	1:A:129:VAL:HG22	15	0.32
(1,1917)	1:A:126:ASP:HB3	1:A:129:VAL:HG23	15	0.32
(1,1914)	1:A:125:LEU:HD11	1:A:157:LEU:HB3	9	0.32
(1,1914)	1:A:125:LEU:HD12	1:A:157:LEU:HB3	9	0.32
(1,1914)	1:A:125:LEU:HD13	1:A:157:LEU:HB3	9	0.32
(1,1914)	1:A:125:LEU:HD21	1:A:157:LEU:HB3	9	0.32
(1,1914)	1:A:125:LEU:HD22	1:A:157:LEU:HB3	9	0.32
(1,1914)	1:A:125:LEU:HD23	1:A:157:LEU:HB3	9	0.32
(1,1895)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:122:LEU:HD11	2	0.32
(1,1895)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:122:LEU:HD12	2	0.32
(1,1895)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:122:LEU:HD13	2	0.32
(1,1895)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:122:LEU:HD21	2	0.32
(1,1895)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:122:LEU:HD22	2	0.32
(1,1895)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:122:LEU:HD23	2	0.32
(1,1879)	1:A:110:ILE:HD11	1:A:115:MET:HG3	5	0.32
(1,1879)	1:A:110:ILE:HD12	1:A:115:MET:HG3	5	0.32
(1,1879)	1:A:110:ILE:HD13	1:A:115:MET:HG3	5	0.32
(1,1879)	1:A:110:ILE:HD11	1:A:115:MET:HG3	8	0.32
(1,1879)	1:A:110:ILE:HD12	1:A:115:MET:HG3	8	0.32
(1,1879)	1:A:110:ILE:HD13	1:A:115:MET:HG3	8	0.32
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG11	11	0.32
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG12	11	0.32
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG13	11	0.32
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG21	11	0.32
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG22	11	0.32
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG23	11	0.32
(1,1853)	1:A:101:GLN:HB3	1:A:108:PRO:HA	3	0.32
(1,1754)	1:A:91:ASP:HB3	1:A:94:LEU:HD11	11	0.32
(1,1754)	1:A:91:ASP:HB3	1:A:94:LEU:HD12	11	0.32
(1,1754)	1:A:91:ASP:HB3	1:A:94:LEU:HD13	11	0.32
(1,1754)	1:A:91:ASP:HB3	1:A:94:LEU:HD21	11	0.32
(1,1754)	1:A:91:ASP:HB3	1:A:94:LEU:HD22	11	0.32
(1,1754)	1:A:91:ASP:HB3	1:A:94:LEU:HD23	11	0.32
(1,1747)	1:A:89:ASP:HB3	1:A:93:ALA:H	5	0.32

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1739)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:88:ASP:H	8	0.32
(1,1739)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:88:ASP:H	11	0.32
(1,1679)	1:A:80:LYS:HG3	1:A:80:LYS:HE3	3	0.32
(1,1643)	1:A:75:GLU:HB3	1:A:76:GLU:H	3	0.32
(1,1372)	1:A:163:ARG:HD3	1:A:164:GLN:H	9	0.32
(1,1364)	1:A:208:ARG:HA	1:A:208:ARG:HD3	8	0.32
(1,1363)	1:A:205:GLN:HA	1:A:208:ARG:HD3	10	0.32
(1,1354)	1:A:182:ARG:HB3	1:A:182:ARG:HD3	5	0.32
(1,1354)	1:A:182:ARG:HB3	1:A:182:ARG:HD3	17	0.32
(1,1354)	1:A:182:ARG:HB3	1:A:182:ARG:HD3	19	0.32
(1,135)	1:A:163:ARG:H	1:A:163:ARG:HD3	17	0.32
(1,1333)	1:A:107:LYS:H	1:A:107:LYS:HE3	18	0.32
(1,1316)	1:A:209:ILE:HB	1:A:210:PHE:HB3	17	0.32
(1,1312)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:H	1	0.32
(1,13)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:105:GLY:H	6	0.32
(1,13)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:105:GLY:H	7	0.32
(1,13)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:105:GLY:H	16	0.32
(1,1285)	1:A:75:GLU:H	1:A:75:GLU:HG3	12	0.32
(1,1276)	1:A:212:GLU:HG3	1:A:216:LYS:HD3	20	0.32
(1,1220)	1:A:216:LYS:HD3	1:A:217:THR:H	17	0.32
(1,100)	1:A:145:ARG:HB3	1:A:146:ASP:H	14	0.32
(1,952)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG11	1	0.31
(1,952)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG12	1	0.31
(1,952)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG13	1	0.31
(1,856)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG21	9	0.31
(1,856)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG22	9	0.31
(1,856)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG23	9	0.31
(1,828)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:HB1	3	0.31
(1,828)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:HB2	3	0.31
(1,828)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:HB3	3	0.31
(1,810)	1:A:173:MET:HE1	1:A:197:GLU:HB3	16	0.31
(1,810)	1:A:173:MET:HE2	1:A:197:GLU:HB3	16	0.31
(1,810)	1:A:173:MET:HE3	1:A:197:GLU:HB3	16	0.31
(1,628)	1:A:111:ILE:HD11	1:A:114:GLU:HB3	9	0.31
(1,628)	1:A:111:ILE:HD12	1:A:114:GLU:HB3	9	0.31
(1,628)	1:A:111:ILE:HD13	1:A:114:GLU:HB3	9	0.31
(1,438)	1:A:180:LEU:H	1:A:181:PRO:HG3	12	0.31
(1,391)	1:A:230:GLN:H	1:A:230:GLN:HG3	5	0.31
(1,2389)	1:A:223:LYS:HE3	1:A:224:GLU:HB3	2	0.31
(1,2389)	1:A:223:LYS:HE3	1:A:224:GLU:HB3	7	0.31
(1,2386)	1:A:223:LYS:HG3	1:A:223:LYS:HE3	10	0.31
(1,2370)	1:A:220:THR:HA	1:A:223:LYS:HB3	11	0.31

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2325)	1:A:212:GLU:H	1:A:212:GLU:HG3	12	0.31
(1,2325)	1:A:212:GLU:H	1:A:212:GLU:HG3	18	0.31
(1,2297)	1:A:200:ARG:HG3	1:A:201:GLY:H	19	0.31
(1,2292)	1:A:199:SER:H	1:A:199:SER:HB3	15	0.31
(1,2290)	1:A:198:GLU:HB3	1:A:198:GLU:HG3	14	0.31
(1,2283)	1:A:197:GLU:HA	1:A:197:GLU:HG3	1	0.31
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD11	1:A:202:PHE:HB3	8	0.31
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD12	1:A:202:PHE:HB3	8	0.31
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD13	1:A:202:PHE:HB3	8	0.31
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD21	1:A:202:PHE:HB3	8	0.31
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD22	1:A:202:PHE:HB3	8	0.31
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD23	1:A:202:PHE:HB3	8	0.31
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD11	1:A:202:PHE:HB3	17	0.31
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD12	1:A:202:PHE:HB3	17	0.31
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD13	1:A:202:PHE:HB3	17	0.31
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD21	1:A:202:PHE:HB3	17	0.31
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD22	1:A:202:PHE:HB3	17	0.31
(1,2257)	1:A:195:LEU:HD23	1:A:202:PHE:HB3	17	0.31
(1,2208)	1:A:184:ARG:HA	1:A:184:ARG:HG3	4	0.31
(1,2208)	1:A:184:ARG:HA	1:A:184:ARG:HG3	12	0.31
(1,2208)	1:A:184:ARG:HA	1:A:184:ARG:HG3	15	0.31
(1,2208)	1:A:184:ARG:HA	1:A:184:ARG:HG3	17	0.31
(1,2205)	1:A:184:ARG:H	1:A:184:ARG:HB3	3	0.31
(1,2204)	1:A:183:GLU:HG3	1:A:184:ARG:HG3	11	0.31
(1,2201)	1:A:183:GLU:HA	1:A:183:GLU:HG3	5	0.31
(1,2193)	1:A:180:LEU:HD11	1:A:184:ARG:HD3	8	0.31
(1,2193)	1:A:180:LEU:HD12	1:A:184:ARG:HD3	8	0.31
(1,2193)	1:A:180:LEU:HD13	1:A:184:ARG:HD3	8	0.31
(1,2193)	1:A:180:LEU:HD21	1:A:184:ARG:HD3	8	0.31
(1,2193)	1:A:180:LEU:HD22	1:A:184:ARG:HD3	8	0.31
(1,2193)	1:A:180:LEU:HD23	1:A:184:ARG:HD3	8	0.31
(1,215)	1:A:224:GLU:H	1:A:224:GLU:HB3	7	0.31
(1,2139)	1:A:172:PRO:HD3	1:A:194:ALA:HB1	2	0.31
(1,2139)	1:A:172:PRO:HD3	1:A:194:ALA:HB2	2	0.31
(1,2139)	1:A:172:PRO:HD3	1:A:194:ALA:HB3	2	0.31
(1,2059)	1:A:159:ASN:HB3	1:A:160:SER:H	15	0.31
(1,2041)	1:A:156:SER:H	1:A:157:LEU:HB3	13	0.31
(1,2035)	1:A:152:GLN:H	1:A:152:GLN:HG3	10	0.31
(1,2035)	1:A:152:GLN:H	1:A:152:GLN:HG3	17	0.31
(1,2035)	1:A:152:GLN:H	1:A:152:GLN:HG3	20	0.31
(1,1988)	1:A:140:THR:HG21	1:A:142:ASN:HB3	12	0.31
(1,1988)	1:A:140:THR:HG22	1:A:142:ASN:HB3	12	0.31

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1988)	1:A:140:THR:HG23	1:A:142:ASN:HB3	12	0.31
(1,1988)	1:A:140:THR:HG21	1:A:142:ASN:HB3	14	0.31
(1,1988)	1:A:140:THR:HG22	1:A:142:ASN:HB3	14	0.31
(1,1988)	1:A:140:THR:HG23	1:A:142:ASN:HB3	14	0.31
(1,1988)	1:A:140:THR:HG21	1:A:142:ASN:HB3	16	0.31
(1,1988)	1:A:140:THR:HG22	1:A:142:ASN:HB3	16	0.31
(1,1988)	1:A:140:THR:HG23	1:A:142:ASN:HB3	16	0.31
(1,1955)	1:A:138:LEU:H	1:A:138:LEU:HB3	15	0.31
(1,1890)	1:A:117:HIS:HE1	1:A:122:LEU:HB3	18	0.31
(1,1886)	1:A:115:MET:HB3	1:A:115:MET:HE1	8	0.31
(1,1886)	1:A:115:MET:HB3	1:A:115:MET:HE2	8	0.31
(1,1886)	1:A:115:MET:HB3	1:A:115:MET:HE3	8	0.31
(1,1879)	1:A:110:ILE:HD11	1:A:115:MET:HG3	10	0.31
(1,1879)	1:A:110:ILE:HD12	1:A:115:MET:HG3	10	0.31
(1,1879)	1:A:110:ILE:HD13	1:A:115:MET:HG3	10	0.31
(1,1871)	1:A:107:LYS:HA	1:A:107:LYS:HD3	15	0.31
(1,1816)	1:A:100:LEU:HB3	1:A:101:GLN:H	17	0.31
(1,1816)	1:A:100:LEU:HB3	1:A:101:GLN:H	19	0.31
(1,179)	1:A:95:ARG:HD3	1:A:98:ASN:H	2	0.31
(1,1618)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD1	2	0.31
(1,1618)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD2	2	0.31
(1,1618)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD1	4	0.31
(1,1618)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD2	4	0.31
(1,1587)	1:A:203:PRO:HA	1:A:206:VAL:HB	18	0.31
(1,1521)	1:A:182:ARG:HA	1:A:182:ARG:HD3	3	0.31
(1,1499)	1:A:223:LYS:HA	1:A:223:LYS:HD3	5	0.31
(1,1486)	1:A:145:ARG:HA	1:A:145:ARG:HG3	2	0.31
(1,1372)	1:A:163:ARG:HD3	1:A:164:GLN:H	16	0.31
(1,1369)	1:A:163:ARG:HD3	1:A:192:ILE:HG21	10	0.31
(1,1369)	1:A:163:ARG:HD3	1:A:192:ILE:HG22	10	0.31
(1,1369)	1:A:163:ARG:HD3	1:A:192:ILE:HG23	10	0.31
(1,1365)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:211:GLN:HE21	12	0.31
(1,1365)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:211:GLN:HE22	12	0.31
(1,1364)	1:A:208:ARG:HA	1:A:208:ARG:HD3	6	0.31
(1,1356)	1:A:145:ARG:HB3	1:A:145:ARG:HD3	20	0.31
(1,1351)	1:A:200:ARG:HA	1:A:200:ARG:HD3	4	0.31
(1,1342)	1:A:215:TYR:HD1	1:A:216:LYS:HE3	20	0.31
(1,1342)	1:A:215:TYR:HD2	1:A:216:LYS:HE3	20	0.31
(1,1333)	1:A:107:LYS:H	1:A:107:LYS:HE3	5	0.31
(1,1324)	1:A:166:LYS:HA	1:A:166:LYS:HE3	12	0.31
(1,1321)	1:A:166:LYS:HE3	1:A:221:ILE:HG21	10	0.31
(1,1321)	1:A:166:LYS:HE3	1:A:221:ILE:HG22	10	0.31

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1321)	1:A:166:LYS:HE3	1:A:221:ILE:HG23	10	0.31
(1,13)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:105:GLY:H	13	0.31
(1,1285)	1:A:75:GLU:H	1:A:75:GLU:HG3	2	0.31
(1,1285)	1:A:75:GLU:H	1:A:75:GLU:HG3	7	0.31
(1,1285)	1:A:75:GLU:H	1:A:75:GLU:HG3	19	0.31
(1,1282)	1:A:183:GLU:HB3	1:A:183:GLU:HG3	17	0.31
(1,1276)	1:A:212:GLU:HG3	1:A:216:LYS:HD3	10	0.31
(1,1263)	1:A:230:GLN:HA	1:A:230:GLN:HG3	20	0.31
(1,1227)	1:A:223:LYS:H	1:A:223:LYS:HD3	19	0.31
(1,1220)	1:A:216:LYS:HD3	1:A:217:THR:H	3	0.31
(1,1213)	1:A:165:HIS:HA	1:A:166:LYS:HD3	5	0.31
(1,952)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG11	7	0.3
(1,952)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG12	7	0.3
(1,952)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG13	7	0.3
(1,952)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG11	9	0.3
(1,952)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG12	9	0.3
(1,952)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG13	9	0.3
(1,952)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG11	11	0.3
(1,952)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG12	11	0.3
(1,952)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG13	11	0.3
(1,952)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG11	12	0.3
(1,952)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG12	12	0.3
(1,952)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG13	12	0.3
(1,952)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG11	15	0.3
(1,952)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG12	15	0.3
(1,952)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG13	15	0.3
(1,952)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG11	17	0.3
(1,952)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG12	17	0.3
(1,952)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG13	17	0.3
(1,79)	1:A:98:ASN:HB3	1:A:98:ASN:HD22	12	0.3
(1,79)	1:A:98:ASN:HB3	1:A:98:ASN:HD22	16	0.3
(1,449)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:H	14	0.3
(1,438)	1:A:180:LEU:H	1:A:181:PRO:HG3	15	0.3
(1,262)	1:A:183:GLU:HB3	1:A:185:THR:H	20	0.3
(1,2418)	1:A:234:ILE:H	1:A:234:ILE:HG13	6	0.3
(1,2411)	1:A:230:GLN:HB3	1:A:230:GLN:HE21	15	0.3
(1,2411)	1:A:230:GLN:HB3	1:A:230:GLN:HE22	15	0.3
(1,2329)	1:A:212:GLU:HG3	1:A:216:LYS:HG3	20	0.3
(1,2325)	1:A:212:GLU:H	1:A:212:GLU:HG3	3	0.3
(1,2296)	1:A:200:ARG:HG3	1:A:200:ARG:HD3	14	0.3
(1,2277)	1:A:196:GLU:HB3	1:A:196:GLU:HG3	5	0.3
(1,2159)	1:A:176:LEU:HG	1:A:198:GLU:HG3	9	0.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2132)	1:A:172:PRO:HG3	1:A:192:ILE:HG21	11	0.3
(1,2132)	1:A:172:PRO:HG3	1:A:192:ILE:HG22	11	0.3
(1,2132)	1:A:172:PRO:HG3	1:A:192:ILE:HG23	11	0.3
(1,2105)	1:A:167:TYR:H	1:A:221:ILE:HG13	3	0.3
(1,2105)	1:A:167:TYR:H	1:A:221:ILE:HG13	19	0.3
(1,2098)	1:A:166:LYS:HB3	1:A:166:LYS:HE3	17	0.3
(1,2096)	1:A:166:LYS:H	1:A:166:LYS:HG3	6	0.3
(1,2096)	1:A:166:LYS:H	1:A:166:LYS:HG3	19	0.3
(1,2091)	1:A:164:GLN:HB3	1:A:164:GLN:HE21	1	0.3
(1,2091)	1:A:164:GLN:HB3	1:A:164:GLN:HE22	1	0.3
(1,1999)	1:A:141:GLU:HG3	1:A:142:ASN:H	17	0.3
(1,1989)	1:A:140:THR:HG21	1:A:143:PHE:HB3	8	0.3
(1,1989)	1:A:140:THR:HG22	1:A:143:PHE:HB3	8	0.3
(1,1989)	1:A:140:THR:HG23	1:A:143:PHE:HB3	8	0.3
(1,1988)	1:A:140:THR:HG21	1:A:142:ASN:HB3	4	0.3
(1,1988)	1:A:140:THR:HG22	1:A:142:ASN:HB3	4	0.3
(1,1988)	1:A:140:THR:HG23	1:A:142:ASN:HB3	4	0.3
(1,1988)	1:A:140:THR:HG21	1:A:142:ASN:HB3	7	0.3
(1,1988)	1:A:140:THR:HG22	1:A:142:ASN:HB3	7	0.3
(1,1988)	1:A:140:THR:HG23	1:A:142:ASN:HB3	7	0.3
(1,1955)	1:A:138:LEU:H	1:A:138:LEU:HB3	19	0.3
(1,1898)	1:A:123:GLN:H	1:A:123:GLN:HG3	17	0.3
(1,1893)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:121:HIS:HD2	7	0.3
(1,1892)	1:A:120:GLN:HG3	1:A:120:GLN:HE21	1	0.3
(1,1892)	1:A:120:GLN:HG3	1:A:120:GLN:HE22	1	0.3
(1,1892)	1:A:120:GLN:HG3	1:A:120:GLN:HE21	4	0.3
(1,1892)	1:A:120:GLN:HG3	1:A:120:GLN:HE22	4	0.3
(1,1889)	1:A:117:HIS:HB3	1:A:117:HIS:HD2	11	0.3
(1,1887)	1:A:115:MET:HG3	1:A:115:MET:HE1	5	0.3
(1,1887)	1:A:115:MET:HG3	1:A:115:MET:HE2	5	0.3
(1,1887)	1:A:115:MET:HG3	1:A:115:MET:HE3	5	0.3
(1,1887)	1:A:115:MET:HG3	1:A:115:MET:HE1	7	0.3
(1,1887)	1:A:115:MET:HG3	1:A:115:MET:HE2	7	0.3
(1,1887)	1:A:115:MET:HG3	1:A:115:MET:HE3	7	0.3
(1,1887)	1:A:115:MET:HG3	1:A:115:MET:HE1	8	0.3
(1,1887)	1:A:115:MET:HG3	1:A:115:MET:HE2	8	0.3
(1,1887)	1:A:115:MET:HG3	1:A:115:MET:HE3	8	0.3
(1,1887)	1:A:115:MET:HG3	1:A:115:MET:HE1	10	0.3
(1,1887)	1:A:115:MET:HG3	1:A:115:MET:HE2	10	0.3
(1,1887)	1:A:115:MET:HG3	1:A:115:MET:HE3	10	0.3
(1,1887)	1:A:115:MET:HG3	1:A:115:MET:HE1	13	0.3
(1,1887)	1:A:115:MET:HG3	1:A:115:MET:HE2	13	0.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1887)	1:A:115:MET:HG3	1:A:115:MET:HE3	13	0.3
(1,1887)	1:A:115:MET:HG3	1:A:115:MET:HE1	16	0.3
(1,1887)	1:A:115:MET:HG3	1:A:115:MET:HE2	16	0.3
(1,1887)	1:A:115:MET:HG3	1:A:115:MET:HE3	16	0.3
(1,1886)	1:A:115:MET:HB3	1:A:115:MET:HE1	10	0.3
(1,1886)	1:A:115:MET:HB3	1:A:115:MET:HE2	10	0.3
(1,1886)	1:A:115:MET:HB3	1:A:115:MET:HE3	10	0.3
(1,1881)	1:A:111:ILE:HG13	1:A:114:GLU:HG3	11	0.3
(1,1871)	1:A:107:LYS:HA	1:A:107:LYS:HD3	6	0.3
(1,1849)	1:A:101:GLN:HB3	1:A:101:GLN:HE21	3	0.3
(1,1849)	1:A:101:GLN:HB3	1:A:101:GLN:HE22	3	0.3
(1,1754)	1:A:91:ASP:HB3	1:A:94:LEU:HD11	8	0.3
(1,1754)	1:A:91:ASP:HB3	1:A:94:LEU:HD12	8	0.3
(1,1754)	1:A:91:ASP:HB3	1:A:94:LEU:HD13	8	0.3
(1,1754)	1:A:91:ASP:HB3	1:A:94:LEU:HD21	8	0.3
(1,1754)	1:A:91:ASP:HB3	1:A:94:LEU:HD22	8	0.3
(1,1754)	1:A:91:ASP:HB3	1:A:94:LEU:HD23	8	0.3
(1,1754)	1:A:91:ASP:HB3	1:A:94:LEU:HD11	20	0.3
(1,1754)	1:A:91:ASP:HB3	1:A:94:LEU:HD12	20	0.3
(1,1754)	1:A:91:ASP:HB3	1:A:94:LEU:HD13	20	0.3
(1,1754)	1:A:91:ASP:HB3	1:A:94:LEU:HD21	20	0.3
(1,1754)	1:A:91:ASP:HB3	1:A:94:LEU:HD22	20	0.3
(1,1754)	1:A:91:ASP:HB3	1:A:94:LEU:HD23	20	0.3
(1,1751)	1:A:91:ASP:H	1:A:92:GLU:HB3	20	0.3
(1,1734)	1:A:85:HIS:HB3	1:A:111:ILE:HD11	10	0.3
(1,1734)	1:A:85:HIS:HB3	1:A:111:ILE:HD12	10	0.3
(1,1734)	1:A:85:HIS:HB3	1:A:111:ILE:HD13	10	0.3
(1,1709)	1:A:83:ILE:HA	1:A:136:ILE:HG13	17	0.3
(1,1703)	1:A:82:VAL:HG11	1:A:132:SER:HB3	1	0.3
(1,1703)	1:A:82:VAL:HG12	1:A:132:SER:HB3	1	0.3
(1,1703)	1:A:82:VAL:HG13	1:A:132:SER:HB3	1	0.3
(1,1703)	1:A:82:VAL:HG21	1:A:132:SER:HB3	1	0.3
(1,1703)	1:A:82:VAL:HG22	1:A:132:SER:HB3	1	0.3
(1,1703)	1:A:82:VAL:HG23	1:A:132:SER:HB3	1	0.3
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:108:PRO:HG3	13	0.3
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:108:PRO:HG3	13	0.3
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:108:PRO:HG3	13	0.3
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:108:PRO:HG3	13	0.3
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:108:PRO:HG3	13	0.3
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:108:PRO:HG3	13	0.3
(1,1655)	1:A:76:GLU:HG3	1:A:222:TRP:HH2	10	0.3
(1,1643)	1:A:75:GLU:HB3	1:A:76:GLU:H	6	0.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1587)	1:A:203:PRO:HA	1:A:206:VAL:HB	12	0.3
(1,1572)	1:A:221:ILE:HA	1:A:224:GLU:HB3	6	0.3
(1,1549)	1:A:107:LYS:HE3	1:A:108:PRO:HA	17	0.3
(1,1368)	1:A:163:ARG:HD3	1:A:192:ILE:HD11	8	0.3
(1,1368)	1:A:163:ARG:HD3	1:A:192:ILE:HD12	8	0.3
(1,1368)	1:A:163:ARG:HD3	1:A:192:ILE:HD13	8	0.3
(1,1351)	1:A:200:ARG:HA	1:A:200:ARG:HD3	13	0.3
(1,1351)	1:A:200:ARG:HA	1:A:200:ARG:HD3	19	0.3
(1,1316)	1:A:209:ILE:HB	1:A:210:PHE:HB3	11	0.3
(1,1316)	1:A:209:ILE:HB	1:A:210:PHE:HB3	15	0.3
(1,1312)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:H	13	0.3
(1,13)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:105:GLY:H	5	0.3
(1,1285)	1:A:75:GLU:H	1:A:75:GLU:HG3	14	0.3
(1,1282)	1:A:183:GLU:HB3	1:A:183:GLU:HG3	5	0.3
(1,1276)	1:A:212:GLU:HG3	1:A:216:LYS:HD3	8	0.3
(1,1263)	1:A:230:GLN:HA	1:A:230:GLN:HG3	11	0.3
(1,1231)	1:A:111:ILE:HG21	1:A:114:GLU:HB3	8	0.3
(1,1231)	1:A:111:ILE:HG22	1:A:114:GLU:HB3	8	0.3
(1,1231)	1:A:111:ILE:HG23	1:A:114:GLU:HB3	8	0.3
(1,1221)	1:A:216:LYS:H	1:A:216:LYS:HD3	5	0.3
(1,1213)	1:A:165:HIS:HA	1:A:166:LYS:HD3	12	0.3
(1,1213)	1:A:165:HIS:HA	1:A:166:LYS:HD3	17	0.3
(1,952)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG11	2	0.29
(1,952)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG12	2	0.29
(1,952)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG13	2	0.29
(1,952)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG11	3	0.29
(1,952)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG12	3	0.29
(1,952)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG13	3	0.29
(1,952)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG11	19	0.29
(1,952)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG12	19	0.29
(1,952)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG13	19	0.29
(1,828)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:HB1	1	0.29
(1,828)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:HB2	1	0.29
(1,828)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:HB3	1	0.29
(1,79)	1:A:98:ASN:HB3	1:A:98:ASN:HD22	10	0.29
(1,79)	1:A:98:ASN:HB3	1:A:98:ASN:HD22	18	0.29
(1,413)	1:A:218:GLN:HG3	1:A:221:ILE:H	13	0.29
(1,391)	1:A:230:GLN:H	1:A:230:GLN:HG3	7	0.29
(1,257)	1:A:205:GLN:HB3	1:A:206:VAL:H	4	0.29
(1,2415)	1:A:232:GLN:HG3	1:A:232:GLN:HE22	6	0.29
(1,2415)	1:A:232:GLN:HG3	1:A:232:GLN:HE22	17	0.29
(1,2415)	1:A:232:GLN:HG3	1:A:232:GLN:HE22	20	0.29

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2414)	1:A:232:GLN:HA	1:A:232:GLN:HG3	2	0.29
(1,2392)	1:A:224:GLU:HA	1:A:227:ASN:HB3	10	0.29
(1,2368)	1:A:219:GLN:HE21	1:A:223:LYS:HD3	19	0.29
(1,2368)	1:A:219:GLN:HE22	1:A:223:LYS:HD3	19	0.29
(1,2363)	1:A:219:GLN:HG3	1:A:223:LYS:HG3	18	0.29
(1,2325)	1:A:212:GLU:H	1:A:212:GLU:HG3	13	0.29
(1,2322)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG11	13	0.29
(1,2322)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG12	13	0.29
(1,2322)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG13	13	0.29
(1,2322)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG21	13	0.29
(1,2322)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG22	13	0.29
(1,2322)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:HG23	13	0.29
(1,2298)	1:A:200:ARG:HG3	1:A:202:PHE:H	2	0.29
(1,2295)	1:A:200:ARG:HB3	1:A:200:ARG:HG3	11	0.29
(1,2295)	1:A:200:ARG:HB3	1:A:200:ARG:HG3	16	0.29
(1,2293)	1:A:199:SER:HB3	1:A:202:PHE:HB3	5	0.29
(1,2292)	1:A:199:SER:H	1:A:199:SER:HB3	13	0.29
(1,2278)	1:A:196:GLU:HB3	1:A:199:SER:HB3	3	0.29
(1,2248)	1:A:194:ALA:HB1	1:A:196:GLU:HG3	14	0.29
(1,2248)	1:A:194:ALA:HB2	1:A:196:GLU:HG3	14	0.29
(1,2248)	1:A:194:ALA:HB3	1:A:196:GLU:HG3	14	0.29
(1,2248)	1:A:194:ALA:HB1	1:A:196:GLU:HG3	16	0.29
(1,2248)	1:A:194:ALA:HB2	1:A:196:GLU:HG3	16	0.29
(1,2248)	1:A:194:ALA:HB3	1:A:196:GLU:HG3	16	0.29
(1,2208)	1:A:184:ARG:HA	1:A:184:ARG:HG3	7	0.29
(1,2206)	1:A:184:ARG:H	1:A:184:ARG:HG3	8	0.29
(1,2205)	1:A:184:ARG:H	1:A:184:ARG:HB3	10	0.29
(1,2202)	1:A:183:GLU:HB3	1:A:184:ARG:HD3	8	0.29
(1,2172)	1:A:177:ASN:HB3	1:A:178:ASN:H	2	0.29
(1,2159)	1:A:176:LEU:HG	1:A:198:GLU:HG3	19	0.29
(1,215)	1:A:224:GLU:H	1:A:224:GLU:HB3	9	0.29
(1,2103)	1:A:166:LYS:HG3	1:A:167:TYR:HA	17	0.29
(1,2091)	1:A:164:GLN:HB3	1:A:164:GLN:HE21	6	0.29
(1,2091)	1:A:164:GLN:HB3	1:A:164:GLN:HE22	6	0.29
(1,1999)	1:A:141:GLU:HG3	1:A:142:ASN:H	6	0.29
(1,1998)	1:A:141:GLU:HB3	1:A:142:ASN:H	18	0.29
(1,1988)	1:A:140:THR:HG21	1:A:142:ASN:HB3	1	0.29
(1,1988)	1:A:140:THR:HG22	1:A:142:ASN:HB3	1	0.29
(1,1988)	1:A:140:THR:HG23	1:A:142:ASN:HB3	1	0.29
(1,1988)	1:A:140:THR:HG21	1:A:142:ASN:HB3	11	0.29
(1,1988)	1:A:140:THR:HG22	1:A:142:ASN:HB3	11	0.29
(1,1988)	1:A:140:THR:HG23	1:A:142:ASN:HB3	11	0.29

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1884)	1:A:114:GLU:HA	1:A:114:GLU:HG3	3	0.29
(1,1884)	1:A:114:GLU:HA	1:A:114:GLU:HG3	6	0.29
(1,1884)	1:A:114:GLU:HA	1:A:114:GLU:HG3	9	0.29
(1,1879)	1:A:110:ILE:HD11	1:A:115:MET:HG3	7	0.29
(1,1879)	1:A:110:ILE:HD12	1:A:115:MET:HG3	7	0.29
(1,1879)	1:A:110:ILE:HD13	1:A:115:MET:HG3	7	0.29
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG11	10	0.29
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG12	10	0.29
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG13	10	0.29
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG21	10	0.29
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG22	10	0.29
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG23	10	0.29
(1,1855)	1:A:101:GLN:HG3	1:A:102:ASP:H	13	0.29
(1,1852)	1:A:101:GLN:HB3	1:A:107:LYS:HG3	11	0.29
(1,1765)	1:A:93:ALA:HA	1:A:95:ARG:HB3	17	0.29
(1,1679)	1:A:80:LYS:HG3	1:A:80:LYS:HE3	8	0.29
(1,1618)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD1	20	0.29
(1,1618)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD2	20	0.29
(1,1603)	1:A:146:ASP:HB3	1:A:147:THR:HB	10	0.29
(1,1587)	1:A:203:PRO:HA	1:A:206:VAL:HB	10	0.29
(1,1526)	1:A:192:ILE:HA	1:A:193:ASN:HB3	17	0.29
(1,1521)	1:A:182:ARG:HA	1:A:182:ARG:HD3	16	0.29
(1,135)	1:A:163:ARG:H	1:A:163:ARG:HD3	5	0.29
(1,1338)	1:A:216:LYS:HB3	1:A:216:LYS:HE3	4	0.29
(1,1333)	1:A:107:LYS:H	1:A:107:LYS:HE3	10	0.29
(1,1322)	1:A:166:LYS:HG3	1:A:166:LYS:HE3	10	0.29
(1,1316)	1:A:209:ILE:HB	1:A:210:PHE:HB3	20	0.29
(1,1303)	1:A:87:GLU:HG3	1:A:88:ASP:HA	18	0.29
(1,13)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:105:GLY:H	20	0.29
(1,1291)	1:A:224:GLU:HB3	1:A:224:GLU:HG3	4	0.29
(1,1263)	1:A:230:GLN:HA	1:A:230:GLN:HG3	9	0.29
(1,1227)	1:A:223:LYS:H	1:A:223:LYS:HD3	17	0.29
(1,1221)	1:A:216:LYS:H	1:A:216:LYS:HD3	12	0.29
(1,1213)	1:A:165:HIS:HA	1:A:166:LYS:HD3	2	0.29
(1,100)	1:A:145:ARG:HB3	1:A:146:ASP:H	10	0.29
(1,100)	1:A:145:ARG:HB3	1:A:146:ASP:H	18	0.29
(1,922)	1:A:217:THR:HG21	1:A:218:GLN:HG3	9	0.28
(1,922)	1:A:217:THR:HG22	1:A:218:GLN:HG3	9	0.28
(1,922)	1:A:217:THR:HG23	1:A:218:GLN:HG3	9	0.28
(1,810)	1:A:173:MET:HE1	1:A:197:GLU:HB3	19	0.28
(1,810)	1:A:173:MET:HE2	1:A:197:GLU:HB3	19	0.28
(1,810)	1:A:173:MET:HE3	1:A:197:GLU:HB3	19	0.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,734)	1:A:192:ILE:HG21	1:A:193:ASN:HB3	6	0.28
(1,734)	1:A:192:ILE:HG22	1:A:193:ASN:HB3	6	0.28
(1,734)	1:A:192:ILE:HG23	1:A:193:ASN:HB3	6	0.28
(1,734)	1:A:192:ILE:HG21	1:A:193:ASN:HB3	8	0.28
(1,734)	1:A:192:ILE:HG22	1:A:193:ASN:HB3	8	0.28
(1,734)	1:A:192:ILE:HG23	1:A:193:ASN:HB3	8	0.28
(1,413)	1:A:218:GLN:HG3	1:A:221:ILE:H	19	0.28
(1,3)	1:A:80:LYS:HD3	1:A:81:PHE:H	7	0.28
(1,2415)	1:A:232:GLN:HG3	1:A:232:GLN:HE22	7	0.28
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG11	1:A:230:GLN:HG3	7	0.28
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG12	1:A:230:GLN:HG3	7	0.28
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG13	1:A:230:GLN:HG3	7	0.28
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG21	1:A:230:GLN:HG3	7	0.28
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG22	1:A:230:GLN:HG3	7	0.28
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG23	1:A:230:GLN:HG3	7	0.28
(1,2393)	1:A:224:GLU:HB3	1:A:224:GLU:HG3	12	0.28
(1,2325)	1:A:212:GLU:H	1:A:212:GLU:HG3	20	0.28
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG11	1	0.28
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG12	1	0.28
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG13	1	0.28
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG21	1	0.28
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG22	1	0.28
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG23	1	0.28
(1,2295)	1:A:200:ARG:HB3	1:A:200:ARG:HG3	3	0.28
(1,2280)	1:A:196:GLU:HG3	1:A:199:SER:HB3	11	0.28
(1,2248)	1:A:194:ALA:HB1	1:A:196:GLU:HG3	9	0.28
(1,2248)	1:A:194:ALA:HB2	1:A:196:GLU:HG3	9	0.28
(1,2248)	1:A:194:ALA:HB3	1:A:196:GLU:HG3	9	0.28
(1,2248)	1:A:194:ALA:HB1	1:A:196:GLU:HG3	15	0.28
(1,2248)	1:A:194:ALA:HB2	1:A:196:GLU:HG3	15	0.28
(1,2248)	1:A:194:ALA:HB3	1:A:196:GLU:HG3	15	0.28
(1,2216)	1:A:185:THR:HG21	1:A:189:LEU:HB3	17	0.28
(1,2216)	1:A:185:THR:HG22	1:A:189:LEU:HB3	17	0.28
(1,2216)	1:A:185:THR:HG23	1:A:189:LEU:HB3	17	0.28
(1,2206)	1:A:184:ARG:H	1:A:184:ARG:HG3	19	0.28
(1,2205)	1:A:184:ARG:H	1:A:184:ARG:HB3	13	0.28
(1,215)	1:A:224:GLU:H	1:A:224:GLU:HB3	8	0.28
(1,215)	1:A:224:GLU:H	1:A:224:GLU:HB3	14	0.28
(1,2103)	1:A:166:LYS:HG3	1:A:167:TYR:HA	1	0.28
(1,2099)	1:A:166:LYS:HB3	1:A:167:TYR:H	4	0.28
(1,2098)	1:A:166:LYS:HB3	1:A:166:LYS:HE3	8	0.28
(1,2085)	1:A:163:ARG:HB3	1:A:163:ARG:HD3	14	0.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2035)	1:A:152:GLN:H	1:A:152:GLN:HG3	3	0.28
(1,2035)	1:A:152:GLN:H	1:A:152:GLN:HG3	5	0.28
(1,2035)	1:A:152:GLN:H	1:A:152:GLN:HG3	18	0.28
(1,1934)	1:A:132:SER:HB3	1:A:134:TRP:H	11	0.28
(1,1889)	1:A:117:HIS:HB3	1:A:117:HIS:HD2	15	0.28
(1,1887)	1:A:115:MET:HG3	1:A:115:MET:HE1	11	0.28
(1,1887)	1:A:115:MET:HG3	1:A:115:MET:HE2	11	0.28
(1,1887)	1:A:115:MET:HG3	1:A:115:MET:HE3	11	0.28
(1,1886)	1:A:115:MET:HB3	1:A:115:MET:HE1	7	0.28
(1,1886)	1:A:115:MET:HB3	1:A:115:MET:HE2	7	0.28
(1,1886)	1:A:115:MET:HB3	1:A:115:MET:HE3	7	0.28
(1,1884)	1:A:114:GLU:HA	1:A:114:GLU:HG3	20	0.28
(1,1871)	1:A:107:LYS:HA	1:A:107:LYS:HD3	12	0.28
(1,1854)	1:A:101:GLN:HB3	1:A:109:GLY:H	7	0.28
(1,1800)	1:A:97:GLN:HB3	1:A:98:ASN:H	20	0.28
(1,1765)	1:A:93:ALA:HA	1:A:95:ARG:HB3	3	0.28
(1,1754)	1:A:91:ASP:HB3	1:A:94:LEU:HD11	3	0.28
(1,1754)	1:A:91:ASP:HB3	1:A:94:LEU:HD12	3	0.28
(1,1754)	1:A:91:ASP:HB3	1:A:94:LEU:HD13	3	0.28
(1,1754)	1:A:91:ASP:HB3	1:A:94:LEU:HD21	3	0.28
(1,1754)	1:A:91:ASP:HB3	1:A:94:LEU:HD22	3	0.28
(1,1754)	1:A:91:ASP:HB3	1:A:94:LEU:HD23	3	0.28
(1,1754)	1:A:91:ASP:HB3	1:A:94:LEU:HD11	6	0.28
(1,1754)	1:A:91:ASP:HB3	1:A:94:LEU:HD12	6	0.28
(1,1754)	1:A:91:ASP:HB3	1:A:94:LEU:HD13	6	0.28
(1,1754)	1:A:91:ASP:HB3	1:A:94:LEU:HD21	6	0.28
(1,1754)	1:A:91:ASP:HB3	1:A:94:LEU:HD22	6	0.28
(1,1754)	1:A:91:ASP:HB3	1:A:94:LEU:HD23	6	0.28
(1,1709)	1:A:83:ILE:HA	1:A:136:ILE:HG13	19	0.28
(1,1703)	1:A:82:VAL:HG11	1:A:132:SER:HB3	7	0.28
(1,1703)	1:A:82:VAL:HG12	1:A:132:SER:HB3	7	0.28
(1,1703)	1:A:82:VAL:HG13	1:A:132:SER:HB3	7	0.28
(1,1703)	1:A:82:VAL:HG21	1:A:132:SER:HB3	7	0.28
(1,1703)	1:A:82:VAL:HG22	1:A:132:SER:HB3	7	0.28
(1,1703)	1:A:82:VAL:HG23	1:A:132:SER:HB3	7	0.28
(1,1676)	1:A:80:LYS:HA	1:A:80:LYS:HG3	3	0.28
(1,1675)	1:A:80:LYS:H	1:A:80:LYS:HE3	19	0.28
(1,1646)	1:A:76:GLU:HA	1:A:76:GLU:HB3	9	0.28
(1,1643)	1:A:75:GLU:HB3	1:A:76:GLU:H	13	0.28
(1,1595)	1:A:220:THR:HA	1:A:223:LYS:HD3	18	0.28
(1,1587)	1:A:203:PRO:HA	1:A:206:VAL:HB	14	0.28
(1,1535)	1:A:77:VAL:HA	1:A:78:PHE:HB3	14	0.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1486)	1:A:145:ARG:HA	1:A:145:ARG:HG3	3	0.28
(1,1475)	1:A:74:SER:HA	1:A:75:GLU:H	7	0.28
(1,1475)	1:A:74:SER:HA	1:A:75:GLU:H	18	0.28
(1,147)	1:A:208:ARG:H	1:A:208:ARG:HD3	10	0.28
(1,147)	1:A:208:ARG:H	1:A:208:ARG:HD3	14	0.28
(1,145)	1:A:207:GLU:HB3	1:A:208:ARG:H	13	0.28
(1,1324)	1:A:166:LYS:HA	1:A:166:LYS:HE3	5	0.28
(1,1316)	1:A:209:ILE:HB	1:A:210:PHE:HB3	6	0.28
(1,1316)	1:A:209:ILE:HB	1:A:210:PHE:HB3	7	0.28
(1,1291)	1:A:224:GLU:HB3	1:A:224:GLU:HG3	2	0.28
(1,1291)	1:A:224:GLU:HB3	1:A:224:GLU:HG3	18	0.28
(1,1291)	1:A:224:GLU:HB3	1:A:224:GLU:HG3	19	0.28
(1,1282)	1:A:183:GLU:HB3	1:A:183:GLU:HG3	1	0.28
(1,1282)	1:A:183:GLU:HB3	1:A:183:GLU:HG3	6	0.28
(1,1282)	1:A:183:GLU:HB3	1:A:183:GLU:HG3	7	0.28
(1,1282)	1:A:183:GLU:HB3	1:A:183:GLU:HG3	9	0.28
(1,1282)	1:A:183:GLU:HB3	1:A:183:GLU:HG3	15	0.28
(1,1282)	1:A:183:GLU:HB3	1:A:183:GLU:HG3	16	0.28
(1,1282)	1:A:183:GLU:HB3	1:A:183:GLU:HG3	19	0.28
(1,1276)	1:A:212:GLU:HG3	1:A:216:LYS:HD3	7	0.28
(1,1220)	1:A:216:LYS:HD3	1:A:217:THR:H	20	0.28
(1,100)	1:A:145:ARG:HB3	1:A:146:ASP:H	2	0.28
(1,100)	1:A:145:ARG:HB3	1:A:146:ASP:H	15	0.28
(1,100)	1:A:145:ARG:HB3	1:A:146:ASP:H	19	0.28
(1,810)	1:A:173:MET:HE1	1:A:197:GLU:HB3	9	0.27
(1,810)	1:A:173:MET:HE2	1:A:197:GLU:HB3	9	0.27
(1,810)	1:A:173:MET:HE3	1:A:197:GLU:HB3	9	0.27
(1,734)	1:A:192:ILE:HG21	1:A:193:ASN:HB3	4	0.27
(1,734)	1:A:192:ILE:HG22	1:A:193:ASN:HB3	4	0.27
(1,734)	1:A:192:ILE:HG23	1:A:193:ASN:HB3	4	0.27
(1,616)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:83:ILE:HD11	2	0.27
(1,616)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:83:ILE:HD12	2	0.27
(1,616)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:83:ILE:HD13	2	0.27
(1,616)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:83:ILE:HD11	16	0.27
(1,616)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:83:ILE:HD12	16	0.27
(1,616)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:83:ILE:HD13	16	0.27
(1,471)	1:A:196:GLU:H	1:A:196:GLU:HB3	20	0.27
(1,449)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:H	1	0.27
(1,449)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:H	4	0.27
(1,449)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:H	18	0.27
(1,413)	1:A:218:GLN:HG3	1:A:221:ILE:H	10	0.27
(1,387)	1:A:80:LYS:HD3	1:A:107:LYS:H	5	0.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,262)	1:A:183:GLU:HB3	1:A:185:THR:H	4	0.27
(1,262)	1:A:183:GLU:HB3	1:A:185:THR:H	13	0.27
(1,2419)	1:A:234:ILE:HA	1:A:234:ILE:HG13	15	0.27
(1,2414)	1:A:232:GLN:HA	1:A:232:GLN:HG3	3	0.27
(1,2351)	1:A:216:LYS:HG3	1:A:216:LYS:HE3	20	0.27
(1,2350)	1:A:216:LYS:HB3	1:A:217:THR:H	4	0.27
(1,2344)	1:A:215:TYR:HD1	1:A:216:LYS:HG3	1	0.27
(1,2344)	1:A:215:TYR:HD2	1:A:216:LYS:HG3	1	0.27
(1,2337)	1:A:214:VAL:HA	1:A:216:LYS:HG3	12	0.27
(1,2325)	1:A:212:GLU:H	1:A:212:GLU:HG3	4	0.27
(1,2325)	1:A:212:GLU:H	1:A:212:GLU:HG3	10	0.27
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG11	15	0.27
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG12	15	0.27
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG13	15	0.27
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG21	15	0.27
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG22	15	0.27
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG23	15	0.27
(1,2292)	1:A:199:SER:H	1:A:199:SER:HB3	16	0.27
(1,2283)	1:A:197:GLU:HA	1:A:197:GLU:HG3	11	0.27
(1,2281)	1:A:196:GLU:HG3	1:A:205:GLN:HE22	5	0.27
(1,2280)	1:A:196:GLU:HG3	1:A:199:SER:HB3	5	0.27
(1,2280)	1:A:196:GLU:HG3	1:A:199:SER:HB3	6	0.27
(1,2244)	1:A:192:ILE:HG13	1:A:193:ASN:H	1	0.27
(1,2205)	1:A:184:ARG:H	1:A:184:ARG:HB3	15	0.27
(1,2204)	1:A:183:GLU:HG3	1:A:184:ARG:HG3	15	0.27
(1,2203)	1:A:183:GLU:HG3	1:A:184:ARG:H	3	0.27
(1,2199)	1:A:182:ARG:HA	1:A:182:ARG:HG3	16	0.27
(1,2149)	1:A:176:LEU:H	1:A:197:GLU:HG3	7	0.27
(1,2135)	1:A:172:PRO:HD3	1:A:192:ILE:HB	14	0.27
(1,2110)	1:A:169:SER:H	1:A:169:SER:HB3	16	0.27
(1,2098)	1:A:166:LYS:HB3	1:A:166:LYS:HE3	5	0.27
(1,2081)	1:A:162:ASN:HB3	1:A:164:GLN:HE21	8	0.27
(1,2081)	1:A:162:ASN:HB3	1:A:164:GLN:HE22	8	0.27
(1,2081)	1:A:162:ASN:HB3	1:A:164:GLN:HE21	10	0.27
(1,2081)	1:A:162:ASN:HB3	1:A:164:GLN:HE22	10	0.27
(1,2036)	1:A:152:GLN:HG3	1:A:152:GLN:HE21	17	0.27
(1,2036)	1:A:152:GLN:HG3	1:A:152:GLN:HE22	17	0.27
(1,2036)	1:A:152:GLN:HG3	1:A:152:GLN:HE21	18	0.27
(1,2036)	1:A:152:GLN:HG3	1:A:152:GLN:HE22	18	0.27
(1,1998)	1:A:141:GLU:HB3	1:A:142:ASN:H	19	0.27
(1,1992)	1:A:141:GLU:H	1:A:144:LEU:HB3	19	0.27
(1,1955)	1:A:138:LEU:H	1:A:138:LEU:HB3	3	0.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1955)	1:A:138:LEU:H	1:A:138:LEU:HB3	10	0.27
(1,1894)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:121:HIS:HE1	11	0.27
(1,1894)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:121:HIS:HE1	12	0.27
(1,1889)	1:A:117:HIS:HB3	1:A:117:HIS:HD2	14	0.27
(1,1886)	1:A:115:MET:HB3	1:A:115:MET:HE1	4	0.27
(1,1886)	1:A:115:MET:HB3	1:A:115:MET:HE2	4	0.27
(1,1886)	1:A:115:MET:HB3	1:A:115:MET:HE3	4	0.27
(1,1884)	1:A:114:GLU:HA	1:A:114:GLU:HG3	15	0.27
(1,1884)	1:A:114:GLU:HA	1:A:114:GLU:HG3	16	0.27
(1,1871)	1:A:107:LYS:HA	1:A:107:LYS:HD3	9	0.27
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG11	18	0.27
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG12	18	0.27
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG13	18	0.27
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG21	18	0.27
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG22	18	0.27
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG23	18	0.27
(1,1751)	1:A:91:ASP:H	1:A:92:GLU:HB3	3	0.27
(1,1747)	1:A:89:ASP:HB3	1:A:93:ALA:H	3	0.27
(1,1679)	1:A:80:LYS:HG3	1:A:80:LYS:HE3	19	0.27
(1,1650)	1:A:76:GLU:HB3	1:A:222:TRP:HZ2	11	0.27
(1,1646)	1:A:76:GLU:HA	1:A:76:GLU:HB3	2	0.27
(1,1644)	1:A:76:GLU:H	1:A:76:GLU:HB3	4	0.27
(1,161)	1:A:158:MET:H	1:A:158:MET:HG3	13	0.27
(1,1566)	1:A:71:PRO:HG3	1:A:74:SER:HB3	13	0.27
(1,1499)	1:A:223:LYS:HA	1:A:223:LYS:HD3	6	0.27
(1,1486)	1:A:145:ARG:HA	1:A:145:ARG:HG3	5	0.27
(1,1364)	1:A:208:ARG:HA	1:A:208:ARG:HD3	4	0.27
(1,1364)	1:A:208:ARG:HA	1:A:208:ARG:HD3	17	0.27
(1,135)	1:A:163:ARG:H	1:A:163:ARG:HD3	6	0.27
(1,1338)	1:A:216:LYS:HB3	1:A:216:LYS:HE3	15	0.27
(1,1316)	1:A:209:ILE:HB	1:A:210:PHE:HB3	9	0.27
(1,13)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:105:GLY:H	8	0.27
(1,13)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:105:GLY:H	17	0.27
(1,1291)	1:A:224:GLU:HB3	1:A:224:GLU:HG3	10	0.27
(1,1285)	1:A:75:GLU:H	1:A:75:GLU:HG3	5	0.27
(1,1282)	1:A:183:GLU:HB3	1:A:183:GLU:HG3	4	0.27
(1,1282)	1:A:183:GLU:HB3	1:A:183:GLU:HG3	8	0.27
(1,1282)	1:A:183:GLU:HB3	1:A:183:GLU:HG3	10	0.27
(1,1282)	1:A:183:GLU:HB3	1:A:183:GLU:HG3	11	0.27
(1,1282)	1:A:183:GLU:HB3	1:A:183:GLU:HG3	12	0.27
(1,1282)	1:A:183:GLU:HB3	1:A:183:GLU:HG3	14	0.27
(1,1282)	1:A:183:GLU:HB3	1:A:183:GLU:HG3	20	0.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1263)	1:A:230:GLN:HA	1:A:230:GLN:HG3	15	0.27
(1,1219)	1:A:215:TYR:HD1	1:A:216:LYS:HD3	10	0.27
(1,1219)	1:A:215:TYR:HD2	1:A:216:LYS:HD3	10	0.27
(1,1210)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:221:ILE:HG21	18	0.27
(1,1210)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:221:ILE:HG22	18	0.27
(1,1210)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:221:ILE:HG23	18	0.27
(1,100)	1:A:145:ARG:HB3	1:A:146:ASP:H	4	0.27
(1,471)	1:A:196:GLU:H	1:A:196:GLU:HB3	18	0.26
(1,449)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:H	6	0.26
(1,449)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:H	8	0.26
(1,449)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:H	12	0.26
(1,449)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:H	15	0.26
(1,449)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:H	19	0.26
(1,445)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:H	13	0.26
(1,413)	1:A:218:GLN:HG3	1:A:221:ILE:H	9	0.26
(1,309)	1:A:223:LYS:H	1:A:224:GLU:HB3	6	0.26
(1,3)	1:A:80:LYS:HD3	1:A:81:PHE:H	14	0.26
(1,2421)	1:A:234:ILE:HG13	1:A:235:ALA:H	12	0.26
(1,2415)	1:A:232:GLN:HG3	1:A:232:GLN:HE22	10	0.26
(1,2397)	1:A:226:ARG:HB3	1:A:226:ARG:HD3	12	0.26
(1,2325)	1:A:212:GLU:H	1:A:212:GLU:HG3	1	0.26
(1,2325)	1:A:212:GLU:H	1:A:212:GLU:HG3	8	0.26
(1,2325)	1:A:212:GLU:H	1:A:212:GLU:HG3	16	0.26
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG11	4	0.26
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG12	4	0.26
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG13	4	0.26
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG21	4	0.26
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG22	4	0.26
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG23	4	0.26
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG11	12	0.26
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG12	12	0.26
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG13	12	0.26
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG21	12	0.26
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG22	12	0.26
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG23	12	0.26
(1,2293)	1:A:199:SER:HB3	1:A:202:PHE:HB3	4	0.26
(1,2293)	1:A:199:SER:HB3	1:A:202:PHE:HB3	10	0.26
(1,2292)	1:A:199:SER:H	1:A:199:SER:HB3	12	0.26
(1,2280)	1:A:196:GLU:HG3	1:A:199:SER:HB3	12	0.26
(1,2248)	1:A:194:ALA:HB1	1:A:196:GLU:HG3	2	0.26
(1,2248)	1:A:194:ALA:HB2	1:A:196:GLU:HG3	2	0.26
(1,2248)	1:A:194:ALA:HB3	1:A:196:GLU:HG3	2	0.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2248)	1:A:194:ALA:HB1	1:A:196:GLU:HG3	17	0.26
(1,2248)	1:A:194:ALA:HB2	1:A:196:GLU:HG3	17	0.26
(1,2248)	1:A:194:ALA:HB3	1:A:196:GLU:HG3	17	0.26
(1,2244)	1:A:192:ILE:HG13	1:A:193:ASN:H	4	0.26
(1,2244)	1:A:192:ILE:HG13	1:A:193:ASN:H	12	0.26
(1,2216)	1:A:185:THR:HG21	1:A:189:LEU:HB3	3	0.26
(1,2216)	1:A:185:THR:HG22	1:A:189:LEU:HB3	3	0.26
(1,2216)	1:A:185:THR:HG23	1:A:189:LEU:HB3	3	0.26
(1,2208)	1:A:184:ARG:HA	1:A:184:ARG:HG3	20	0.26
(1,2206)	1:A:184:ARG:H	1:A:184:ARG:HG3	2	0.26
(1,2205)	1:A:184:ARG:H	1:A:184:ARG:HB3	8	0.26
(1,2158)	1:A:176:LEU:HB3	1:A:197:GLU:HG3	3	0.26
(1,215)	1:A:224:GLU:H	1:A:224:GLU:HB3	1	0.26
(1,215)	1:A:224:GLU:H	1:A:224:GLU:HB3	12	0.26
(1,215)	1:A:224:GLU:H	1:A:224:GLU:HB3	17	0.26
(1,2133)	1:A:172:PRO:HG3	1:A:192:ILE:HD11	2	0.26
(1,2133)	1:A:172:PRO:HG3	1:A:192:ILE:HD12	2	0.26
(1,2133)	1:A:172:PRO:HG3	1:A:192:ILE:HD13	2	0.26
(1,2132)	1:A:172:PRO:HG3	1:A:192:ILE:HG21	10	0.26
(1,2132)	1:A:172:PRO:HG3	1:A:192:ILE:HG22	10	0.26
(1,2132)	1:A:172:PRO:HG3	1:A:192:ILE:HG23	10	0.26
(1,2096)	1:A:166:LYS:H	1:A:166:LYS:HG3	10	0.26
(1,2057)	1:A:159:ASN:HA	1:A:162:ASN:HB3	18	0.26
(1,2019)	1:A:145:ARG:HA	1:A:145:ARG:HD3	19	0.26
(1,1992)	1:A:141:GLU:H	1:A:144:LEU:HB3	12	0.26
(1,1988)	1:A:140:THR:HG21	1:A:142:ASN:HB3	19	0.26
(1,1988)	1:A:140:THR:HG22	1:A:142:ASN:HB3	19	0.26
(1,1988)	1:A:140:THR:HG23	1:A:142:ASN:HB3	19	0.26
(1,1968)	1:A:139:LEU:HB3	1:A:189:LEU:HD11	18	0.26
(1,1968)	1:A:139:LEU:HB3	1:A:189:LEU:HD12	18	0.26
(1,1968)	1:A:139:LEU:HB3	1:A:189:LEU:HD13	18	0.26
(1,1968)	1:A:139:LEU:HB3	1:A:189:LEU:HD21	18	0.26
(1,1968)	1:A:139:LEU:HB3	1:A:189:LEU:HD22	18	0.26
(1,1968)	1:A:139:LEU:HB3	1:A:189:LEU:HD23	18	0.26
(1,1955)	1:A:138:LEU:H	1:A:138:LEU:HB3	7	0.26
(1,1955)	1:A:138:LEU:H	1:A:138:LEU:HB3	17	0.26
(1,1899)	1:A:123:GLN:HB3	1:A:123:GLN:HE21	11	0.26
(1,1899)	1:A:123:GLN:HB3	1:A:123:GLN:HE22	11	0.26
(1,1894)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:121:HIS:HE1	10	0.26
(1,1886)	1:A:115:MET:HB3	1:A:115:MET:HE1	5	0.26
(1,1886)	1:A:115:MET:HB3	1:A:115:MET:HE2	5	0.26
(1,1886)	1:A:115:MET:HB3	1:A:115:MET:HE3	5	0.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1886)	1:A:115:MET:HB3	1:A:115:MET:HE1	13	0.26
(1,1886)	1:A:115:MET:HB3	1:A:115:MET:HE2	13	0.26
(1,1886)	1:A:115:MET:HB3	1:A:115:MET:HE3	13	0.26
(1,1870)	1:A:107:LYS:H	1:A:107:LYS:HB3	13	0.26
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG11	14	0.26
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG12	14	0.26
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG13	14	0.26
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG21	14	0.26
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG22	14	0.26
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG23	14	0.26
(1,1855)	1:A:101:GLN:HG3	1:A:102:ASP:H	18	0.26
(1,1854)	1:A:101:GLN:HB3	1:A:109:GLY:H	10	0.26
(1,1765)	1:A:93:ALA:HA	1:A:95:ARG:HB3	19	0.26
(1,1743)	1:A:89:ASP:H	1:A:89:ASP:HB3	6	0.26
(1,1734)	1:A:85:HIS:HB3	1:A:111:ILE:HD11	14	0.26
(1,1734)	1:A:85:HIS:HB3	1:A:111:ILE:HD12	14	0.26
(1,1734)	1:A:85:HIS:HB3	1:A:111:ILE:HD13	14	0.26
(1,1682)	1:A:80:LYS:HE3	1:A:81:PHE:HB3	1	0.26
(1,1681)	1:A:80:LYS:HG3	1:A:106:ILE:HG21	2	0.26
(1,1681)	1:A:80:LYS:HG3	1:A:106:ILE:HG22	2	0.26
(1,1681)	1:A:80:LYS:HG3	1:A:106:ILE:HG23	2	0.26
(1,1618)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD1	6	0.26
(1,1618)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:210:PHE:HD2	6	0.26
(1,1529)	1:A:80:LYS:HA	1:A:80:LYS:HD3	3	0.26
(1,1529)	1:A:80:LYS:HA	1:A:80:LYS:HD3	8	0.26
(1,1370)	1:A:163:ARG:HB3	1:A:163:ARG:HD3	12	0.26
(1,1370)	1:A:163:ARG:HB3	1:A:163:ARG:HD3	13	0.26
(1,1325)	1:A:166:LYS:H	1:A:166:LYS:HE3	20	0.26
(1,1324)	1:A:166:LYS:HA	1:A:166:LYS:HE3	14	0.26
(1,1321)	1:A:166:LYS:HE3	1:A:221:ILE:HG21	1	0.26
(1,1321)	1:A:166:LYS:HE3	1:A:221:ILE:HG22	1	0.26
(1,1321)	1:A:166:LYS:HE3	1:A:221:ILE:HG23	1	0.26
(1,1312)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:H	17	0.26
(1,1303)	1:A:87:GLU:HG3	1:A:88:ASP:HA	2	0.26
(1,13)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:105:GLY:H	19	0.26
(1,1282)	1:A:183:GLU:HB3	1:A:183:GLU:HG3	2	0.26
(1,1282)	1:A:183:GLU:HB3	1:A:183:GLU:HG3	13	0.26
(1,1276)	1:A:212:GLU:HG3	1:A:216:LYS:HD3	11	0.26
(1,1263)	1:A:230:GLN:HA	1:A:230:GLN:HG3	5	0.26
(1,1219)	1:A:215:TYR:HD1	1:A:216:LYS:HD3	20	0.26
(1,1219)	1:A:215:TYR:HD2	1:A:216:LYS:HD3	20	0.26
(1,1215)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:167:TYR:H	19	0.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,104)	1:A:196:GLU:HB3	1:A:199:SER:H	20	0.26
(1,84)	1:A:197:GLU:HB3	1:A:198:GLU:H	6	0.25
(1,828)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:HB1	13	0.25
(1,828)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:HB2	13	0.25
(1,828)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:HB3	13	0.25
(1,828)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:HB1	17	0.25
(1,828)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:HB2	17	0.25
(1,828)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:HB3	17	0.25
(1,810)	1:A:173:MET:HE1	1:A:197:GLU:HB3	10	0.25
(1,810)	1:A:173:MET:HE2	1:A:197:GLU:HB3	10	0.25
(1,810)	1:A:173:MET:HE3	1:A:197:GLU:HB3	10	0.25
(1,750)	1:A:80:LYS:HB3	1:A:133:ALA:HB1	13	0.25
(1,750)	1:A:80:LYS:HB3	1:A:133:ALA:HB2	13	0.25
(1,750)	1:A:80:LYS:HB3	1:A:133:ALA:HB3	13	0.25
(1,683)	1:A:80:LYS:HD3	1:A:106:ILE:HG21	4	0.25
(1,683)	1:A:80:LYS:HD3	1:A:106:ILE:HG22	4	0.25
(1,683)	1:A:80:LYS:HD3	1:A:106:ILE:HG23	4	0.25
(1,449)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:H	2	0.25
(1,449)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:H	3	0.25
(1,449)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:H	7	0.25
(1,449)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:H	9	0.25
(1,449)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:H	10	0.25
(1,449)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:H	20	0.25
(1,438)	1:A:180:LEU:H	1:A:181:PRO:HG3	7	0.25
(1,43)	1:A:182:ARG:HB3	1:A:190:GLN:HE22	17	0.25
(1,3)	1:A:80:LYS:HD3	1:A:81:PHE:H	5	0.25
(1,2419)	1:A:234:ILE:HA	1:A:234:ILE:HG13	7	0.25
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG11	1:A:230:GLN:HG3	13	0.25
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG12	1:A:230:GLN:HG3	13	0.25
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG13	1:A:230:GLN:HG3	13	0.25
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG21	1:A:230:GLN:HG3	13	0.25
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG22	1:A:230:GLN:HG3	13	0.25
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG23	1:A:230:GLN:HG3	13	0.25
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG11	1:A:230:GLN:HG3	19	0.25
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG12	1:A:230:GLN:HG3	19	0.25
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG13	1:A:230:GLN:HG3	19	0.25
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG21	1:A:230:GLN:HG3	19	0.25
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG22	1:A:230:GLN:HG3	19	0.25
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG23	1:A:230:GLN:HG3	19	0.25
(1,2393)	1:A:224:GLU:HB3	1:A:224:GLU:HG3	15	0.25
(1,2363)	1:A:219:GLN:HG3	1:A:223:LYS:HG3	4	0.25
(1,2325)	1:A:212:GLU:H	1:A:212:GLU:HG3	2	0.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2325)	1:A:212:GLU:H	1:A:212:GLU:HG3	7	0.25
(1,2297)	1:A:200:ARG:HG3	1:A:201:GLY:H	7	0.25
(1,2296)	1:A:200:ARG:HG3	1:A:200:ARG:HD3	15	0.25
(1,2295)	1:A:200:ARG:HB3	1:A:200:ARG:HG3	2	0.25
(1,2295)	1:A:200:ARG:HB3	1:A:200:ARG:HG3	17	0.25
(1,2250)	1:A:195:LEU:H	1:A:196:GLU:HG3	19	0.25
(1,2244)	1:A:192:ILE:HG13	1:A:193:ASN:H	17	0.25
(1,2205)	1:A:184:ARG:H	1:A:184:ARG:HB3	19	0.25
(1,2199)	1:A:182:ARG:HA	1:A:182:ARG:HG3	5	0.25
(1,2083)	1:A:163:ARG:H	1:A:163:ARG:HG3	18	0.25
(1,2037)	1:A:152:GLN:HG3	1:A:153:PHE:H	7	0.25
(1,2036)	1:A:152:GLN:HG3	1:A:152:GLN:HE21	5	0.25
(1,2036)	1:A:152:GLN:HG3	1:A:152:GLN:HE22	5	0.25
(1,2035)	1:A:152:GLN:H	1:A:152:GLN:HG3	8	0.25
(1,2006)	1:A:144:LEU:HB3	1:A:180:LEU:HD11	6	0.25
(1,2006)	1:A:144:LEU:HB3	1:A:180:LEU:HD12	6	0.25
(1,2006)	1:A:144:LEU:HB3	1:A:180:LEU:HD13	6	0.25
(1,2006)	1:A:144:LEU:HB3	1:A:180:LEU:HD21	6	0.25
(1,2006)	1:A:144:LEU:HB3	1:A:180:LEU:HD22	6	0.25
(1,2006)	1:A:144:LEU:HB3	1:A:180:LEU:HD23	6	0.25
(1,2004)	1:A:144:LEU:HA	1:A:148:TRP:HB3	13	0.25
(1,1999)	1:A:141:GLU:HG3	1:A:142:ASN:H	15	0.25
(1,1988)	1:A:140:THR:HG21	1:A:142:ASN:HB3	13	0.25
(1,1988)	1:A:140:THR:HG22	1:A:142:ASN:HB3	13	0.25
(1,1988)	1:A:140:THR:HG23	1:A:142:ASN:HB3	13	0.25
(1,1968)	1:A:139:LEU:HB3	1:A:189:LEU:HD11	13	0.25
(1,1968)	1:A:139:LEU:HB3	1:A:189:LEU:HD12	13	0.25
(1,1968)	1:A:139:LEU:HB3	1:A:189:LEU:HD13	13	0.25
(1,1968)	1:A:139:LEU:HB3	1:A:189:LEU:HD21	13	0.25
(1,1968)	1:A:139:LEU:HB3	1:A:189:LEU:HD22	13	0.25
(1,1968)	1:A:139:LEU:HB3	1:A:189:LEU:HD23	13	0.25
(1,1955)	1:A:138:LEU:H	1:A:138:LEU:HB3	2	0.25
(1,1955)	1:A:138:LEU:H	1:A:138:LEU:HB3	5	0.25
(1,1899)	1:A:123:GLN:HB3	1:A:123:GLN:HE21	3	0.25
(1,1899)	1:A:123:GLN:HB3	1:A:123:GLN:HE22	3	0.25
(1,1899)	1:A:123:GLN:HB3	1:A:123:GLN:HE21	4	0.25
(1,1899)	1:A:123:GLN:HB3	1:A:123:GLN:HE22	4	0.25
(1,1889)	1:A:117:HIS:HB3	1:A:117:HIS:HD2	10	0.25
(1,1886)	1:A:115:MET:HB3	1:A:115:MET:HE1	16	0.25
(1,1886)	1:A:115:MET:HB3	1:A:115:MET:HE2	16	0.25
(1,1886)	1:A:115:MET:HB3	1:A:115:MET:HE3	16	0.25
(1,1879)	1:A:110:ILE:HD11	1:A:115:MET:HG3	16	0.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1879)	1:A:110:ILE:HD12	1:A:115:MET:HG3	16	0.25
(1,1879)	1:A:110:ILE:HD13	1:A:115:MET:HG3	16	0.25
(1,1871)	1:A:107:LYS:HA	1:A:107:LYS:HD3	4	0.25
(1,1871)	1:A:107:LYS:HA	1:A:107:LYS:HD3	10	0.25
(1,1849)	1:A:101:GLN:HB3	1:A:101:GLN:HE21	16	0.25
(1,1849)	1:A:101:GLN:HB3	1:A:101:GLN:HE22	16	0.25
(1,1765)	1:A:93:ALA:HA	1:A:95:ARG:HB3	5	0.25
(1,1748)	1:A:89:ASP:HB3	1:A:138:LEU:HD11	3	0.25
(1,1748)	1:A:89:ASP:HB3	1:A:138:LEU:HD12	3	0.25
(1,1748)	1:A:89:ASP:HB3	1:A:138:LEU:HD13	3	0.25
(1,1748)	1:A:89:ASP:HB3	1:A:138:LEU:HD21	3	0.25
(1,1748)	1:A:89:ASP:HB3	1:A:138:LEU:HD22	3	0.25
(1,1748)	1:A:89:ASP:HB3	1:A:138:LEU:HD23	3	0.25
(1,1743)	1:A:89:ASP:H	1:A:89:ASP:HB3	16	0.25
(1,1681)	1:A:80:LYS:HG3	1:A:106:ILE:HG21	13	0.25
(1,1681)	1:A:80:LYS:HG3	1:A:106:ILE:HG22	13	0.25
(1,1681)	1:A:80:LYS:HG3	1:A:106:ILE:HG23	13	0.25
(1,1679)	1:A:80:LYS:HG3	1:A:80:LYS:HE3	17	0.25
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:108:PRO:HG3	20	0.25
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:108:PRO:HG3	20	0.25
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:108:PRO:HG3	20	0.25
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:108:PRO:HG3	20	0.25
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:108:PRO:HG3	20	0.25
(1,1664)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:108:PRO:HG3	20	0.25
(1,161)	1:A:158:MET:H	1:A:158:MET:HG3	17	0.25
(1,1526)	1:A:192:ILE:HA	1:A:193:ASN:HB3	11	0.25
(1,1486)	1:A:145:ARG:HA	1:A:145:ARG:HG3	18	0.25
(1,147)	1:A:208:ARG:H	1:A:208:ARG:HD3	18	0.25
(1,1361)	1:A:204:THR:HG21	1:A:208:ARG:HD3	10	0.25
(1,1361)	1:A:204:THR:HG22	1:A:208:ARG:HD3	10	0.25
(1,1361)	1:A:204:THR:HG23	1:A:208:ARG:HD3	10	0.25
(1,1303)	1:A:87:GLU:HG3	1:A:88:ASP:HA	4	0.25
(1,1282)	1:A:183:GLU:HB3	1:A:183:GLU:HG3	3	0.25
(1,1263)	1:A:230:GLN:HA	1:A:230:GLN:HG3	2	0.25
(1,1224)	1:A:223:LYS:HD3	1:A:224:GLU:HB3	8	0.25
(1,1221)	1:A:216:LYS:H	1:A:216:LYS:HD3	16	0.25
(1,1220)	1:A:216:LYS:HD3	1:A:217:THR:H	19	0.25
(1,1213)	1:A:165:HIS:HA	1:A:166:LYS:HD3	11	0.25
(1,471)	1:A:196:GLU:H	1:A:196:GLU:HB3	5	0.24
(1,449)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:H	5	0.24
(1,449)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:H	11	0.24
(1,449)	1:A:211:GLN:HB3	1:A:214:VAL:H	17	0.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,438)	1:A:180:LEU:H	1:A:181:PRO:HG3	16	0.24
(1,257)	1:A:205:GLN:HB3	1:A:206:VAL:H	3	0.24
(1,2419)	1:A:234:ILE:HA	1:A:234:ILE:HG13	13	0.24
(1,2411)	1:A:230:GLN:HB3	1:A:230:GLN:HE21	9	0.24
(1,2411)	1:A:230:GLN:HB3	1:A:230:GLN:HE22	9	0.24
(1,2411)	1:A:230:GLN:HB3	1:A:230:GLN:HE21	11	0.24
(1,2411)	1:A:230:GLN:HB3	1:A:230:GLN:HE22	11	0.24
(1,2404)	1:A:228:MET:HG3	1:A:229:VAL:H	16	0.24
(1,2393)	1:A:224:GLU:HB3	1:A:224:GLU:HG3	7	0.24
(1,2385)	1:A:223:LYS:HB3	1:A:226:ARG:HE	4	0.24
(1,2363)	1:A:219:GLN:HG3	1:A:223:LYS:HG3	2	0.24
(1,2352)	1:A:216:LYS:HG3	1:A:217:THR:H	12	0.24
(1,2350)	1:A:216:LYS:HB3	1:A:217:THR:H	10	0.24
(1,2325)	1:A:212:GLU:H	1:A:212:GLU:HG3	14	0.24
(1,2325)	1:A:212:GLU:H	1:A:212:GLU:HG3	19	0.24
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG11	3	0.24
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG12	3	0.24
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG13	3	0.24
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG21	3	0.24
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG22	3	0.24
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG23	3	0.24
(1,2284)	1:A:197:GLU:HA	1:A:202:PHE:HB3	4	0.24
(1,2279)	1:A:196:GLU:HG3	1:A:197:GLU:H	18	0.24
(1,2206)	1:A:184:ARG:H	1:A:184:ARG:HG3	9	0.24
(1,2205)	1:A:184:ARG:H	1:A:184:ARG:HB3	1	0.24
(1,2205)	1:A:184:ARG:H	1:A:184:ARG:HB3	12	0.24
(1,2149)	1:A:176:LEU:H	1:A:197:GLU:HG3	14	0.24
(1,2139)	1:A:172:PRO:HD3	1:A:194:ALA:HB1	11	0.24
(1,2139)	1:A:172:PRO:HD3	1:A:194:ALA:HB2	11	0.24
(1,2139)	1:A:172:PRO:HD3	1:A:194:ALA:HB3	11	0.24
(1,211)	1:A:210:PHE:H	1:A:210:PHE:HB3	8	0.24
(1,211)	1:A:210:PHE:H	1:A:210:PHE:HB3	19	0.24
(1,2105)	1:A:167:TYR:H	1:A:221:ILE:HG13	8	0.24
(1,2105)	1:A:167:TYR:H	1:A:221:ILE:HG13	13	0.24
(1,2103)	1:A:166:LYS:HG3	1:A:167:TYR:HA	8	0.24
(1,2065)	1:A:160:SER:HB3	1:A:161:VAL:HG11	4	0.24
(1,2065)	1:A:160:SER:HB3	1:A:161:VAL:HG12	4	0.24
(1,2065)	1:A:160:SER:HB3	1:A:161:VAL:HG13	4	0.24
(1,2065)	1:A:160:SER:HB3	1:A:161:VAL:HG21	4	0.24
(1,2065)	1:A:160:SER:HB3	1:A:161:VAL:HG22	4	0.24
(1,2065)	1:A:160:SER:HB3	1:A:161:VAL:HG23	4	0.24
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD11	1:A:158:MET:HG3	5	0.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD12	1:A:158:MET:HG3	5	0.24
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD13	1:A:158:MET:HG3	5	0.24
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD21	1:A:158:MET:HG3	5	0.24
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD22	1:A:158:MET:HG3	5	0.24
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD23	1:A:158:MET:HG3	5	0.24
(1,2035)	1:A:152:GLN:H	1:A:152:GLN:HG3	16	0.24
(1,2004)	1:A:144:LEU:HA	1:A:148:TRP:HB3	1	0.24
(1,1999)	1:A:141:GLU:HG3	1:A:142:ASN:H	1	0.24
(1,1999)	1:A:141:GLU:HG3	1:A:142:ASN:H	12	0.24
(1,1955)	1:A:138:LEU:H	1:A:138:LEU:HB3	14	0.24
(1,1894)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:121:HIS:HE1	18	0.24
(1,1884)	1:A:114:GLU:HA	1:A:114:GLU:HG3	13	0.24
(1,1871)	1:A:107:LYS:HA	1:A:107:LYS:HD3	7	0.24
(1,1871)	1:A:107:LYS:HA	1:A:107:LYS:HD3	11	0.24
(1,1871)	1:A:107:LYS:HA	1:A:107:LYS:HD3	18	0.24
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG11	12	0.24
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG12	12	0.24
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG13	12	0.24
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG21	12	0.24
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG22	12	0.24
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG23	12	0.24
(1,1855)	1:A:101:GLN:HG3	1:A:102:ASP:H	1	0.24
(1,1855)	1:A:101:GLN:HG3	1:A:102:ASP:H	11	0.24
(1,1852)	1:A:101:GLN:HB3	1:A:107:LYS:HG3	2	0.24
(1,1852)	1:A:101:GLN:HB3	1:A:107:LYS:HG3	9	0.24
(1,1674)	1:A:80:LYS:H	1:A:80:LYS:HG3	20	0.24
(1,1652)	1:A:76:GLU:HG3	1:A:77:VAL:H	17	0.24
(1,1566)	1:A:71:PRO:HG3	1:A:74:SER:HB3	10	0.24
(1,1540)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:213:SER:HA	13	0.24
(1,1540)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:213:SER:HA	16	0.24
(1,1521)	1:A:182:ARG:HA	1:A:182:ARG:HD3	5	0.24
(1,1521)	1:A:182:ARG:HA	1:A:182:ARG:HD3	10	0.24
(1,1486)	1:A:145:ARG:HA	1:A:145:ARG:HG3	11	0.24
(1,147)	1:A:208:ARG:H	1:A:208:ARG:HD3	9	0.24
(1,1450)	1:A:163:ARG:HA	1:A:163:ARG:HG3	3	0.24
(1,1361)	1:A:204:THR:HG21	1:A:208:ARG:HD3	18	0.24
(1,1361)	1:A:204:THR:HG22	1:A:208:ARG:HD3	18	0.24
(1,1361)	1:A:204:THR:HG23	1:A:208:ARG:HD3	18	0.24
(1,1336)	1:A:223:LYS:HD3	1:A:223:LYS:HE3	11	0.24
(1,1291)	1:A:224:GLU:HB3	1:A:224:GLU:HG3	16	0.24
(1,1285)	1:A:75:GLU:H	1:A:75:GLU:HG3	18	0.24
(1,1282)	1:A:183:GLU:HB3	1:A:183:GLU:HG3	18	0.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1219)	1:A:215:TYR:HD1	1:A:216:LYS:HD3	5	0.24
(1,1219)	1:A:215:TYR:HD2	1:A:216:LYS:HD3	5	0.24
(1,828)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:HB1	5	0.23
(1,828)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:HB2	5	0.23
(1,828)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:HB3	5	0.23
(1,686)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:106:ILE:HG21	6	0.23
(1,686)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:106:ILE:HG22	6	0.23
(1,686)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:106:ILE:HG23	6	0.23
(1,642)	1:A:209:ILE:HG21	1:A:210:PHE:HB3	2	0.23
(1,642)	1:A:209:ILE:HG22	1:A:210:PHE:HB3	2	0.23
(1,642)	1:A:209:ILE:HG23	1:A:210:PHE:HB3	2	0.23
(1,642)	1:A:209:ILE:HG21	1:A:210:PHE:HB3	7	0.23
(1,642)	1:A:209:ILE:HG22	1:A:210:PHE:HB3	7	0.23
(1,642)	1:A:209:ILE:HG23	1:A:210:PHE:HB3	7	0.23
(1,642)	1:A:209:ILE:HG21	1:A:210:PHE:HB3	18	0.23
(1,642)	1:A:209:ILE:HG22	1:A:210:PHE:HB3	18	0.23
(1,642)	1:A:209:ILE:HG23	1:A:210:PHE:HB3	18	0.23
(1,445)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:H	17	0.23
(1,2418)	1:A:234:ILE:H	1:A:234:ILE:HG13	2	0.23
(1,2417)	1:A:233:PHE:HB3	1:A:234:ILE:H	18	0.23
(1,2415)	1:A:232:GLN:HG3	1:A:232:GLN:HE22	8	0.23
(1,2404)	1:A:228:MET:HG3	1:A:229:VAL:H	10	0.23
(1,2404)	1:A:228:MET:HG3	1:A:229:VAL:H	11	0.23
(1,2397)	1:A:226:ARG:HB3	1:A:226:ARG:HD3	4	0.23
(1,2393)	1:A:224:GLU:HB3	1:A:224:GLU:HG3	20	0.23
(1,2386)	1:A:223:LYS:HG3	1:A:223:LYS:HE3	20	0.23
(1,2381)	1:A:223:LYS:HA	1:A:226:ARG:HB3	15	0.23
(1,2379)	1:A:223:LYS:H	1:A:223:LYS:HE3	20	0.23
(1,2370)	1:A:220:THR:HA	1:A:223:LYS:HB3	14	0.23
(1,2369)	1:A:219:GLN:HE21	1:A:223:LYS:HE3	16	0.23
(1,2369)	1:A:219:GLN:HE22	1:A:223:LYS:HE3	16	0.23
(1,2368)	1:A:219:GLN:HE21	1:A:223:LYS:HD3	7	0.23
(1,2368)	1:A:219:GLN:HE22	1:A:223:LYS:HD3	7	0.23
(1,2363)	1:A:219:GLN:HG3	1:A:223:LYS:HG3	6	0.23
(1,2352)	1:A:216:LYS:HG3	1:A:217:THR:H	11	0.23
(1,2348)	1:A:216:LYS:HB3	1:A:216:LYS:HD3	18	0.23
(1,2325)	1:A:212:GLU:H	1:A:212:GLU:HG3	5	0.23
(1,2325)	1:A:212:GLU:H	1:A:212:GLU:HG3	9	0.23
(1,2325)	1:A:212:GLU:H	1:A:212:GLU:HG3	15	0.23
(1,2320)	1:A:208:ARG:HA	1:A:208:ARG:HG3	9	0.23
(1,2293)	1:A:199:SER:HB3	1:A:202:PHE:HB3	13	0.23
(1,2280)	1:A:196:GLU:HG3	1:A:199:SER:HB3	2	0.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2248)	1:A:194:ALA:HB1	1:A:196:GLU:HG3	10	0.23
(1,2248)	1:A:194:ALA:HB2	1:A:196:GLU:HG3	10	0.23
(1,2248)	1:A:194:ALA:HB3	1:A:196:GLU:HG3	10	0.23
(1,2205)	1:A:184:ARG:H	1:A:184:ARG:HB3	5	0.23
(1,215)	1:A:224:GLU:H	1:A:224:GLU:HB3	3	0.23
(1,2115)	1:A:169:SER:HB3	1:A:209:ILE:HG21	16	0.23
(1,2115)	1:A:169:SER:HB3	1:A:209:ILE:HG22	16	0.23
(1,2115)	1:A:169:SER:HB3	1:A:209:ILE:HG23	16	0.23
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG11	7	0.23
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG12	7	0.23
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG13	7	0.23
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG21	7	0.23
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG22	7	0.23
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG23	7	0.23
(1,2083)	1:A:163:ARG:H	1:A:163:ARG:HG3	12	0.23
(1,2059)	1:A:159:ASN:HB3	1:A:160:SER:H	17	0.23
(1,2037)	1:A:152:GLN:HG3	1:A:153:PHE:H	2	0.23
(1,2036)	1:A:152:GLN:HG3	1:A:152:GLN:HE21	11	0.23
(1,2036)	1:A:152:GLN:HG3	1:A:152:GLN:HE22	11	0.23
(1,2020)	1:A:145:ARG:HB3	1:A:145:ARG:HD3	11	0.23
(1,1998)	1:A:141:GLU:HB3	1:A:142:ASN:H	9	0.23
(1,1992)	1:A:141:GLU:H	1:A:144:LEU:HB3	1	0.23
(1,1884)	1:A:114:GLU:HA	1:A:114:GLU:HG3	11	0.23
(1,1884)	1:A:114:GLU:HA	1:A:114:GLU:HG3	19	0.23
(1,1882)	1:A:112:PHE:HA	1:A:115:MET:HG3	1	0.23
(1,1881)	1:A:111:ILE:HG13	1:A:114:GLU:HG3	1	0.23
(1,1879)	1:A:110:ILE:HD11	1:A:115:MET:HG3	11	0.23
(1,1879)	1:A:110:ILE:HD12	1:A:115:MET:HG3	11	0.23
(1,1879)	1:A:110:ILE:HD13	1:A:115:MET:HG3	11	0.23
(1,1879)	1:A:110:ILE:HD11	1:A:115:MET:HG3	13	0.23
(1,1879)	1:A:110:ILE:HD12	1:A:115:MET:HG3	13	0.23
(1,1879)	1:A:110:ILE:HD13	1:A:115:MET:HG3	13	0.23
(1,1878)	1:A:110:ILE:HG13	1:A:111:ILE:H	16	0.23
(1,1871)	1:A:107:LYS:HA	1:A:107:LYS:HD3	1	0.23
(1,1871)	1:A:107:LYS:HA	1:A:107:LYS:HD3	2	0.23
(1,1871)	1:A:107:LYS:HA	1:A:107:LYS:HD3	14	0.23
(1,1852)	1:A:101:GLN:HB3	1:A:107:LYS:HG3	7	0.23
(1,1679)	1:A:80:LYS:HG3	1:A:80:LYS:HE3	15	0.23
(1,1676)	1:A:80:LYS:HA	1:A:80:LYS:HG3	4	0.23
(1,1641)	1:A:74:SER:HA	1:A:74:SER:HB3	11	0.23
(1,1641)	1:A:74:SER:HA	1:A:74:SER:HB3	13	0.23
(1,161)	1:A:158:MET:H	1:A:158:MET:HG3	4	0.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1521)	1:A:182:ARG:HA	1:A:182:ARG:HD3	20	0.23
(1,1490)	1:A:183:GLU:HA	1:A:183:GLU:HB3	8	0.23
(1,1490)	1:A:183:GLU:HA	1:A:183:GLU:HB3	19	0.23
(1,1486)	1:A:145:ARG:HA	1:A:145:ARG:HG3	19	0.23
(1,1469)	1:A:200:ARG:HA	1:A:200:ARG:HB3	6	0.23
(1,1469)	1:A:200:ARG:HA	1:A:200:ARG:HB3	7	0.23
(1,1469)	1:A:200:ARG:HA	1:A:200:ARG:HB3	10	0.23
(1,1469)	1:A:200:ARG:HA	1:A:200:ARG:HB3	12	0.23
(1,1370)	1:A:163:ARG:HB3	1:A:163:ARG:HD3	7	0.23
(1,1366)	1:A:70:GLY:HA2	1:A:71:PRO:HG3	5	0.23
(1,1366)	1:A:70:GLY:HA3	1:A:71:PRO:HG3	5	0.23
(1,1366)	1:A:70:GLY:HA2	1:A:71:PRO:HG3	10	0.23
(1,1366)	1:A:70:GLY:HA3	1:A:71:PRO:HG3	10	0.23
(1,1366)	1:A:70:GLY:HA2	1:A:71:PRO:HG3	12	0.23
(1,1366)	1:A:70:GLY:HA3	1:A:71:PRO:HG3	12	0.23
(1,1366)	1:A:70:GLY:HA2	1:A:71:PRO:HG3	14	0.23
(1,1366)	1:A:70:GLY:HA3	1:A:71:PRO:HG3	14	0.23
(1,1366)	1:A:70:GLY:HA2	1:A:71:PRO:HG3	15	0.23
(1,1366)	1:A:70:GLY:HA3	1:A:71:PRO:HG3	15	0.23
(1,1363)	1:A:205:GLN:HA	1:A:208:ARG:HD3	17	0.23
(1,1354)	1:A:182:ARG:HB3	1:A:182:ARG:HD3	14	0.23
(1,1343)	1:A:216:LYS:H	1:A:216:LYS:HE3	18	0.23
(1,1340)	1:A:216:LYS:HA	1:A:216:LYS:HE3	14	0.23
(1,1336)	1:A:223:LYS:HD3	1:A:223:LYS:HE3	5	0.23
(1,1336)	1:A:223:LYS:HD3	1:A:223:LYS:HE3	17	0.23
(1,1336)	1:A:223:LYS:HD3	1:A:223:LYS:HE3	19	0.23
(1,1325)	1:A:166:LYS:H	1:A:166:LYS:HE3	17	0.23
(1,1322)	1:A:166:LYS:HG3	1:A:166:LYS:HE3	9	0.23
(1,1312)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:H	5	0.23
(1,1291)	1:A:224:GLU:HB3	1:A:224:GLU:HG3	5	0.23
(1,1291)	1:A:224:GLU:HB3	1:A:224:GLU:HG3	8	0.23
(1,1291)	1:A:224:GLU:HB3	1:A:224:GLU:HG3	13	0.23
(1,1230)	1:A:200:ARG:HB3	1:A:200:ARG:HG3	4	0.23
(1,1212)	1:A:166:LYS:HA	1:A:166:LYS:HD3	19	0.23
(1,856)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG21	14	0.22
(1,856)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG22	14	0.22
(1,856)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG23	14	0.22
(1,828)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:HB1	18	0.22
(1,828)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:HB2	18	0.22
(1,828)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:HB3	18	0.22
(1,750)	1:A:80:LYS:HB3	1:A:133:ALA:HB1	3	0.22
(1,750)	1:A:80:LYS:HB3	1:A:133:ALA:HB2	3	0.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,750)	1:A:80:LYS:HB3	1:A:133:ALA:HB3	3	0.22
(1,686)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:106:ILE:HG21	4	0.22
(1,686)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:106:ILE:HG22	4	0.22
(1,686)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:106:ILE:HG23	4	0.22
(1,642)	1:A:209:ILE:HG21	1:A:210:PHE:HB3	1	0.22
(1,642)	1:A:209:ILE:HG22	1:A:210:PHE:HB3	1	0.22
(1,642)	1:A:209:ILE:HG23	1:A:210:PHE:HB3	1	0.22
(1,616)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:83:ILE:HD11	5	0.22
(1,616)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:83:ILE:HD12	5	0.22
(1,616)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:83:ILE:HD13	5	0.22
(1,442)	1:A:106:ILE:H	1:A:107:LYS:HG3	3	0.22
(1,413)	1:A:218:GLN:HG3	1:A:221:ILE:H	17	0.22
(1,320)	1:A:144:LEU:H	1:A:145:ARG:HG3	6	0.22
(1,2421)	1:A:234:ILE:HG13	1:A:235:ALA:H	16	0.22
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG11	1:A:230:GLN:HG3	16	0.22
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG12	1:A:230:GLN:HG3	16	0.22
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG13	1:A:230:GLN:HG3	16	0.22
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG21	1:A:230:GLN:HG3	16	0.22
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG22	1:A:230:GLN:HG3	16	0.22
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG23	1:A:230:GLN:HG3	16	0.22
(1,2404)	1:A:228:MET:HG3	1:A:229:VAL:H	18	0.22
(1,2402)	1:A:227:ASN:HB3	1:A:228:MET:H	11	0.22
(1,2398)	1:A:226:ARG:HB3	1:A:227:ASN:HD21	18	0.22
(1,2398)	1:A:226:ARG:HB3	1:A:227:ASN:HD22	18	0.22
(1,2397)	1:A:226:ARG:HB3	1:A:226:ARG:HD3	3	0.22
(1,2385)	1:A:223:LYS:HB3	1:A:226:ARG:HE	15	0.22
(1,2370)	1:A:220:THR:HA	1:A:223:LYS:HB3	1	0.22
(1,2370)	1:A:220:THR:HA	1:A:223:LYS:HB3	9	0.22
(1,2363)	1:A:219:GLN:HG3	1:A:223:LYS:HG3	14	0.22
(1,2351)	1:A:216:LYS:HG3	1:A:216:LYS:HE3	5	0.22
(1,2350)	1:A:216:LYS:HB3	1:A:217:THR:H	15	0.22
(1,2348)	1:A:216:LYS:HB3	1:A:216:LYS:HD3	3	0.22
(1,2327)	1:A:212:GLU:HG3	1:A:213:SER:H	11	0.22
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG11	17	0.22
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG12	17	0.22
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG13	17	0.22
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG21	17	0.22
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG22	17	0.22
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG23	17	0.22
(1,2295)	1:A:200:ARG:HB3	1:A:200:ARG:HG3	14	0.22
(1,2283)	1:A:197:GLU:HA	1:A:197:GLU:HG3	3	0.22
(1,2280)	1:A:196:GLU:HG3	1:A:199:SER:HB3	20	0.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2205)	1:A:184:ARG:H	1:A:184:ARG:HB3	14	0.22
(1,2199)	1:A:182:ARG:HA	1:A:182:ARG:HG3	2	0.22
(1,2199)	1:A:182:ARG:HA	1:A:182:ARG:HG3	9	0.22
(1,2199)	1:A:182:ARG:HA	1:A:182:ARG:HG3	19	0.22
(1,2132)	1:A:172:PRO:HG3	1:A:192:ILE:HG21	7	0.22
(1,2132)	1:A:172:PRO:HG3	1:A:192:ILE:HG22	7	0.22
(1,2132)	1:A:172:PRO:HG3	1:A:192:ILE:HG23	7	0.22
(1,2098)	1:A:166:LYS:HB3	1:A:166:LYS:HE3	2	0.22
(1,2098)	1:A:166:LYS:HB3	1:A:166:LYS:HE3	6	0.22
(1,2085)	1:A:163:ARG:HB3	1:A:163:ARG:HD3	8	0.22
(1,2065)	1:A:160:SER:HB3	1:A:161:VAL:HG11	20	0.22
(1,2065)	1:A:160:SER:HB3	1:A:161:VAL:HG12	20	0.22
(1,2065)	1:A:160:SER:HB3	1:A:161:VAL:HG13	20	0.22
(1,2065)	1:A:160:SER:HB3	1:A:161:VAL:HG21	20	0.22
(1,2065)	1:A:160:SER:HB3	1:A:161:VAL:HG22	20	0.22
(1,2065)	1:A:160:SER:HB3	1:A:161:VAL:HG23	20	0.22
(1,2035)	1:A:152:GLN:H	1:A:152:GLN:HG3	6	0.22
(1,2004)	1:A:144:LEU:HA	1:A:148:TRP:HB3	6	0.22
(1,1998)	1:A:141:GLU:HB3	1:A:142:ASN:H	4	0.22
(1,1998)	1:A:141:GLU:HB3	1:A:142:ASN:H	6	0.22
(1,1996)	1:A:141:GLU:HA	1:A:144:LEU:HB3	9	0.22
(1,1968)	1:A:139:LEU:HB3	1:A:189:LEU:HD11	12	0.22
(1,1968)	1:A:139:LEU:HB3	1:A:189:LEU:HD12	12	0.22
(1,1968)	1:A:139:LEU:HB3	1:A:189:LEU:HD13	12	0.22
(1,1968)	1:A:139:LEU:HB3	1:A:189:LEU:HD21	12	0.22
(1,1968)	1:A:139:LEU:HB3	1:A:189:LEU:HD22	12	0.22
(1,1968)	1:A:139:LEU:HB3	1:A:189:LEU:HD23	12	0.22
(1,1936)	1:A:134:TRP:HE1	1:A:169:SER:HB3	19	0.22
(1,1895)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:122:LEU:HD11	11	0.22
(1,1895)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:122:LEU:HD12	11	0.22
(1,1895)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:122:LEU:HD13	11	0.22
(1,1895)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:122:LEU:HD21	11	0.22
(1,1895)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:122:LEU:HD22	11	0.22
(1,1895)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:122:LEU:HD23	11	0.22
(1,1894)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:121:HIS:HE1	1	0.22
(1,1894)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:121:HIS:HE1	4	0.22
(1,1894)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:121:HIS:HE1	6	0.22
(1,1894)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:121:HIS:HE1	16	0.22
(1,1886)	1:A:115:MET:HB3	1:A:115:MET:HE1	2	0.22
(1,1886)	1:A:115:MET:HB3	1:A:115:MET:HE2	2	0.22
(1,1886)	1:A:115:MET:HB3	1:A:115:MET:HE3	2	0.22
(1,1886)	1:A:115:MET:HB3	1:A:115:MET:HE1	6	0.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1886)	1:A:115:MET:HB3	1:A:115:MET:HE2	6	0.22
(1,1886)	1:A:115:MET:HB3	1:A:115:MET:HE3	6	0.22
(1,1884)	1:A:114:GLU:HA	1:A:114:GLU:HG3	1	0.22
(1,1884)	1:A:114:GLU:HA	1:A:114:GLU:HG3	2	0.22
(1,1884)	1:A:114:GLU:HA	1:A:114:GLU:HG3	4	0.22
(1,1884)	1:A:114:GLU:HA	1:A:114:GLU:HG3	10	0.22
(1,1878)	1:A:110:ILE:HG13	1:A:111:ILE:H	13	0.22
(1,1870)	1:A:107:LYS:H	1:A:107:LYS:HB3	14	0.22
(1,1866)	1:A:105:GLY:HA2	1:A:107:LYS:HE3	17	0.22
(1,1866)	1:A:105:GLY:HA3	1:A:107:LYS:HE3	17	0.22
(1,1855)	1:A:101:GLN:HG3	1:A:102:ASP:H	12	0.22
(1,1732)	1:A:85:HIS:HB3	1:A:93:ALA:HA	20	0.22
(1,1721)	1:A:84:LEU:HD11	1:A:112:PHE:HB3	20	0.22
(1,1721)	1:A:84:LEU:HD12	1:A:112:PHE:HB3	20	0.22
(1,1721)	1:A:84:LEU:HD13	1:A:112:PHE:HB3	20	0.22
(1,1721)	1:A:84:LEU:HD21	1:A:112:PHE:HB3	20	0.22
(1,1721)	1:A:84:LEU:HD22	1:A:112:PHE:HB3	20	0.22
(1,1721)	1:A:84:LEU:HD23	1:A:112:PHE:HB3	20	0.22
(1,1679)	1:A:80:LYS:HG3	1:A:80:LYS:HE3	13	0.22
(1,1676)	1:A:80:LYS:HA	1:A:80:LYS:HG3	11	0.22
(1,1526)	1:A:192:ILE:HA	1:A:193:ASN:HB3	12	0.22
(1,1521)	1:A:182:ARG:HA	1:A:182:ARG:HD3	4	0.22
(1,1521)	1:A:182:ARG:HA	1:A:182:ARG:HD3	8	0.22
(1,1499)	1:A:223:LYS:HA	1:A:223:LYS:HD3	3	0.22
(1,1499)	1:A:223:LYS:HA	1:A:223:LYS:HD3	4	0.22
(1,1486)	1:A:145:ARG:HA	1:A:145:ARG:HG3	14	0.22
(1,1486)	1:A:145:ARG:HA	1:A:145:ARG:HG3	15	0.22
(1,1469)	1:A:200:ARG:HA	1:A:200:ARG:HB3	4	0.22
(1,1469)	1:A:200:ARG:HA	1:A:200:ARG:HB3	5	0.22
(1,1469)	1:A:200:ARG:HA	1:A:200:ARG:HB3	9	0.22
(1,1469)	1:A:200:ARG:HA	1:A:200:ARG:HB3	11	0.22
(1,1469)	1:A:200:ARG:HA	1:A:200:ARG:HB3	14	0.22
(1,1469)	1:A:200:ARG:HA	1:A:200:ARG:HB3	15	0.22
(1,1469)	1:A:200:ARG:HA	1:A:200:ARG:HB3	20	0.22
(1,1370)	1:A:163:ARG:HB3	1:A:163:ARG:HD3	10	0.22
(1,1366)	1:A:70:GLY:HA2	1:A:71:PRO:HG3	18	0.22
(1,1366)	1:A:70:GLY:HA3	1:A:71:PRO:HG3	18	0.22
(1,1336)	1:A:223:LYS:HD3	1:A:223:LYS:HE3	2	0.22
(1,1336)	1:A:223:LYS:HD3	1:A:223:LYS:HE3	18	0.22
(1,1333)	1:A:107:LYS:H	1:A:107:LYS:HE3	8	0.22
(1,1325)	1:A:166:LYS:H	1:A:166:LYS:HE3	14	0.22
(1,1324)	1:A:166:LYS:HA	1:A:166:LYS:HE3	17	0.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1324)	1:A:166:LYS:HA	1:A:166:LYS:HE3	20	0.22
(1,1322)	1:A:166:LYS:HG3	1:A:166:LYS:HE3	11	0.22
(1,1312)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:H	18	0.22
(1,1302)	1:A:87:GLU:HA	1:A:87:GLU:HG3	11	0.22
(1,1285)	1:A:75:GLU:H	1:A:75:GLU:HG3	11	0.22
(1,1230)	1:A:200:ARG:HB3	1:A:200:ARG:HG3	1	0.22
(1,1230)	1:A:200:ARG:HB3	1:A:200:ARG:HG3	5	0.22
(1,1230)	1:A:200:ARG:HB3	1:A:200:ARG:HG3	8	0.22
(1,1227)	1:A:223:LYS:H	1:A:223:LYS:HD3	13	0.22
(1,1227)	1:A:223:LYS:H	1:A:223:LYS:HD3	18	0.22
(1,1219)	1:A:215:TYR:HD1	1:A:216:LYS:HD3	11	0.22
(1,1219)	1:A:215:TYR:HD2	1:A:216:LYS:HD3	11	0.22
(1,100)	1:A:145:ARG:HB3	1:A:146:ASP:H	3	0.22
(1,922)	1:A:217:THR:HG21	1:A:218:GLN:HG3	13	0.21
(1,922)	1:A:217:THR:HG22	1:A:218:GLN:HG3	13	0.21
(1,922)	1:A:217:THR:HG23	1:A:218:GLN:HG3	13	0.21
(1,734)	1:A:192:ILE:HG21	1:A:193:ASN:HB3	5	0.21
(1,734)	1:A:192:ILE:HG22	1:A:193:ASN:HB3	5	0.21
(1,734)	1:A:192:ILE:HG23	1:A:193:ASN:HB3	5	0.21
(1,642)	1:A:209:ILE:HG21	1:A:210:PHE:HB3	3	0.21
(1,642)	1:A:209:ILE:HG22	1:A:210:PHE:HB3	3	0.21
(1,642)	1:A:209:ILE:HG23	1:A:210:PHE:HB3	3	0.21
(1,642)	1:A:209:ILE:HG21	1:A:210:PHE:HB3	8	0.21
(1,642)	1:A:209:ILE:HG22	1:A:210:PHE:HB3	8	0.21
(1,642)	1:A:209:ILE:HG23	1:A:210:PHE:HB3	8	0.21
(1,642)	1:A:209:ILE:HG21	1:A:210:PHE:HB3	16	0.21
(1,642)	1:A:209:ILE:HG22	1:A:210:PHE:HB3	16	0.21
(1,642)	1:A:209:ILE:HG23	1:A:210:PHE:HB3	16	0.21
(1,616)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:83:ILE:HD11	19	0.21
(1,616)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:83:ILE:HD12	19	0.21
(1,616)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:83:ILE:HD13	19	0.21
(1,471)	1:A:196:GLU:H	1:A:196:GLU:HB3	9	0.21
(1,448)	1:A:214:VAL:H	1:A:214:VAL:HG11	5	0.21
(1,448)	1:A:214:VAL:H	1:A:214:VAL:HG12	5	0.21
(1,448)	1:A:214:VAL:H	1:A:214:VAL:HG13	5	0.21
(1,448)	1:A:214:VAL:H	1:A:214:VAL:HG11	11	0.21
(1,448)	1:A:214:VAL:H	1:A:214:VAL:HG12	11	0.21
(1,448)	1:A:214:VAL:H	1:A:214:VAL:HG13	11	0.21
(1,448)	1:A:214:VAL:H	1:A:214:VAL:HG11	20	0.21
(1,448)	1:A:214:VAL:H	1:A:214:VAL:HG12	20	0.21
(1,448)	1:A:214:VAL:H	1:A:214:VAL:HG13	20	0.21
(1,320)	1:A:144:LEU:H	1:A:145:ARG:HG3	12	0.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,262)	1:A:183:GLU:HB3	1:A:185:THR:H	15	0.21
(1,2421)	1:A:234:ILE:HG13	1:A:235:ALA:H	3	0.21
(1,2418)	1:A:234:ILE:H	1:A:234:ILE:HG13	5	0.21
(1,2381)	1:A:223:LYS:HA	1:A:226:ARG:HB3	3	0.21
(1,2379)	1:A:223:LYS:H	1:A:223:LYS:HE3	17	0.21
(1,2370)	1:A:220:THR:HA	1:A:223:LYS:HB3	18	0.21
(1,2368)	1:A:219:GLN:HE21	1:A:223:LYS:HD3	18	0.21
(1,2368)	1:A:219:GLN:HE22	1:A:223:LYS:HD3	18	0.21
(1,2350)	1:A:216:LYS:HB3	1:A:217:THR:H	1	0.21
(1,2350)	1:A:216:LYS:HB3	1:A:217:THR:H	5	0.21
(1,2325)	1:A:212:GLU:H	1:A:212:GLU:HG3	6	0.21
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG11	2	0.21
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG12	2	0.21
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG13	2	0.21
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG21	2	0.21
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG22	2	0.21
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG23	2	0.21
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG11	10	0.21
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG12	10	0.21
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG13	10	0.21
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG21	10	0.21
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG22	10	0.21
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG23	10	0.21
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG11	14	0.21
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG12	14	0.21
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG13	14	0.21
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG21	14	0.21
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG22	14	0.21
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG23	14	0.21
(1,2298)	1:A:200:ARG:HG3	1:A:202:PHE:H	19	0.21
(1,2295)	1:A:200:ARG:HB3	1:A:200:ARG:HG3	15	0.21
(1,2283)	1:A:197:GLU:HA	1:A:197:GLU:HG3	12	0.21
(1,2278)	1:A:196:GLU:HB3	1:A:199:SER:HB3	13	0.21
(1,2232)	1:A:189:LEU:HB3	1:A:190:GLN:H	10	0.21
(1,2216)	1:A:185:THR:HG21	1:A:189:LEU:HB3	13	0.21
(1,2216)	1:A:185:THR:HG22	1:A:189:LEU:HB3	13	0.21
(1,2216)	1:A:185:THR:HG23	1:A:189:LEU:HB3	13	0.21
(1,2206)	1:A:184:ARG:H	1:A:184:ARG:HG3	4	0.21
(1,2201)	1:A:183:GLU:HA	1:A:183:GLU:HG3	20	0.21
(1,2199)	1:A:182:ARG:HA	1:A:182:ARG:HG3	15	0.21
(1,211)	1:A:210:PHE:H	1:A:210:PHE:HB3	17	0.21
(1,2108)	1:A:167:TYR:HB3	1:A:221:ILE:HD11	19	0.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2108)	1:A:167:TYR:HB3	1:A:221:ILE:HD12	19	0.21
(1,2108)	1:A:167:TYR:HB3	1:A:221:ILE:HD13	19	0.21
(1,2103)	1:A:166:LYS:HG3	1:A:167:TYR:HA	4	0.21
(1,2057)	1:A:159:ASN:HA	1:A:162:ASN:HB3	20	0.21
(1,2006)	1:A:144:LEU:HB3	1:A:180:LEU:HD11	5	0.21
(1,2006)	1:A:144:LEU:HB3	1:A:180:LEU:HD12	5	0.21
(1,2006)	1:A:144:LEU:HB3	1:A:180:LEU:HD13	5	0.21
(1,2006)	1:A:144:LEU:HB3	1:A:180:LEU:HD21	5	0.21
(1,2006)	1:A:144:LEU:HB3	1:A:180:LEU:HD22	5	0.21
(1,2006)	1:A:144:LEU:HB3	1:A:180:LEU:HD23	5	0.21
(1,2004)	1:A:144:LEU:HA	1:A:148:TRP:HB3	14	0.21
(1,2000)	1:A:141:GLU:HG3	1:A:180:LEU:HB3	17	0.21
(1,1998)	1:A:141:GLU:HB3	1:A:142:ASN:H	7	0.21
(1,1992)	1:A:141:GLU:H	1:A:144:LEU:HB3	14	0.21
(1,1955)	1:A:138:LEU:H	1:A:138:LEU:HB3	6	0.21
(1,1895)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:122:LEU:HD11	4	0.21
(1,1895)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:122:LEU:HD12	4	0.21
(1,1895)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:122:LEU:HD13	4	0.21
(1,1895)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:122:LEU:HD21	4	0.21
(1,1895)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:122:LEU:HD22	4	0.21
(1,1895)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:122:LEU:HD23	4	0.21
(1,1894)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:121:HIS:HE1	19	0.21
(1,1890)	1:A:117:HIS:HE1	1:A:122:LEU:HB3	15	0.21
(1,1880)	1:A:110:ILE:HD11	1:A:116:PRO:HG3	5	0.21
(1,1880)	1:A:110:ILE:HD12	1:A:116:PRO:HG3	5	0.21
(1,1880)	1:A:110:ILE:HD13	1:A:116:PRO:HG3	5	0.21
(1,1878)	1:A:110:ILE:HG13	1:A:111:ILE:H	8	0.21
(1,1870)	1:A:107:LYS:H	1:A:107:LYS:HB3	16	0.21
(1,1855)	1:A:101:GLN:HG3	1:A:102:ASP:H	9	0.21
(1,1849)	1:A:101:GLN:HB3	1:A:101:GLN:HE21	1	0.21
(1,1849)	1:A:101:GLN:HB3	1:A:101:GLN:HE22	1	0.21
(1,1743)	1:A:89:ASP:H	1:A:89:ASP:HB3	11	0.21
(1,1705)	1:A:82:VAL:HG11	1:A:135:THR:HG21	7	0.21
(1,1705)	1:A:82:VAL:HG11	1:A:135:THR:HG22	7	0.21
(1,1705)	1:A:82:VAL:HG11	1:A:135:THR:HG23	7	0.21
(1,1705)	1:A:82:VAL:HG12	1:A:135:THR:HG21	7	0.21
(1,1705)	1:A:82:VAL:HG12	1:A:135:THR:HG22	7	0.21
(1,1705)	1:A:82:VAL:HG12	1:A:135:THR:HG23	7	0.21
(1,1705)	1:A:82:VAL:HG13	1:A:135:THR:HG21	7	0.21
(1,1705)	1:A:82:VAL:HG13	1:A:135:THR:HG22	7	0.21
(1,1705)	1:A:82:VAL:HG13	1:A:135:THR:HG23	7	0.21
(1,1705)	1:A:82:VAL:HG21	1:A:135:THR:HG21	7	0.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1705)	1:A:82:VAL:HG21	1:A:135:THR:HG22	7	0.21
(1,1705)	1:A:82:VAL:HG21	1:A:135:THR:HG23	7	0.21
(1,1705)	1:A:82:VAL:HG22	1:A:135:THR:HG21	7	0.21
(1,1705)	1:A:82:VAL:HG22	1:A:135:THR:HG22	7	0.21
(1,1705)	1:A:82:VAL:HG22	1:A:135:THR:HG23	7	0.21
(1,1705)	1:A:82:VAL:HG23	1:A:135:THR:HG21	7	0.21
(1,1705)	1:A:82:VAL:HG23	1:A:135:THR:HG22	7	0.21
(1,1705)	1:A:82:VAL:HG23	1:A:135:THR:HG23	7	0.21
(1,1676)	1:A:80:LYS:HA	1:A:80:LYS:HG3	10	0.21
(1,1674)	1:A:80:LYS:H	1:A:80:LYS:HG3	18	0.21
(1,1643)	1:A:75:GLU:HB3	1:A:76:GLU:H	15	0.21
(1,161)	1:A:158:MET:H	1:A:158:MET:HG3	20	0.21
(1,1595)	1:A:220:THR:HA	1:A:223:LYS:HD3	16	0.21
(1,1549)	1:A:107:LYS:HE3	1:A:108:PRO:HA	19	0.21
(1,1526)	1:A:192:ILE:HA	1:A:193:ASN:HB3	2	0.21
(1,1486)	1:A:145:ARG:HA	1:A:145:ARG:HG3	10	0.21
(1,1469)	1:A:200:ARG:HA	1:A:200:ARG:HB3	3	0.21
(1,1469)	1:A:200:ARG:HA	1:A:200:ARG:HB3	17	0.21
(1,1469)	1:A:200:ARG:HA	1:A:200:ARG:HB3	18	0.21
(1,1371)	1:A:163:ARG:HA	1:A:163:ARG:HD3	9	0.21
(1,1366)	1:A:70:GLY:HA2	1:A:71:PRO:HG3	1	0.21
(1,1366)	1:A:70:GLY:HA3	1:A:71:PRO:HG3	1	0.21
(1,1366)	1:A:70:GLY:HA2	1:A:71:PRO:HG3	2	0.21
(1,1366)	1:A:70:GLY:HA3	1:A:71:PRO:HG3	2	0.21
(1,1366)	1:A:70:GLY:HA2	1:A:71:PRO:HG3	4	0.21
(1,1366)	1:A:70:GLY:HA3	1:A:71:PRO:HG3	4	0.21
(1,1366)	1:A:70:GLY:HA2	1:A:71:PRO:HG3	9	0.21
(1,1366)	1:A:70:GLY:HA3	1:A:71:PRO:HG3	9	0.21
(1,1366)	1:A:70:GLY:HA2	1:A:71:PRO:HG3	19	0.21
(1,1366)	1:A:70:GLY:HA3	1:A:71:PRO:HG3	19	0.21
(1,1338)	1:A:216:LYS:HB3	1:A:216:LYS:HE3	20	0.21
(1,1336)	1:A:223:LYS:HD3	1:A:223:LYS:HE3	7	0.21
(1,1329)	1:A:101:GLN:HA	1:A:107:LYS:HE3	20	0.21
(1,1322)	1:A:166:LYS:HG3	1:A:166:LYS:HE3	7	0.21
(1,1303)	1:A:87:GLU:HG3	1:A:88:ASP:HA	17	0.21
(1,1291)	1:A:224:GLU:HB3	1:A:224:GLU:HG3	9	0.21
(1,1285)	1:A:75:GLU:H	1:A:75:GLU:HG3	8	0.21
(1,1230)	1:A:200:ARG:HB3	1:A:200:ARG:HG3	7	0.21
(1,1230)	1:A:200:ARG:HB3	1:A:200:ARG:HG3	12	0.21
(1,1215)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:167:TYR:H	7	0.21
(1,1213)	1:A:165:HIS:HA	1:A:166:LYS:HD3	13	0.21
(1,103)	1:A:197:GLU:HB3	1:A:199:SER:H	15	0.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,103)	1:A:197:GLU:HB3	1:A:199:SER:H	17	0.21
(1,642)	1:A:209:ILE:HG21	1:A:210:PHE:HB3	19	0.2
(1,642)	1:A:209:ILE:HG22	1:A:210:PHE:HB3	19	0.2
(1,642)	1:A:209:ILE:HG23	1:A:210:PHE:HB3	19	0.2
(1,616)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:83:ILE:HD11	4	0.2
(1,616)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:83:ILE:HD12	4	0.2
(1,616)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:83:ILE:HD13	4	0.2
(1,480)	1:A:182:ARG:H	1:A:182:ARG:HD3	9	0.2
(1,480)	1:A:182:ARG:H	1:A:182:ARG:HD3	11	0.2
(1,448)	1:A:214:VAL:H	1:A:214:VAL:HG11	2	0.2
(1,448)	1:A:214:VAL:H	1:A:214:VAL:HG12	2	0.2
(1,448)	1:A:214:VAL:H	1:A:214:VAL:HG13	2	0.2
(1,448)	1:A:214:VAL:H	1:A:214:VAL:HG11	7	0.2
(1,448)	1:A:214:VAL:H	1:A:214:VAL:HG12	7	0.2
(1,448)	1:A:214:VAL:H	1:A:214:VAL:HG13	7	0.2
(1,448)	1:A:214:VAL:H	1:A:214:VAL:HG11	8	0.2
(1,448)	1:A:214:VAL:H	1:A:214:VAL:HG12	8	0.2
(1,448)	1:A:214:VAL:H	1:A:214:VAL:HG13	8	0.2
(1,448)	1:A:214:VAL:H	1:A:214:VAL:HG11	9	0.2
(1,448)	1:A:214:VAL:H	1:A:214:VAL:HG12	9	0.2
(1,448)	1:A:214:VAL:H	1:A:214:VAL:HG13	9	0.2
(1,448)	1:A:214:VAL:H	1:A:214:VAL:HG11	17	0.2
(1,448)	1:A:214:VAL:H	1:A:214:VAL:HG12	17	0.2
(1,448)	1:A:214:VAL:H	1:A:214:VAL:HG13	17	0.2
(1,445)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:106:ILE:H	19	0.2
(1,387)	1:A:80:LYS:HD3	1:A:107:LYS:H	10	0.2
(1,2413)	1:A:232:GLN:H	1:A:232:GLN:HG3	16	0.2
(1,2393)	1:A:224:GLU:HB3	1:A:224:GLU:HG3	11	0.2
(1,2383)	1:A:223:LYS:HB3	1:A:223:LYS:HD3	20	0.2
(1,2377)	1:A:222:TRP:HE1	1:A:226:ARG:HD3	6	0.2
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG11	9	0.2
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG12	9	0.2
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG13	9	0.2
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG21	9	0.2
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG22	9	0.2
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG23	9	0.2
(1,2320)	1:A:208:ARG:HA	1:A:208:ARG:HG3	3	0.2
(1,2320)	1:A:208:ARG:HA	1:A:208:ARG:HG3	20	0.2
(1,2295)	1:A:200:ARG:HB3	1:A:200:ARG:HG3	18	0.2
(1,2284)	1:A:197:GLU:HA	1:A:202:PHE:HB3	9	0.2
(1,2240)	1:A:190:GLN:HG3	1:A:191:THR:HG21	17	0.2
(1,2240)	1:A:190:GLN:HG3	1:A:191:THR:HG22	17	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2240)	1:A:190:GLN:HG3	1:A:191:THR:HG23	17	0.2
(1,2240)	1:A:190:GLN:HG3	1:A:191:THR:HG21	19	0.2
(1,2240)	1:A:190:GLN:HG3	1:A:191:THR:HG22	19	0.2
(1,2240)	1:A:190:GLN:HG3	1:A:191:THR:HG23	19	0.2
(1,2216)	1:A:185:THR:HG21	1:A:189:LEU:HB3	7	0.2
(1,2216)	1:A:185:THR:HG22	1:A:189:LEU:HB3	7	0.2
(1,2216)	1:A:185:THR:HG23	1:A:189:LEU:HB3	7	0.2
(1,2206)	1:A:184:ARG:H	1:A:184:ARG:HG3	17	0.2
(1,2205)	1:A:184:ARG:H	1:A:184:ARG:HB3	11	0.2
(1,2205)	1:A:184:ARG:H	1:A:184:ARG:HB3	16	0.2
(1,2201)	1:A:183:GLU:HA	1:A:183:GLU:HG3	10	0.2
(1,2199)	1:A:182:ARG:HA	1:A:182:ARG:HG3	6	0.2
(1,2172)	1:A:177:ASN:HB3	1:A:178:ASN:H	3	0.2
(1,215)	1:A:224:GLU:H	1:A:224:GLU:HB3	11	0.2
(1,2126)	1:A:171:ILE:HD11	1:A:172:PRO:HG3	14	0.2
(1,2126)	1:A:171:ILE:HD12	1:A:172:PRO:HG3	14	0.2
(1,2126)	1:A:171:ILE:HD13	1:A:172:PRO:HG3	14	0.2
(1,211)	1:A:210:PHE:H	1:A:210:PHE:HB3	5	0.2
(1,211)	1:A:210:PHE:H	1:A:210:PHE:HB3	6	0.2
(1,211)	1:A:210:PHE:H	1:A:210:PHE:HB3	13	0.2
(1,2091)	1:A:164:GLN:HB3	1:A:164:GLN:HE21	9	0.2
(1,2091)	1:A:164:GLN:HB3	1:A:164:GLN:HE22	9	0.2
(1,2082)	1:A:163:ARG:H	1:A:163:ARG:HB3	15	0.2
(1,2036)	1:A:152:GLN:HG3	1:A:152:GLN:HE21	20	0.2
(1,2036)	1:A:152:GLN:HG3	1:A:152:GLN:HE22	20	0.2
(1,2035)	1:A:152:GLN:H	1:A:152:GLN:HG3	9	0.2
(1,2006)	1:A:144:LEU:HB3	1:A:180:LEU:HD11	2	0.2
(1,2006)	1:A:144:LEU:HB3	1:A:180:LEU:HD12	2	0.2
(1,2006)	1:A:144:LEU:HB3	1:A:180:LEU:HD13	2	0.2
(1,2006)	1:A:144:LEU:HB3	1:A:180:LEU:HD21	2	0.2
(1,2006)	1:A:144:LEU:HB3	1:A:180:LEU:HD22	2	0.2
(1,2006)	1:A:144:LEU:HB3	1:A:180:LEU:HD23	2	0.2
(1,1999)	1:A:141:GLU:HG3	1:A:142:ASN:H	7	0.2
(1,1999)	1:A:141:GLU:HG3	1:A:142:ASN:H	16	0.2
(1,1998)	1:A:141:GLU:HB3	1:A:142:ASN:H	15	0.2
(1,1992)	1:A:141:GLU:H	1:A:144:LEU:HB3	17	0.2
(1,1989)	1:A:140:THR:HG21	1:A:143:PHE:HB3	5	0.2
(1,1989)	1:A:140:THR:HG22	1:A:143:PHE:HB3	5	0.2
(1,1989)	1:A:140:THR:HG23	1:A:143:PHE:HB3	5	0.2
(1,1989)	1:A:140:THR:HG21	1:A:143:PHE:HB3	17	0.2
(1,1989)	1:A:140:THR:HG22	1:A:143:PHE:HB3	17	0.2
(1,1989)	1:A:140:THR:HG23	1:A:143:PHE:HB3	17	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1955)	1:A:138:LEU:H	1:A:138:LEU:HB3	18	0.2
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD11	1:A:151:PHE:HB3	5	0.2
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD12	1:A:151:PHE:HB3	5	0.2
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD13	1:A:151:PHE:HB3	5	0.2
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD21	1:A:151:PHE:HB3	5	0.2
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD22	1:A:151:PHE:HB3	5	0.2
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD23	1:A:151:PHE:HB3	5	0.2
(1,1894)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:121:HIS:HE1	13	0.2
(1,1894)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:121:HIS:HE1	17	0.2
(1,1886)	1:A:115:MET:HB3	1:A:115:MET:HE1	17	0.2
(1,1886)	1:A:115:MET:HB3	1:A:115:MET:HE2	17	0.2
(1,1886)	1:A:115:MET:HB3	1:A:115:MET:HE3	17	0.2
(1,1884)	1:A:114:GLU:HA	1:A:114:GLU:HG3	12	0.2
(1,1880)	1:A:110:ILE:HD11	1:A:116:PRO:HG3	19	0.2
(1,1880)	1:A:110:ILE:HD12	1:A:116:PRO:HG3	19	0.2
(1,1880)	1:A:110:ILE:HD13	1:A:116:PRO:HG3	19	0.2
(1,1880)	1:A:110:ILE:HD11	1:A:116:PRO:HG3	20	0.2
(1,1880)	1:A:110:ILE:HD12	1:A:116:PRO:HG3	20	0.2
(1,1880)	1:A:110:ILE:HD13	1:A:116:PRO:HG3	20	0.2
(1,1855)	1:A:101:GLN:HG3	1:A:102:ASP:H	8	0.2
(1,1849)	1:A:101:GLN:HB3	1:A:101:GLN:HE21	20	0.2
(1,1849)	1:A:101:GLN:HB3	1:A:101:GLN:HE22	20	0.2
(1,1782)	1:A:94:LEU:HD11	1:A:114:GLU:HG3	7	0.2
(1,1782)	1:A:94:LEU:HD12	1:A:114:GLU:HG3	7	0.2
(1,1782)	1:A:94:LEU:HD13	1:A:114:GLU:HG3	7	0.2
(1,1782)	1:A:94:LEU:HD21	1:A:114:GLU:HG3	7	0.2
(1,1782)	1:A:94:LEU:HD22	1:A:114:GLU:HG3	7	0.2
(1,1782)	1:A:94:LEU:HD23	1:A:114:GLU:HG3	7	0.2
(1,1765)	1:A:93:ALA:HA	1:A:95:ARG:HB3	15	0.2
(1,1748)	1:A:89:ASP:HB3	1:A:138:LEU:HD11	2	0.2
(1,1748)	1:A:89:ASP:HB3	1:A:138:LEU:HD12	2	0.2
(1,1748)	1:A:89:ASP:HB3	1:A:138:LEU:HD13	2	0.2
(1,1748)	1:A:89:ASP:HB3	1:A:138:LEU:HD21	2	0.2
(1,1748)	1:A:89:ASP:HB3	1:A:138:LEU:HD22	2	0.2
(1,1748)	1:A:89:ASP:HB3	1:A:138:LEU:HD23	2	0.2
(1,1743)	1:A:89:ASP:H	1:A:89:ASP:HB3	1	0.2
(1,1651)	1:A:76:GLU:HB3	1:A:222:TRP:HH2	5	0.2
(1,1646)	1:A:76:GLU:HA	1:A:76:GLU:HB3	16	0.2
(1,1514)	1:A:95:ARG:HA	1:A:98:ASN:HB3	12	0.2
(1,1486)	1:A:145:ARG:HA	1:A:145:ARG:HG3	16	0.2
(1,1469)	1:A:200:ARG:HA	1:A:200:ARG:HB3	16	0.2
(1,1366)	1:A:70:GLY:HA2	1:A:71:PRO:HG3	8	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1366)	1:A:70:GLY:HA3	1:A:71:PRO:HG3	8	0.2
(1,1366)	1:A:70:GLY:HA2	1:A:71:PRO:HG3	13	0.2
(1,1366)	1:A:70:GLY:HA3	1:A:71:PRO:HG3	13	0.2
(1,1355)	1:A:182:ARG:HD3	1:A:190:GLN:HE22	4	0.2
(1,1351)	1:A:200:ARG:HA	1:A:200:ARG:HD3	8	0.2
(1,1351)	1:A:200:ARG:HA	1:A:200:ARG:HD3	11	0.2
(1,1333)	1:A:107:LYS:H	1:A:107:LYS:HE3	9	0.2
(1,1323)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:166:LYS:HE3	20	0.2
(1,1316)	1:A:209:ILE:HB	1:A:210:PHE:HB3	14	0.2
(1,1302)	1:A:87:GLU:HA	1:A:87:GLU:HG3	6	0.2
(1,1285)	1:A:75:GLU:H	1:A:75:GLU:HG3	4	0.2
(1,1230)	1:A:200:ARG:HB3	1:A:200:ARG:HG3	10	0.2
(1,1215)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:167:TYR:H	4	0.2
(1,642)	1:A:209:ILE:HG21	1:A:210:PHE:HB3	13	0.19
(1,642)	1:A:209:ILE:HG22	1:A:210:PHE:HB3	13	0.19
(1,642)	1:A:209:ILE:HG23	1:A:210:PHE:HB3	13	0.19
(1,642)	1:A:209:ILE:HG21	1:A:210:PHE:HB3	20	0.19
(1,642)	1:A:209:ILE:HG22	1:A:210:PHE:HB3	20	0.19
(1,642)	1:A:209:ILE:HG23	1:A:210:PHE:HB3	20	0.19
(1,471)	1:A:196:GLU:H	1:A:196:GLU:HB3	7	0.19
(1,471)	1:A:196:GLU:H	1:A:196:GLU:HB3	16	0.19
(1,448)	1:A:214:VAL:H	1:A:214:VAL:HG11	6	0.19
(1,448)	1:A:214:VAL:H	1:A:214:VAL:HG12	6	0.19
(1,448)	1:A:214:VAL:H	1:A:214:VAL:HG13	6	0.19
(1,448)	1:A:214:VAL:H	1:A:214:VAL:HG11	10	0.19
(1,448)	1:A:214:VAL:H	1:A:214:VAL:HG12	10	0.19
(1,448)	1:A:214:VAL:H	1:A:214:VAL:HG13	10	0.19
(1,438)	1:A:180:LEU:H	1:A:181:PRO:HG3	18	0.19
(1,438)	1:A:180:LEU:H	1:A:181:PRO:HG3	20	0.19
(1,257)	1:A:205:GLN:HB3	1:A:206:VAL:H	11	0.19
(1,2418)	1:A:234:ILE:H	1:A:234:ILE:HG13	1	0.19
(1,2417)	1:A:233:PHE:HB3	1:A:234:ILE:H	14	0.19
(1,2411)	1:A:230:GLN:HB3	1:A:230:GLN:HE21	2	0.19
(1,2411)	1:A:230:GLN:HB3	1:A:230:GLN:HE22	2	0.19
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG11	1:A:230:GLN:HG3	14	0.19
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG12	1:A:230:GLN:HG3	14	0.19
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG13	1:A:230:GLN:HG3	14	0.19
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG21	1:A:230:GLN:HG3	14	0.19
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG22	1:A:230:GLN:HG3	14	0.19
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG23	1:A:230:GLN:HG3	14	0.19
(1,2404)	1:A:228:MET:HG3	1:A:229:VAL:H	6	0.19
(1,2404)	1:A:228:MET:HG3	1:A:229:VAL:H	19	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2386)	1:A:223:LYS:HG3	1:A:223:LYS:HE3	17	0.19
(1,2380)	1:A:223:LYS:HA	1:A:223:LYS:HG3	13	0.19
(1,2377)	1:A:222:TRP:HE1	1:A:226:ARG:HD3	1	0.19
(1,2370)	1:A:220:THR:HA	1:A:223:LYS:HB3	8	0.19
(1,2350)	1:A:216:LYS:HB3	1:A:217:THR:H	7	0.19
(1,2350)	1:A:216:LYS:HB3	1:A:217:THR:H	16	0.19
(1,2325)	1:A:212:GLU:H	1:A:212:GLU:HG3	17	0.19
(1,2295)	1:A:200:ARG:HB3	1:A:200:ARG:HG3	6	0.19
(1,2292)	1:A:199:SER:H	1:A:199:SER:HB3	20	0.19
(1,2248)	1:A:194:ALA:HB1	1:A:196:GLU:HG3	7	0.19
(1,2248)	1:A:194:ALA:HB2	1:A:196:GLU:HG3	7	0.19
(1,2248)	1:A:194:ALA:HB3	1:A:196:GLU:HG3	7	0.19
(1,2206)	1:A:184:ARG:H	1:A:184:ARG:HG3	1	0.19
(1,2202)	1:A:183:GLU:HB3	1:A:184:ARG:HD3	19	0.19
(1,2172)	1:A:177:ASN:HB3	1:A:178:ASN:H	4	0.19
(1,2110)	1:A:169:SER:H	1:A:169:SER:HB3	13	0.19
(1,211)	1:A:210:PHE:H	1:A:210:PHE:HB3	3	0.19
(1,2100)	1:A:166:LYS:HB3	1:A:221:ILE:HG21	12	0.19
(1,2100)	1:A:166:LYS:HB3	1:A:221:ILE:HG22	12	0.19
(1,2100)	1:A:166:LYS:HB3	1:A:221:ILE:HG23	12	0.19
(1,2098)	1:A:166:LYS:HB3	1:A:166:LYS:HE3	12	0.19
(1,2020)	1:A:145:ARG:HB3	1:A:145:ARG:HD3	19	0.19
(1,1999)	1:A:141:GLU:HG3	1:A:142:ASN:H	11	0.19
(1,1998)	1:A:141:GLU:HB3	1:A:142:ASN:H	16	0.19
(1,1993)	1:A:141:GLU:H	1:A:180:LEU:HB3	20	0.19
(1,1989)	1:A:140:THR:HG21	1:A:143:PHE:HB3	2	0.19
(1,1989)	1:A:140:THR:HG22	1:A:143:PHE:HB3	2	0.19
(1,1989)	1:A:140:THR:HG23	1:A:143:PHE:HB3	2	0.19
(1,1989)	1:A:140:THR:HG21	1:A:143:PHE:HB3	3	0.19
(1,1989)	1:A:140:THR:HG22	1:A:143:PHE:HB3	3	0.19
(1,1989)	1:A:140:THR:HG23	1:A:143:PHE:HB3	3	0.19
(1,1989)	1:A:140:THR:HG21	1:A:143:PHE:HB3	6	0.19
(1,1989)	1:A:140:THR:HG22	1:A:143:PHE:HB3	6	0.19
(1,1989)	1:A:140:THR:HG23	1:A:143:PHE:HB3	6	0.19
(1,1989)	1:A:140:THR:HG21	1:A:143:PHE:HB3	10	0.19
(1,1989)	1:A:140:THR:HG22	1:A:143:PHE:HB3	10	0.19
(1,1989)	1:A:140:THR:HG23	1:A:143:PHE:HB3	10	0.19
(1,1989)	1:A:140:THR:HG21	1:A:143:PHE:HB3	15	0.19
(1,1989)	1:A:140:THR:HG22	1:A:143:PHE:HB3	15	0.19
(1,1989)	1:A:140:THR:HG23	1:A:143:PHE:HB3	15	0.19
(1,1989)	1:A:140:THR:HG21	1:A:143:PHE:HB3	20	0.19
(1,1989)	1:A:140:THR:HG22	1:A:143:PHE:HB3	20	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1989)	1:A:140:THR:HG23	1:A:143:PHE:HB3	20	0.19
(1,1955)	1:A:138:LEU:H	1:A:138:LEU:HB3	9	0.19
(1,1936)	1:A:134:TRP:HE1	1:A:169:SER:HB3	7	0.19
(1,1934)	1:A:132:SER:HB3	1:A:134:TRP:H	3	0.19
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD11	1:A:151:PHE:HB3	2	0.19
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD12	1:A:151:PHE:HB3	2	0.19
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD13	1:A:151:PHE:HB3	2	0.19
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD21	1:A:151:PHE:HB3	2	0.19
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD22	1:A:151:PHE:HB3	2	0.19
(1,1910)	1:A:125:LEU:HD23	1:A:151:PHE:HB3	2	0.19
(1,1894)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:121:HIS:HE1	14	0.19
(1,1887)	1:A:115:MET:HG3	1:A:115:MET:HE1	9	0.19
(1,1887)	1:A:115:MET:HG3	1:A:115:MET:HE2	9	0.19
(1,1887)	1:A:115:MET:HG3	1:A:115:MET:HE3	9	0.19
(1,1887)	1:A:115:MET:HG3	1:A:115:MET:HE1	14	0.19
(1,1887)	1:A:115:MET:HG3	1:A:115:MET:HE2	14	0.19
(1,1887)	1:A:115:MET:HG3	1:A:115:MET:HE3	14	0.19
(1,1881)	1:A:111:ILE:HG13	1:A:114:GLU:HG3	15	0.19
(1,1870)	1:A:107:LYS:H	1:A:107:LYS:HB3	12	0.19
(1,1800)	1:A:97:GLN:HB3	1:A:98:ASN:H	6	0.19
(1,1800)	1:A:97:GLN:HB3	1:A:98:ASN:H	11	0.19
(1,1782)	1:A:94:LEU:HD11	1:A:114:GLU:HG3	4	0.19
(1,1782)	1:A:94:LEU:HD12	1:A:114:GLU:HG3	4	0.19
(1,1782)	1:A:94:LEU:HD13	1:A:114:GLU:HG3	4	0.19
(1,1782)	1:A:94:LEU:HD21	1:A:114:GLU:HG3	4	0.19
(1,1782)	1:A:94:LEU:HD22	1:A:114:GLU:HG3	4	0.19
(1,1782)	1:A:94:LEU:HD23	1:A:114:GLU:HG3	4	0.19
(1,1782)	1:A:94:LEU:HD11	1:A:114:GLU:HG3	13	0.19
(1,1782)	1:A:94:LEU:HD12	1:A:114:GLU:HG3	13	0.19
(1,1782)	1:A:94:LEU:HD13	1:A:114:GLU:HG3	13	0.19
(1,1782)	1:A:94:LEU:HD21	1:A:114:GLU:HG3	13	0.19
(1,1782)	1:A:94:LEU:HD22	1:A:114:GLU:HG3	13	0.19
(1,1782)	1:A:94:LEU:HD23	1:A:114:GLU:HG3	13	0.19
(1,1782)	1:A:94:LEU:HD11	1:A:114:GLU:HG3	16	0.19
(1,1782)	1:A:94:LEU:HD12	1:A:114:GLU:HG3	16	0.19
(1,1782)	1:A:94:LEU:HD13	1:A:114:GLU:HG3	16	0.19
(1,1782)	1:A:94:LEU:HD21	1:A:114:GLU:HG3	16	0.19
(1,1782)	1:A:94:LEU:HD22	1:A:114:GLU:HG3	16	0.19
(1,1782)	1:A:94:LEU:HD23	1:A:114:GLU:HG3	16	0.19
(1,1747)	1:A:89:ASP:HB3	1:A:93:ALA:H	7	0.19
(1,1709)	1:A:83:ILE:HA	1:A:136:ILE:HG13	20	0.19
(1,1650)	1:A:76:GLU:HB3	1:A:222:TRP:HZ2	9	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1647)	1:A:76:GLU:HA	1:A:76:GLU:HG3	3	0.19
(1,1643)	1:A:75:GLU:HB3	1:A:76:GLU:H	17	0.19
(1,1635)	1:A:71:PRO:HB3	1:A:74:SER:HB3	13	0.19
(1,1526)	1:A:192:ILE:HA	1:A:193:ASN:HB3	1	0.19
(1,1526)	1:A:192:ILE:HA	1:A:193:ASN:HB3	20	0.19
(1,1521)	1:A:182:ARG:HA	1:A:182:ARG:HD3	2	0.19
(1,1521)	1:A:182:ARG:HA	1:A:182:ARG:HD3	19	0.19
(1,1499)	1:A:223:LYS:HA	1:A:223:LYS:HD3	20	0.19
(1,1486)	1:A:145:ARG:HA	1:A:145:ARG:HG3	13	0.19
(1,1431)	1:A:197:GLU:HB3	1:A:198:GLU:HA	5	0.19
(1,1371)	1:A:163:ARG:HA	1:A:163:ARG:HD3	16	0.19
(1,1371)	1:A:163:ARG:HA	1:A:163:ARG:HD3	19	0.19
(1,1366)	1:A:70:GLY:HA2	1:A:71:PRO:HG3	3	0.19
(1,1366)	1:A:70:GLY:HA3	1:A:71:PRO:HG3	3	0.19
(1,1366)	1:A:70:GLY:HA2	1:A:71:PRO:HG3	20	0.19
(1,1366)	1:A:70:GLY:HA3	1:A:71:PRO:HG3	20	0.19
(1,134)	1:A:163:ARG:H	1:A:163:ARG:HG3	3	0.19
(1,1339)	1:A:212:GLU:HG3	1:A:216:LYS:HE3	19	0.19
(1,1336)	1:A:223:LYS:HD3	1:A:223:LYS:HE3	1	0.19
(1,1336)	1:A:223:LYS:HD3	1:A:223:LYS:HE3	9	0.19
(1,1336)	1:A:223:LYS:HD3	1:A:223:LYS:HE3	12	0.19
(1,1336)	1:A:223:LYS:HD3	1:A:223:LYS:HE3	14	0.19
(1,1324)	1:A:166:LYS:HA	1:A:166:LYS:HE3	2	0.19
(1,1324)	1:A:166:LYS:HA	1:A:166:LYS:HE3	6	0.19
(1,1324)	1:A:166:LYS:HA	1:A:166:LYS:HE3	8	0.19
(1,1322)	1:A:166:LYS:HG3	1:A:166:LYS:HE3	14	0.19
(1,1303)	1:A:87:GLU:HG3	1:A:88:ASP:HA	1	0.19
(1,1302)	1:A:87:GLU:HA	1:A:87:GLU:HG3	13	0.19
(1,1302)	1:A:87:GLU:HA	1:A:87:GLU:HG3	14	0.19
(1,1302)	1:A:87:GLU:HA	1:A:87:GLU:HG3	15	0.19
(1,1291)	1:A:224:GLU:HB3	1:A:224:GLU:HG3	6	0.19
(1,1285)	1:A:75:GLU:H	1:A:75:GLU:HG3	6	0.19
(1,1230)	1:A:200:ARG:HB3	1:A:200:ARG:HG3	20	0.19
(1,1227)	1:A:223:LYS:H	1:A:223:LYS:HD3	16	0.19
(1,1220)	1:A:216:LYS:HD3	1:A:217:THR:H	11	0.19
(1,1135)	1:A:216:LYS:HG3	1:A:216:LYS:HD3	5	0.19
(1,104)	1:A:196:GLU:HB3	1:A:199:SER:H	12	0.19
(1,103)	1:A:197:GLU:HB3	1:A:199:SER:H	4	0.19
(1,100)	1:A:145:ARG:HB3	1:A:146:ASP:H	5	0.19
(1,863)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG11	8	0.18
(1,863)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG12	8	0.18
(1,863)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG13	8	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,821)	1:A:173:MET:H	1:A:173:MET:HE1	8	0.18
(1,821)	1:A:173:MET:H	1:A:173:MET:HE2	8	0.18
(1,821)	1:A:173:MET:H	1:A:173:MET:HE3	8	0.18
(1,509)	1:A:148:TRP:HE1	1:A:186:PRO:HB3	9	0.18
(1,480)	1:A:182:ARG:H	1:A:182:ARG:HD3	6	0.18
(1,471)	1:A:196:GLU:H	1:A:196:GLU:HB3	2	0.18
(1,471)	1:A:196:GLU:H	1:A:196:GLU:HB3	6	0.18
(1,448)	1:A:214:VAL:H	1:A:214:VAL:HG11	12	0.18
(1,448)	1:A:214:VAL:H	1:A:214:VAL:HG12	12	0.18
(1,448)	1:A:214:VAL:H	1:A:214:VAL:HG13	12	0.18
(1,448)	1:A:214:VAL:H	1:A:214:VAL:HG11	15	0.18
(1,448)	1:A:214:VAL:H	1:A:214:VAL:HG12	15	0.18
(1,448)	1:A:214:VAL:H	1:A:214:VAL:HG13	15	0.18
(1,332)	1:A:95:ARG:H	1:A:95:ARG:HD3	16	0.18
(1,257)	1:A:205:GLN:HB3	1:A:206:VAL:H	16	0.18
(1,2421)	1:A:234:ILE:HG13	1:A:235:ALA:H	19	0.18
(1,2415)	1:A:232:GLN:HG3	1:A:232:GLN:HE22	12	0.18
(1,2415)	1:A:232:GLN:HG3	1:A:232:GLN:HE22	14	0.18
(1,2413)	1:A:232:GLN:H	1:A:232:GLN:HG3	20	0.18
(1,2411)	1:A:230:GLN:HB3	1:A:230:GLN:HE21	4	0.18
(1,2411)	1:A:230:GLN:HB3	1:A:230:GLN:HE22	4	0.18
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG11	1:A:230:GLN:HG3	9	0.18
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG12	1:A:230:GLN:HG3	9	0.18
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG13	1:A:230:GLN:HG3	9	0.18
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG21	1:A:230:GLN:HG3	9	0.18
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG22	1:A:230:GLN:HG3	9	0.18
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG23	1:A:230:GLN:HG3	9	0.18
(1,2404)	1:A:228:MET:HG3	1:A:229:VAL:H	7	0.18
(1,2402)	1:A:227:ASN:HB3	1:A:228:MET:H	12	0.18
(1,2395)	1:A:225:THR:HG21	1:A:226:ARG:HD3	4	0.18
(1,2395)	1:A:225:THR:HG22	1:A:226:ARG:HD3	4	0.18
(1,2395)	1:A:225:THR:HG23	1:A:226:ARG:HD3	4	0.18
(1,2377)	1:A:222:TRP:HE1	1:A:226:ARG:HD3	2	0.18
(1,2370)	1:A:220:THR:HA	1:A:223:LYS:HB3	12	0.18
(1,2350)	1:A:216:LYS:HB3	1:A:217:THR:H	18	0.18
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG11	5	0.18
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG12	5	0.18
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG13	5	0.18
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG21	5	0.18
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG22	5	0.18
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG23	5	0.18
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG11	7	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG12	7	0.18
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG13	7	0.18
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG21	7	0.18
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG22	7	0.18
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG23	7	0.18
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG11	11	0.18
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG12	11	0.18
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG13	11	0.18
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG21	11	0.18
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG22	11	0.18
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG23	11	0.18
(1,2320)	1:A:208:ARG:HA	1:A:208:ARG:HG3	17	0.18
(1,2320)	1:A:208:ARG:HA	1:A:208:ARG:HG3	18	0.18
(1,2292)	1:A:199:SER:H	1:A:199:SER:HB3	8	0.18
(1,2283)	1:A:197:GLU:HA	1:A:197:GLU:HG3	13	0.18
(1,2240)	1:A:190:GLN:HG3	1:A:191:THR:HG21	3	0.18
(1,2240)	1:A:190:GLN:HG3	1:A:191:THR:HG22	3	0.18
(1,2240)	1:A:190:GLN:HG3	1:A:191:THR:HG23	3	0.18
(1,2224)	1:A:187:PHE:HB3	1:A:188:ALA:HA	19	0.18
(1,2206)	1:A:184:ARG:H	1:A:184:ARG:HG3	6	0.18
(1,2205)	1:A:184:ARG:H	1:A:184:ARG:HB3	9	0.18
(1,2193)	1:A:180:LEU:HD11	1:A:184:ARG:HD3	11	0.18
(1,2193)	1:A:180:LEU:HD12	1:A:184:ARG:HD3	11	0.18
(1,2193)	1:A:180:LEU:HD13	1:A:184:ARG:HD3	11	0.18
(1,2193)	1:A:180:LEU:HD21	1:A:184:ARG:HD3	11	0.18
(1,2193)	1:A:180:LEU:HD22	1:A:184:ARG:HD3	11	0.18
(1,2193)	1:A:180:LEU:HD23	1:A:184:ARG:HD3	11	0.18
(1,2173)	1:A:178:ASN:H	1:A:179:PRO:HD3	4	0.18
(1,211)	1:A:210:PHE:H	1:A:210:PHE:HB3	1	0.18
(1,211)	1:A:210:PHE:H	1:A:210:PHE:HB3	2	0.18
(1,211)	1:A:210:PHE:H	1:A:210:PHE:HB3	20	0.18
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG11	8	0.18
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG12	8	0.18
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG13	8	0.18
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG21	8	0.18
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG22	8	0.18
(1,2109)	1:A:168:ASN:HB3	1:A:170:VAL:HG23	8	0.18
(1,2105)	1:A:167:TYR:H	1:A:221:ILE:HG13	15	0.18
(1,2105)	1:A:167:TYR:H	1:A:221:ILE:HG13	17	0.18
(1,2081)	1:A:162:ASN:HB3	1:A:164:GLN:HE21	19	0.18
(1,2081)	1:A:162:ASN:HB3	1:A:164:GLN:HE22	19	0.18
(1,2059)	1:A:159:ASN:HB3	1:A:160:SER:H	19	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2020)	1:A:145:ARG:HB3	1:A:145:ARG:HD3	14	0.18
(1,2020)	1:A:145:ARG:HB3	1:A:145:ARG:HD3	18	0.18
(1,2006)	1:A:144:LEU:HB3	1:A:180:LEU:HD11	17	0.18
(1,2006)	1:A:144:LEU:HB3	1:A:180:LEU:HD12	17	0.18
(1,2006)	1:A:144:LEU:HB3	1:A:180:LEU:HD13	17	0.18
(1,2006)	1:A:144:LEU:HB3	1:A:180:LEU:HD21	17	0.18
(1,2006)	1:A:144:LEU:HB3	1:A:180:LEU:HD22	17	0.18
(1,2006)	1:A:144:LEU:HB3	1:A:180:LEU:HD23	17	0.18
(1,1992)	1:A:141:GLU:H	1:A:144:LEU:HB3	16	0.18
(1,1989)	1:A:140:THR:HG21	1:A:143:PHE:HB3	14	0.18
(1,1989)	1:A:140:THR:HG22	1:A:143:PHE:HB3	14	0.18
(1,1989)	1:A:140:THR:HG23	1:A:143:PHE:HB3	14	0.18
(1,1989)	1:A:140:THR:HG21	1:A:143:PHE:HB3	18	0.18
(1,1989)	1:A:140:THR:HG22	1:A:143:PHE:HB3	18	0.18
(1,1989)	1:A:140:THR:HG23	1:A:143:PHE:HB3	18	0.18
(1,1914)	1:A:125:LEU:HD11	1:A:157:LEU:HB3	12	0.18
(1,1914)	1:A:125:LEU:HD12	1:A:157:LEU:HB3	12	0.18
(1,1914)	1:A:125:LEU:HD13	1:A:157:LEU:HB3	12	0.18
(1,1914)	1:A:125:LEU:HD21	1:A:157:LEU:HB3	12	0.18
(1,1914)	1:A:125:LEU:HD22	1:A:157:LEU:HB3	12	0.18
(1,1914)	1:A:125:LEU:HD23	1:A:157:LEU:HB3	12	0.18
(1,1894)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:121:HIS:HE1	3	0.18
(1,1894)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:121:HIS:HE1	9	0.18
(1,1894)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:121:HIS:HE1	20	0.18
(1,1871)	1:A:107:LYS:HA	1:A:107:LYS:HD3	20	0.18
(1,1855)	1:A:101:GLN:HG3	1:A:102:ASP:H	4	0.18
(1,1855)	1:A:101:GLN:HG3	1:A:102:ASP:H	16	0.18
(1,179)	1:A:95:ARG:HD3	1:A:98:ASN:H	8	0.18
(1,1782)	1:A:94:LEU:HD11	1:A:114:GLU:HG3	12	0.18
(1,1782)	1:A:94:LEU:HD12	1:A:114:GLU:HG3	12	0.18
(1,1782)	1:A:94:LEU:HD13	1:A:114:GLU:HG3	12	0.18
(1,1782)	1:A:94:LEU:HD21	1:A:114:GLU:HG3	12	0.18
(1,1782)	1:A:94:LEU:HD22	1:A:114:GLU:HG3	12	0.18
(1,1782)	1:A:94:LEU:HD23	1:A:114:GLU:HG3	12	0.18
(1,1765)	1:A:93:ALA:HA	1:A:95:ARG:HB3	6	0.18
(1,1751)	1:A:91:ASP:H	1:A:92:GLU:HB3	12	0.18
(1,1751)	1:A:91:ASP:H	1:A:92:GLU:HB3	13	0.18
(1,1748)	1:A:89:ASP:HB3	1:A:138:LEU:HD11	4	0.18
(1,1748)	1:A:89:ASP:HB3	1:A:138:LEU:HD12	4	0.18
(1,1748)	1:A:89:ASP:HB3	1:A:138:LEU:HD13	4	0.18
(1,1748)	1:A:89:ASP:HB3	1:A:138:LEU:HD21	4	0.18
(1,1748)	1:A:89:ASP:HB3	1:A:138:LEU:HD22	4	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1748)	1:A:89:ASP:HB3	1:A:138:LEU:HD23	4	0.18
(1,1741)	1:A:88:ASP:HB3	1:A:89:ASP:H	18	0.18
(1,1649)	1:A:76:GLU:HB3	1:A:77:VAL:H	1	0.18
(1,1647)	1:A:76:GLU:HA	1:A:76:GLU:HG3	12	0.18
(1,1647)	1:A:76:GLU:HA	1:A:76:GLU:HG3	18	0.18
(1,1644)	1:A:76:GLU:H	1:A:76:GLU:HB3	11	0.18
(1,1603)	1:A:146:ASP:HB3	1:A:147:THR:HB	8	0.18
(1,1549)	1:A:107:LYS:HE3	1:A:108:PRO:HA	3	0.18
(1,1526)	1:A:192:ILE:HA	1:A:193:ASN:HB3	3	0.18
(1,1486)	1:A:145:ARG:HA	1:A:145:ARG:HG3	7	0.18
(1,1362)	1:A:208:ARG:HG3	1:A:208:ARG:HD3	1	0.18
(1,1362)	1:A:208:ARG:HG3	1:A:208:ARG:HD3	2	0.18
(1,1362)	1:A:208:ARG:HG3	1:A:208:ARG:HD3	7	0.18
(1,1362)	1:A:208:ARG:HG3	1:A:208:ARG:HD3	9	0.18
(1,1362)	1:A:208:ARG:HG3	1:A:208:ARG:HD3	12	0.18
(1,1362)	1:A:208:ARG:HG3	1:A:208:ARG:HD3	15	0.18
(1,1355)	1:A:182:ARG:HD3	1:A:190:GLN:HE22	3	0.18
(1,1336)	1:A:223:LYS:HD3	1:A:223:LYS:HE3	20	0.18
(1,1325)	1:A:166:LYS:H	1:A:166:LYS:HE3	16	0.18
(1,1322)	1:A:166:LYS:HG3	1:A:166:LYS:HE3	15	0.18
(1,1302)	1:A:87:GLU:HA	1:A:87:GLU:HG3	10	0.18
(1,1245)	1:A:80:LYS:HB3	1:A:106:ILE:HG21	11	0.18
(1,1245)	1:A:80:LYS:HB3	1:A:106:ILE:HG22	11	0.18
(1,1245)	1:A:80:LYS:HB3	1:A:106:ILE:HG23	11	0.18
(1,1213)	1:A:165:HIS:HA	1:A:166:LYS:HD3	14	0.18
(1,1212)	1:A:166:LYS:HA	1:A:166:LYS:HD3	7	0.18
(1,1135)	1:A:216:LYS:HG3	1:A:216:LYS:HD3	2	0.18
(1,1135)	1:A:216:LYS:HG3	1:A:216:LYS:HD3	6	0.18
(1,1135)	1:A:216:LYS:HG3	1:A:216:LYS:HD3	9	0.18
(1,1135)	1:A:216:LYS:HG3	1:A:216:LYS:HD3	11	0.18
(1,1135)	1:A:216:LYS:HG3	1:A:216:LYS:HD3	16	0.18
(1,1135)	1:A:216:LYS:HG3	1:A:216:LYS:HD3	17	0.18
(1,1135)	1:A:216:LYS:HG3	1:A:216:LYS:HD3	19	0.18
(1,103)	1:A:197:GLU:HB3	1:A:199:SER:H	8	0.18
(1,922)	1:A:217:THR:HG21	1:A:218:GLN:HG3	11	0.17
(1,922)	1:A:217:THR:HG22	1:A:218:GLN:HG3	11	0.17
(1,922)	1:A:217:THR:HG23	1:A:218:GLN:HG3	11	0.17
(1,642)	1:A:209:ILE:HG21	1:A:210:PHE:HB3	6	0.17
(1,642)	1:A:209:ILE:HG22	1:A:210:PHE:HB3	6	0.17
(1,642)	1:A:209:ILE:HG23	1:A:210:PHE:HB3	6	0.17
(1,642)	1:A:209:ILE:HG21	1:A:210:PHE:HB3	9	0.17
(1,642)	1:A:209:ILE:HG22	1:A:210:PHE:HB3	9	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,642)	1:A:209:ILE:HG23	1:A:210:PHE:HB3	9	0.17
(1,642)	1:A:209:ILE:HG21	1:A:210:PHE:HB3	11	0.17
(1,642)	1:A:209:ILE:HG22	1:A:210:PHE:HB3	11	0.17
(1,642)	1:A:209:ILE:HG23	1:A:210:PHE:HB3	11	0.17
(1,471)	1:A:196:GLU:H	1:A:196:GLU:HB3	12	0.17
(1,448)	1:A:214:VAL:H	1:A:214:VAL:HG11	1	0.17
(1,448)	1:A:214:VAL:H	1:A:214:VAL:HG12	1	0.17
(1,448)	1:A:214:VAL:H	1:A:214:VAL:HG13	1	0.17
(1,448)	1:A:214:VAL:H	1:A:214:VAL:HG11	3	0.17
(1,448)	1:A:214:VAL:H	1:A:214:VAL:HG12	3	0.17
(1,448)	1:A:214:VAL:H	1:A:214:VAL:HG13	3	0.17
(1,448)	1:A:214:VAL:H	1:A:214:VAL:HG11	4	0.17
(1,448)	1:A:214:VAL:H	1:A:214:VAL:HG12	4	0.17
(1,448)	1:A:214:VAL:H	1:A:214:VAL:HG13	4	0.17
(1,448)	1:A:214:VAL:H	1:A:214:VAL:HG11	14	0.17
(1,448)	1:A:214:VAL:H	1:A:214:VAL:HG12	14	0.17
(1,448)	1:A:214:VAL:H	1:A:214:VAL:HG13	14	0.17
(1,438)	1:A:180:LEU:H	1:A:181:PRO:HG3	19	0.17
(1,2418)	1:A:234:ILE:H	1:A:234:ILE:HG13	4	0.17
(1,2411)	1:A:230:GLN:HB3	1:A:230:GLN:HE21	18	0.17
(1,2411)	1:A:230:GLN:HB3	1:A:230:GLN:HE22	18	0.17
(1,2411)	1:A:230:GLN:HB3	1:A:230:GLN:HE21	20	0.17
(1,2411)	1:A:230:GLN:HB3	1:A:230:GLN:HE22	20	0.17
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG11	1:A:230:GLN:HG3	10	0.17
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG12	1:A:230:GLN:HG3	10	0.17
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG13	1:A:230:GLN:HG3	10	0.17
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG21	1:A:230:GLN:HG3	10	0.17
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG22	1:A:230:GLN:HG3	10	0.17
(1,2408)	1:A:229:VAL:HG23	1:A:230:GLN:HG3	10	0.17
(1,2404)	1:A:228:MET:HG3	1:A:229:VAL:H	9	0.17
(1,2383)	1:A:223:LYS:HB3	1:A:223:LYS:HD3	10	0.17
(1,2380)	1:A:223:LYS:HA	1:A:223:LYS:HG3	4	0.17
(1,2377)	1:A:222:TRP:HE1	1:A:226:ARG:HD3	7	0.17
(1,2372)	1:A:220:THR:HG21	1:A:221:ILE:HG13	4	0.17
(1,2372)	1:A:220:THR:HG22	1:A:221:ILE:HG13	4	0.17
(1,2372)	1:A:220:THR:HG23	1:A:221:ILE:HG13	4	0.17
(1,2295)	1:A:200:ARG:HB3	1:A:200:ARG:HG3	9	0.17
(1,2292)	1:A:199:SER:H	1:A:199:SER:HB3	3	0.17
(1,2289)	1:A:198:GLU:HA	1:A:198:GLU:HG3	13	0.17
(1,2250)	1:A:195:LEU:H	1:A:196:GLU:HG3	15	0.17
(1,2248)	1:A:194:ALA:HB1	1:A:196:GLU:HG3	4	0.17
(1,2248)	1:A:194:ALA:HB2	1:A:196:GLU:HG3	4	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2248)	1:A:194:ALA:HB3	1:A:196:GLU:HG3	4	0.17
(1,2248)	1:A:194:ALA:HB1	1:A:196:GLU:HG3	11	0.17
(1,2248)	1:A:194:ALA:HB2	1:A:196:GLU:HG3	11	0.17
(1,2248)	1:A:194:ALA:HB3	1:A:196:GLU:HG3	11	0.17
(1,2240)	1:A:190:GLN:HG3	1:A:191:THR:HG21	13	0.17
(1,2240)	1:A:190:GLN:HG3	1:A:191:THR:HG22	13	0.17
(1,2240)	1:A:190:GLN:HG3	1:A:191:THR:HG23	13	0.17
(1,2205)	1:A:184:ARG:H	1:A:184:ARG:HB3	2	0.17
(1,2205)	1:A:184:ARG:H	1:A:184:ARG:HB3	7	0.17
(1,2205)	1:A:184:ARG:H	1:A:184:ARG:HB3	17	0.17
(1,2115)	1:A:169:SER:HB3	1:A:209:ILE:HG21	3	0.17
(1,2115)	1:A:169:SER:HB3	1:A:209:ILE:HG22	3	0.17
(1,2115)	1:A:169:SER:HB3	1:A:209:ILE:HG23	3	0.17
(1,211)	1:A:210:PHE:H	1:A:210:PHE:HB3	11	0.17
(1,211)	1:A:210:PHE:H	1:A:210:PHE:HB3	15	0.17
(1,211)	1:A:210:PHE:H	1:A:210:PHE:HB3	16	0.17
(1,2100)	1:A:166:LYS:HB3	1:A:221:ILE:HG21	6	0.17
(1,2100)	1:A:166:LYS:HB3	1:A:221:ILE:HG22	6	0.17
(1,2100)	1:A:166:LYS:HB3	1:A:221:ILE:HG23	6	0.17
(1,2096)	1:A:166:LYS:H	1:A:166:LYS:HG3	8	0.17
(1,2096)	1:A:166:LYS:H	1:A:166:LYS:HG3	18	0.17
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD11	1:A:158:MET:HG3	7	0.17
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD12	1:A:158:MET:HG3	7	0.17
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD13	1:A:158:MET:HG3	7	0.17
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD21	1:A:158:MET:HG3	7	0.17
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD22	1:A:158:MET:HG3	7	0.17
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD23	1:A:158:MET:HG3	7	0.17
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD11	1:A:158:MET:HG3	13	0.17
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD12	1:A:158:MET:HG3	13	0.17
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD13	1:A:158:MET:HG3	13	0.17
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD21	1:A:158:MET:HG3	13	0.17
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD22	1:A:158:MET:HG3	13	0.17
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD23	1:A:158:MET:HG3	13	0.17
(1,2020)	1:A:145:ARG:HB3	1:A:145:ARG:HD3	15	0.17
(1,1999)	1:A:141:GLU:HG3	1:A:142:ASN:H	19	0.17
(1,1998)	1:A:141:GLU:HB3	1:A:142:ASN:H	11	0.17
(1,1992)	1:A:141:GLU:H	1:A:144:LEU:HB3	8	0.17
(1,1989)	1:A:140:THR:HG21	1:A:143:PHE:HB3	4	0.17
(1,1989)	1:A:140:THR:HG22	1:A:143:PHE:HB3	4	0.17
(1,1989)	1:A:140:THR:HG23	1:A:143:PHE:HB3	4	0.17
(1,1989)	1:A:140:THR:HG21	1:A:143:PHE:HB3	9	0.17
(1,1989)	1:A:140:THR:HG22	1:A:143:PHE:HB3	9	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1989)	1:A:140:THR:HG23	1:A:143:PHE:HB3	9	0.17
(1,1988)	1:A:140:THR:HG21	1:A:142:ASN:HB3	20	0.17
(1,1988)	1:A:140:THR:HG22	1:A:142:ASN:HB3	20	0.17
(1,1988)	1:A:140:THR:HG23	1:A:142:ASN:HB3	20	0.17
(1,1955)	1:A:138:LEU:H	1:A:138:LEU:HB3	20	0.17
(1,1898)	1:A:123:GLN:H	1:A:123:GLN:HG3	11	0.17
(1,1882)	1:A:112:PHE:HA	1:A:115:MET:HG3	20	0.17
(1,1878)	1:A:110:ILE:HG13	1:A:111:ILE:H	5	0.17
(1,1870)	1:A:107:LYS:H	1:A:107:LYS:HB3	10	0.17
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG11	2	0.17
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG12	2	0.17
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG13	2	0.17
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG21	2	0.17
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG22	2	0.17
(1,1864)	1:A:104:PHE:HB3	1:A:206:VAL:HG23	2	0.17
(1,1852)	1:A:101:GLN:HB3	1:A:107:LYS:HG3	18	0.17
(1,1820)	1:A:100:LEU:HB3	1:A:210:PHE:HD1	5	0.17
(1,1820)	1:A:100:LEU:HB3	1:A:210:PHE:HD2	5	0.17
(1,1765)	1:A:93:ALA:HA	1:A:95:ARG:HB3	4	0.17
(1,1740)	1:A:88:ASP:H	1:A:88:ASP:HB3	18	0.17
(1,1674)	1:A:80:LYS:H	1:A:80:LYS:HG3	13	0.17
(1,1647)	1:A:76:GLU:HA	1:A:76:GLU:HG3	14	0.17
(1,1647)	1:A:76:GLU:HA	1:A:76:GLU:HG3	17	0.17
(1,1647)	1:A:76:GLU:HA	1:A:76:GLU:HG3	19	0.17
(1,1645)	1:A:76:GLU:H	1:A:76:GLU:HG3	10	0.17
(1,161)	1:A:158:MET:H	1:A:158:MET:HG3	12	0.17
(1,1526)	1:A:192:ILE:HA	1:A:193:ASN:HB3	7	0.17
(1,1498)	1:A:223:LYS:HA	1:A:226:ARG:HG3	11	0.17
(1,145)	1:A:207:GLU:HB3	1:A:208:ARG:H	11	0.17
(1,1431)	1:A:197:GLU:HB3	1:A:198:GLU:HA	1	0.17
(1,1431)	1:A:197:GLU:HB3	1:A:198:GLU:HA	6	0.17
(1,1362)	1:A:208:ARG:HG3	1:A:208:ARG:HD3	3	0.17
(1,1362)	1:A:208:ARG:HG3	1:A:208:ARG:HD3	4	0.17
(1,1362)	1:A:208:ARG:HG3	1:A:208:ARG:HD3	5	0.17
(1,1362)	1:A:208:ARG:HG3	1:A:208:ARG:HD3	8	0.17
(1,1362)	1:A:208:ARG:HG3	1:A:208:ARG:HD3	10	0.17
(1,1362)	1:A:208:ARG:HG3	1:A:208:ARG:HD3	13	0.17
(1,1362)	1:A:208:ARG:HG3	1:A:208:ARG:HD3	14	0.17
(1,1362)	1:A:208:ARG:HG3	1:A:208:ARG:HD3	17	0.17
(1,1362)	1:A:208:ARG:HG3	1:A:208:ARG:HD3	18	0.17
(1,1360)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HG13	2	0.17
(1,1336)	1:A:223:LYS:HD3	1:A:223:LYS:HE3	10	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1332)	1:A:101:GLN:HE21	1:A:107:LYS:HE3	3	0.17
(1,1332)	1:A:101:GLN:HE22	1:A:107:LYS:HE3	3	0.17
(1,1302)	1:A:87:GLU:HA	1:A:87:GLU:HG3	9	0.17
(1,1301)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:87:GLU:HG3	5	0.17
(1,1301)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:87:GLU:HG3	16	0.17
(1,1301)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:87:GLU:HG3	20	0.17
(1,1220)	1:A:216:LYS:HD3	1:A:217:THR:H	2	0.17
(1,107)	1:A:198:GLU:HA	1:A:199:SER:H	18	0.17
(1,104)	1:A:196:GLU:HB3	1:A:199:SER:H	3	0.17
(1,103)	1:A:197:GLU:HB3	1:A:199:SER:H	14	0.17
(1,1017)	1:A:122:LEU:HA	1:A:122:LEU:HD11	14	0.17
(1,1017)	1:A:122:LEU:HA	1:A:122:LEU:HD12	14	0.17
(1,1017)	1:A:122:LEU:HA	1:A:122:LEU:HD13	14	0.17
(1,863)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG11	14	0.16
(1,863)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG12	14	0.16
(1,863)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG13	14	0.16
(1,821)	1:A:173:MET:H	1:A:173:MET:HE1	10	0.16
(1,821)	1:A:173:MET:H	1:A:173:MET:HE2	10	0.16
(1,821)	1:A:173:MET:H	1:A:173:MET:HE3	10	0.16
(1,789)	1:A:186:PRO:HB3	1:A:188:ALA:HB1	5	0.16
(1,789)	1:A:186:PRO:HB3	1:A:188:ALA:HB2	5	0.16
(1,789)	1:A:186:PRO:HB3	1:A:188:ALA:HB3	5	0.16
(1,789)	1:A:186:PRO:HB3	1:A:188:ALA:HB1	6	0.16
(1,789)	1:A:186:PRO:HB3	1:A:188:ALA:HB2	6	0.16
(1,789)	1:A:186:PRO:HB3	1:A:188:ALA:HB3	6	0.16
(1,653)	1:A:228:MET:H	1:A:228:MET:HE1	1	0.16
(1,653)	1:A:228:MET:H	1:A:228:MET:HE2	1	0.16
(1,653)	1:A:228:MET:H	1:A:228:MET:HE3	1	0.16
(1,480)	1:A:182:ARG:H	1:A:182:ARG:HD3	4	0.16
(1,448)	1:A:214:VAL:H	1:A:214:VAL:HG11	19	0.16
(1,448)	1:A:214:VAL:H	1:A:214:VAL:HG12	19	0.16
(1,448)	1:A:214:VAL:H	1:A:214:VAL:HG13	19	0.16
(1,438)	1:A:180:LEU:H	1:A:181:PRO:HG3	5	0.16
(1,262)	1:A:183:GLU:HB3	1:A:185:THR:H	11	0.16
(1,257)	1:A:205:GLN:HB3	1:A:206:VAL:H	1	0.16
(1,2417)	1:A:233:PHE:HB3	1:A:234:ILE:H	19	0.16
(1,2413)	1:A:232:GLN:H	1:A:232:GLN:HG3	1	0.16
(1,2413)	1:A:232:GLN:H	1:A:232:GLN:HG3	7	0.16
(1,2397)	1:A:226:ARG:HB3	1:A:226:ARG:HD3	2	0.16
(1,2390)	1:A:224:GLU:H	1:A:224:GLU:HG3	3	0.16
(1,2389)	1:A:223:LYS:HE3	1:A:224:GLU:HB3	19	0.16
(1,2383)	1:A:223:LYS:HB3	1:A:223:LYS:HD3	15	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2380)	1:A:223:LYS:HA	1:A:223:LYS:HG3	15	0.16
(1,2377)	1:A:222:TRP:HE1	1:A:226:ARG:HD3	18	0.16
(1,2370)	1:A:220:THR:HA	1:A:223:LYS:HB3	2	0.16
(1,2370)	1:A:220:THR:HA	1:A:223:LYS:HB3	7	0.16
(1,2370)	1:A:220:THR:HA	1:A:223:LYS:HB3	17	0.16
(1,2363)	1:A:219:GLN:HG3	1:A:223:LYS:HG3	12	0.16
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG11	6	0.16
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG12	6	0.16
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG13	6	0.16
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG21	6	0.16
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG22	6	0.16
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG23	6	0.16
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG11	8	0.16
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG12	8	0.16
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG13	8	0.16
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG21	8	0.16
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG22	8	0.16
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG23	8	0.16
(1,2320)	1:A:208:ARG:HA	1:A:208:ARG:HG3	10	0.16
(1,2320)	1:A:208:ARG:HA	1:A:208:ARG:HG3	14	0.16
(1,2289)	1:A:198:GLU:HA	1:A:198:GLU:HG3	11	0.16
(1,2248)	1:A:194:ALA:HB1	1:A:196:GLU:HG3	19	0.16
(1,2248)	1:A:194:ALA:HB2	1:A:196:GLU:HG3	19	0.16
(1,2248)	1:A:194:ALA:HB3	1:A:196:GLU:HG3	19	0.16
(1,2240)	1:A:190:GLN:HG3	1:A:191:THR:HG21	20	0.16
(1,2240)	1:A:190:GLN:HG3	1:A:191:THR:HG22	20	0.16
(1,2240)	1:A:190:GLN:HG3	1:A:191:THR:HG23	20	0.16
(1,2232)	1:A:189:LEU:HB3	1:A:190:GLN:H	1	0.16
(1,2210)	1:A:184:ARG:HB3	1:A:185:THR:H	1	0.16
(1,2172)	1:A:177:ASN:HB3	1:A:178:ASN:H	14	0.16
(1,2110)	1:A:169:SER:H	1:A:169:SER:HB3	10	0.16
(1,211)	1:A:210:PHE:H	1:A:210:PHE:HB3	4	0.16
(1,211)	1:A:210:PHE:H	1:A:210:PHE:HB3	9	0.16
(1,211)	1:A:210:PHE:H	1:A:210:PHE:HB3	18	0.16
(1,2083)	1:A:163:ARG:H	1:A:163:ARG:HG3	4	0.16
(1,2081)	1:A:162:ASN:HB3	1:A:164:GLN:HE21	7	0.16
(1,2081)	1:A:162:ASN:HB3	1:A:164:GLN:HE22	7	0.16
(1,2036)	1:A:152:GLN:HG3	1:A:152:GLN:HE21	10	0.16
(1,2036)	1:A:152:GLN:HG3	1:A:152:GLN:HE22	10	0.16
(1,2035)	1:A:152:GLN:H	1:A:152:GLN:HG3	1	0.16
(1,2020)	1:A:145:ARG:HB3	1:A:145:ARG:HD3	10	0.16
(1,1992)	1:A:141:GLU:H	1:A:144:LEU:HB3	6	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1989)	1:A:140:THR:HG21	1:A:143:PHE:HB3	7	0.16
(1,1989)	1:A:140:THR:HG22	1:A:143:PHE:HB3	7	0.16
(1,1989)	1:A:140:THR:HG23	1:A:143:PHE:HB3	7	0.16
(1,1989)	1:A:140:THR:HG21	1:A:143:PHE:HB3	11	0.16
(1,1989)	1:A:140:THR:HG22	1:A:143:PHE:HB3	11	0.16
(1,1989)	1:A:140:THR:HG23	1:A:143:PHE:HB3	11	0.16
(1,1989)	1:A:140:THR:HG21	1:A:143:PHE:HB3	12	0.16
(1,1989)	1:A:140:THR:HG22	1:A:143:PHE:HB3	12	0.16
(1,1989)	1:A:140:THR:HG23	1:A:143:PHE:HB3	12	0.16
(1,1989)	1:A:140:THR:HG21	1:A:143:PHE:HB3	13	0.16
(1,1989)	1:A:140:THR:HG22	1:A:143:PHE:HB3	13	0.16
(1,1989)	1:A:140:THR:HG23	1:A:143:PHE:HB3	13	0.16
(1,1989)	1:A:140:THR:HG21	1:A:143:PHE:HB3	16	0.16
(1,1989)	1:A:140:THR:HG22	1:A:143:PHE:HB3	16	0.16
(1,1989)	1:A:140:THR:HG23	1:A:143:PHE:HB3	16	0.16
(1,1989)	1:A:140:THR:HG21	1:A:143:PHE:HB3	19	0.16
(1,1989)	1:A:140:THR:HG22	1:A:143:PHE:HB3	19	0.16
(1,1989)	1:A:140:THR:HG23	1:A:143:PHE:HB3	19	0.16
(1,1968)	1:A:139:LEU:HB3	1:A:189:LEU:HD11	2	0.16
(1,1968)	1:A:139:LEU:HB3	1:A:189:LEU:HD12	2	0.16
(1,1968)	1:A:139:LEU:HB3	1:A:189:LEU:HD13	2	0.16
(1,1968)	1:A:139:LEU:HB3	1:A:189:LEU:HD21	2	0.16
(1,1968)	1:A:139:LEU:HB3	1:A:189:LEU:HD22	2	0.16
(1,1968)	1:A:139:LEU:HB3	1:A:189:LEU:HD23	2	0.16
(1,1968)	1:A:139:LEU:HB3	1:A:189:LEU:HD11	10	0.16
(1,1968)	1:A:139:LEU:HB3	1:A:189:LEU:HD12	10	0.16
(1,1968)	1:A:139:LEU:HB3	1:A:189:LEU:HD13	10	0.16
(1,1968)	1:A:139:LEU:HB3	1:A:189:LEU:HD21	10	0.16
(1,1968)	1:A:139:LEU:HB3	1:A:189:LEU:HD22	10	0.16
(1,1968)	1:A:139:LEU:HB3	1:A:189:LEU:HD23	10	0.16
(1,1934)	1:A:132:SER:HB3	1:A:134:TRP:H	7	0.16
(1,1885)	1:A:114:GLU:HG3	1:A:115:MET:H	7	0.16
(1,1852)	1:A:101:GLN:HB3	1:A:107:LYS:HG3	1	0.16
(1,1820)	1:A:100:LEU:HB3	1:A:210:PHE:HD1	6	0.16
(1,1820)	1:A:100:LEU:HB3	1:A:210:PHE:HD2	6	0.16
(1,1820)	1:A:100:LEU:HB3	1:A:210:PHE:HD1	15	0.16
(1,1820)	1:A:100:LEU:HB3	1:A:210:PHE:HD2	15	0.16
(1,1820)	1:A:100:LEU:HB3	1:A:210:PHE:HD1	16	0.16
(1,1820)	1:A:100:LEU:HB3	1:A:210:PHE:HD2	16	0.16
(1,1774)	1:A:94:LEU:HD11	1:A:97:GLN:HB3	6	0.16
(1,1774)	1:A:94:LEU:HD12	1:A:97:GLN:HB3	6	0.16
(1,1774)	1:A:94:LEU:HD13	1:A:97:GLN:HB3	6	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1774)	1:A:94:LEU:HD21	1:A:97:GLN:HB3	6	0.16
(1,1774)	1:A:94:LEU:HD22	1:A:97:GLN:HB3	6	0.16
(1,1774)	1:A:94:LEU:HD23	1:A:97:GLN:HB3	6	0.16
(1,1647)	1:A:76:GLU:HA	1:A:76:GLU:HG3	7	0.16
(1,1643)	1:A:75:GLU:HB3	1:A:76:GLU:H	20	0.16
(1,1535)	1:A:77:VAL:HA	1:A:78:PHE:HB3	17	0.16
(1,1521)	1:A:182:ARG:HA	1:A:182:ARG:HD3	14	0.16
(1,1366)	1:A:70:GLY:HA2	1:A:71:PRO:HG3	6	0.16
(1,1366)	1:A:70:GLY:HA3	1:A:71:PRO:HG3	6	0.16
(1,1366)	1:A:70:GLY:HA2	1:A:71:PRO:HG3	17	0.16
(1,1366)	1:A:70:GLY:HA3	1:A:71:PRO:HG3	17	0.16
(1,1362)	1:A:208:ARG:HG3	1:A:208:ARG:HD3	6	0.16
(1,1362)	1:A:208:ARG:HG3	1:A:208:ARG:HD3	11	0.16
(1,1362)	1:A:208:ARG:HG3	1:A:208:ARG:HD3	16	0.16
(1,1362)	1:A:208:ARG:HG3	1:A:208:ARG:HD3	20	0.16
(1,1350)	1:A:200:ARG:HB3	1:A:200:ARG:HD3	4	0.16
(1,1337)	1:A:216:LYS:HD3	1:A:216:LYS:HE3	12	0.16
(1,1336)	1:A:223:LYS:HD3	1:A:223:LYS:HE3	16	0.16
(1,1330)	1:A:102:ASP:HA	1:A:107:LYS:HE3	3	0.16
(1,1301)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:87:GLU:HG3	1	0.16
(1,1301)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:87:GLU:HG3	2	0.16
(1,1301)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:87:GLU:HG3	4	0.16
(1,1301)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:87:GLU:HG3	7	0.16
(1,1301)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:87:GLU:HG3	17	0.16
(1,1301)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:87:GLU:HG3	18	0.16
(1,1289)	1:A:207:GLU:H	1:A:207:GLU:HG3	12	0.16
(1,1219)	1:A:215:TYR:HD1	1:A:216:LYS:HD3	15	0.16
(1,1219)	1:A:215:TYR:HD2	1:A:216:LYS:HD3	15	0.16
(1,1217)	1:A:216:LYS:HA	1:A:216:LYS:HD3	16	0.16
(1,1209)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:221:ILE:HD11	13	0.16
(1,1209)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:221:ILE:HD12	13	0.16
(1,1209)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:221:ILE:HD13	13	0.16
(1,103)	1:A:197:GLU:HB3	1:A:199:SER:H	20	0.16
(1,1017)	1:A:122:LEU:HA	1:A:122:LEU:HD11	4	0.16
(1,1017)	1:A:122:LEU:HA	1:A:122:LEU:HD12	4	0.16
(1,1017)	1:A:122:LEU:HA	1:A:122:LEU:HD13	4	0.16
(1,898)	1:A:135:THR:HG21	1:A:136:ILE:H	16	0.15
(1,898)	1:A:135:THR:HG22	1:A:136:ILE:H	16	0.15
(1,898)	1:A:135:THR:HG23	1:A:136:ILE:H	16	0.15
(1,828)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:HB1	7	0.15
(1,828)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:HB2	7	0.15
(1,828)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:HB3	7	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,821)	1:A:173:MET:H	1:A:173:MET:HE1	5	0.15
(1,821)	1:A:173:MET:H	1:A:173:MET:HE2	5	0.15
(1,821)	1:A:173:MET:H	1:A:173:MET:HE3	5	0.15
(1,509)	1:A:148:TRP:HE1	1:A:186:PRO:HB3	4	0.15
(1,509)	1:A:148:TRP:HE1	1:A:186:PRO:HB3	10	0.15
(1,480)	1:A:182:ARG:H	1:A:182:ARG:HD3	3	0.15
(1,438)	1:A:180:LEU:H	1:A:181:PRO:HG3	2	0.15
(1,387)	1:A:80:LYS:HD3	1:A:107:LYS:H	6	0.15
(1,387)	1:A:80:LYS:HD3	1:A:107:LYS:H	14	0.15
(1,2417)	1:A:233:PHE:HB3	1:A:234:ILE:H	7	0.15
(1,2417)	1:A:233:PHE:HB3	1:A:234:ILE:H	10	0.15
(1,2413)	1:A:232:GLN:H	1:A:232:GLN:HG3	6	0.15
(1,2404)	1:A:228:MET:HG3	1:A:229:VAL:H	3	0.15
(1,2403)	1:A:228:MET:HA	1:A:228:MET:HG3	4	0.15
(1,2397)	1:A:226:ARG:HB3	1:A:226:ARG:HD3	6	0.15
(1,2397)	1:A:226:ARG:HB3	1:A:226:ARG:HD3	15	0.15
(1,2397)	1:A:226:ARG:HB3	1:A:226:ARG:HD3	16	0.15
(1,2384)	1:A:223:LYS:HB3	1:A:224:GLU:HG3	18	0.15
(1,2377)	1:A:222:TRP:HE1	1:A:226:ARG:HD3	14	0.15
(1,2377)	1:A:222:TRP:HE1	1:A:226:ARG:HD3	16	0.15
(1,2370)	1:A:220:THR:HA	1:A:223:LYS:HB3	5	0.15
(1,2370)	1:A:220:THR:HA	1:A:223:LYS:HB3	19	0.15
(1,2369)	1:A:219:GLN:HE21	1:A:223:LYS:HE3	3	0.15
(1,2369)	1:A:219:GLN:HE22	1:A:223:LYS:HE3	3	0.15
(1,2368)	1:A:219:GLN:HE21	1:A:223:LYS:HD3	11	0.15
(1,2368)	1:A:219:GLN:HE22	1:A:223:LYS:HD3	11	0.15
(1,2363)	1:A:219:GLN:HG3	1:A:223:LYS:HG3	10	0.15
(1,2350)	1:A:216:LYS:HB3	1:A:217:THR:H	8	0.15
(1,2350)	1:A:216:LYS:HB3	1:A:217:THR:H	17	0.15
(1,2331)	1:A:212:GLU:HG3	1:A:216:LYS:HE3	11	0.15
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG11	20	0.15
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG12	20	0.15
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG13	20	0.15
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG21	20	0.15
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG22	20	0.15
(1,2323)	1:A:211:GLN:HG3	1:A:214:VAL:HG23	20	0.15
(1,2320)	1:A:208:ARG:HA	1:A:208:ARG:HG3	19	0.15
(1,2284)	1:A:197:GLU:HA	1:A:202:PHE:HB3	20	0.15
(1,2244)	1:A:192:ILE:HG13	1:A:193:ASN:H	3	0.15
(1,2210)	1:A:184:ARG:HB3	1:A:185:THR:H	14	0.15
(1,2210)	1:A:184:ARG:HB3	1:A:185:THR:H	16	0.15
(1,2205)	1:A:184:ARG:H	1:A:184:ARG:HB3	4	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2204)	1:A:183:GLU:HG3	1:A:184:ARG:HG3	16	0.15
(1,2200)	1:A:183:GLU:H	1:A:183:GLU:HG3	8	0.15
(1,2200)	1:A:183:GLU:H	1:A:183:GLU:HG3	19	0.15
(1,2151)	1:A:176:LEU:HA	1:A:198:GLU:HB3	5	0.15
(1,2105)	1:A:167:TYR:H	1:A:221:ILE:HG13	14	0.15
(1,2087)	1:A:164:GLN:H	1:A:164:GLN:HB3	5	0.15
(1,2059)	1:A:159:ASN:HB3	1:A:160:SER:H	18	0.15
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD11	1:A:158:MET:HG3	20	0.15
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD12	1:A:158:MET:HG3	20	0.15
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD13	1:A:158:MET:HG3	20	0.15
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD21	1:A:158:MET:HG3	20	0.15
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD22	1:A:158:MET:HG3	20	0.15
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD23	1:A:158:MET:HG3	20	0.15
(1,2037)	1:A:152:GLN:HG3	1:A:153:PHE:H	1	0.15
(1,2020)	1:A:145:ARG:HB3	1:A:145:ARG:HD3	3	0.15
(1,2020)	1:A:145:ARG:HB3	1:A:145:ARG:HD3	6	0.15
(1,1999)	1:A:141:GLU:HG3	1:A:142:ASN:H	8	0.15
(1,1914)	1:A:125:LEU:HD11	1:A:157:LEU:HB3	15	0.15
(1,1914)	1:A:125:LEU:HD12	1:A:157:LEU:HB3	15	0.15
(1,1914)	1:A:125:LEU:HD13	1:A:157:LEU:HB3	15	0.15
(1,1914)	1:A:125:LEU:HD21	1:A:157:LEU:HB3	15	0.15
(1,1914)	1:A:125:LEU:HD22	1:A:157:LEU:HB3	15	0.15
(1,1914)	1:A:125:LEU:HD23	1:A:157:LEU:HB3	15	0.15
(1,1899)	1:A:123:GLN:HB3	1:A:123:GLN:HE21	15	0.15
(1,1899)	1:A:123:GLN:HB3	1:A:123:GLN:HE22	15	0.15
(1,1882)	1:A:112:PHE:HA	1:A:115:MET:HG3	7	0.15
(1,1855)	1:A:101:GLN:HG3	1:A:102:ASP:H	2	0.15
(1,1800)	1:A:97:GLN:HB3	1:A:98:ASN:H	8	0.15
(1,1800)	1:A:97:GLN:HB3	1:A:98:ASN:H	10	0.15
(1,1800)	1:A:97:GLN:HB3	1:A:98:ASN:H	17	0.15
(1,1782)	1:A:94:LEU:HD11	1:A:114:GLU:HG3	17	0.15
(1,1782)	1:A:94:LEU:HD12	1:A:114:GLU:HG3	17	0.15
(1,1782)	1:A:94:LEU:HD13	1:A:114:GLU:HG3	17	0.15
(1,1782)	1:A:94:LEU:HD21	1:A:114:GLU:HG3	17	0.15
(1,1782)	1:A:94:LEU:HD22	1:A:114:GLU:HG3	17	0.15
(1,1782)	1:A:94:LEU:HD23	1:A:114:GLU:HG3	17	0.15
(1,1782)	1:A:94:LEU:HD11	1:A:114:GLU:HG3	18	0.15
(1,1782)	1:A:94:LEU:HD12	1:A:114:GLU:HG3	18	0.15
(1,1782)	1:A:94:LEU:HD13	1:A:114:GLU:HG3	18	0.15
(1,1782)	1:A:94:LEU:HD21	1:A:114:GLU:HG3	18	0.15
(1,1782)	1:A:94:LEU:HD22	1:A:114:GLU:HG3	18	0.15
(1,1782)	1:A:94:LEU:HD23	1:A:114:GLU:HG3	18	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1774)	1:A:94:LEU:HD11	1:A:97:GLN:HB3	11	0.15
(1,1774)	1:A:94:LEU:HD12	1:A:97:GLN:HB3	11	0.15
(1,1774)	1:A:94:LEU:HD13	1:A:97:GLN:HB3	11	0.15
(1,1774)	1:A:94:LEU:HD21	1:A:97:GLN:HB3	11	0.15
(1,1774)	1:A:94:LEU:HD22	1:A:97:GLN:HB3	11	0.15
(1,1774)	1:A:94:LEU:HD23	1:A:97:GLN:HB3	11	0.15
(1,1734)	1:A:85:HIS:HB3	1:A:111:ILE:HD11	19	0.15
(1,1734)	1:A:85:HIS:HB3	1:A:111:ILE:HD12	19	0.15
(1,1734)	1:A:85:HIS:HB3	1:A:111:ILE:HD13	19	0.15
(1,1734)	1:A:85:HIS:HB3	1:A:111:ILE:HD11	20	0.15
(1,1734)	1:A:85:HIS:HB3	1:A:111:ILE:HD12	20	0.15
(1,1734)	1:A:85:HIS:HB3	1:A:111:ILE:HD13	20	0.15
(1,1674)	1:A:80:LYS:H	1:A:80:LYS:HG3	5	0.15
(1,1647)	1:A:76:GLU:HA	1:A:76:GLU:HG3	5	0.15
(1,1647)	1:A:76:GLU:HA	1:A:76:GLU:HG3	8	0.15
(1,1647)	1:A:76:GLU:HA	1:A:76:GLU:HG3	13	0.15
(1,1646)	1:A:76:GLU:HA	1:A:76:GLU:HB3	20	0.15
(1,1643)	1:A:75:GLU:HB3	1:A:76:GLU:H	8	0.15
(1,1641)	1:A:74:SER:HA	1:A:74:SER:HB3	19	0.15
(1,1603)	1:A:146:ASP:HB3	1:A:147:THR:HB	11	0.15
(1,1603)	1:A:146:ASP:HB3	1:A:147:THR:HB	19	0.15
(1,1572)	1:A:221:ILE:HA	1:A:224:GLU:HB3	4	0.15
(1,1535)	1:A:77:VAL:HA	1:A:78:PHE:HB3	7	0.15
(1,1499)	1:A:223:LYS:HA	1:A:223:LYS:HD3	18	0.15
(1,1431)	1:A:197:GLU:HB3	1:A:198:GLU:HA	3	0.15
(1,1362)	1:A:208:ARG:HG3	1:A:208:ARG:HD3	19	0.15
(1,1360)	1:A:208:ARG:HD3	1:A:209:ILE:HG13	7	0.15
(1,1351)	1:A:200:ARG:HA	1:A:200:ARG:HD3	16	0.15
(1,1341)	1:A:213:SER:HA	1:A:216:LYS:HE3	2	0.15
(1,1340)	1:A:216:LYS:HA	1:A:216:LYS:HE3	11	0.15
(1,1340)	1:A:216:LYS:HA	1:A:216:LYS:HE3	17	0.15
(1,1337)	1:A:216:LYS:HD3	1:A:216:LYS:HE3	8	0.15
(1,1331)	1:A:105:GLY:H	1:A:107:LYS:HE3	20	0.15
(1,1322)	1:A:166:LYS:HG3	1:A:166:LYS:HE3	19	0.15
(1,1321)	1:A:166:LYS:HE3	1:A:221:ILE:HG21	6	0.15
(1,1321)	1:A:166:LYS:HE3	1:A:221:ILE:HG22	6	0.15
(1,1321)	1:A:166:LYS:HE3	1:A:221:ILE:HG23	6	0.15
(1,1316)	1:A:209:ILE:HB	1:A:210:PHE:HB3	12	0.15
(1,1301)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:87:GLU:HG3	3	0.15
(1,1301)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:87:GLU:HG3	19	0.15
(1,1285)	1:A:75:GLU:H	1:A:75:GLU:HG3	17	0.15
(1,1284)	1:A:75:GLU:HB3	1:A:75:GLU:HG3	10	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1245)	1:A:80:LYS:HB3	1:A:106:ILE:HG21	8	0.15
(1,1245)	1:A:80:LYS:HB3	1:A:106:ILE:HG22	8	0.15
(1,1245)	1:A:80:LYS:HB3	1:A:106:ILE:HG23	8	0.15
(1,1230)	1:A:200:ARG:HB3	1:A:200:ARG:HG3	13	0.15
(1,1224)	1:A:223:LYS:HD3	1:A:224:GLU:HB3	15	0.15
(1,1220)	1:A:216:LYS:HD3	1:A:217:THR:H	4	0.15
(1,1217)	1:A:216:LYS:HA	1:A:216:LYS:HD3	5	0.15
(1,1135)	1:A:216:LYS:HG3	1:A:216:LYS:HD3	1	0.15
(1,1135)	1:A:216:LYS:HG3	1:A:216:LYS:HD3	8	0.15
(1,1135)	1:A:216:LYS:HG3	1:A:216:LYS:HD3	20	0.15
(1,821)	1:A:173:MET:H	1:A:173:MET:HE1	9	0.14
(1,821)	1:A:173:MET:H	1:A:173:MET:HE2	9	0.14
(1,821)	1:A:173:MET:H	1:A:173:MET:HE3	9	0.14
(1,750)	1:A:80:LYS:HB3	1:A:133:ALA:HB1	17	0.14
(1,750)	1:A:80:LYS:HB3	1:A:133:ALA:HB2	17	0.14
(1,750)	1:A:80:LYS:HB3	1:A:133:ALA:HB3	17	0.14
(1,686)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:106:ILE:HG21	3	0.14
(1,686)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:106:ILE:HG22	3	0.14
(1,686)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:106:ILE:HG23	3	0.14
(1,642)	1:A:209:ILE:HG21	1:A:210:PHE:HB3	17	0.14
(1,642)	1:A:209:ILE:HG22	1:A:210:PHE:HB3	17	0.14
(1,642)	1:A:209:ILE:HG23	1:A:210:PHE:HB3	17	0.14
(1,471)	1:A:196:GLU:H	1:A:196:GLU:HB3	10	0.14
(1,448)	1:A:214:VAL:H	1:A:214:VAL:HG11	18	0.14
(1,448)	1:A:214:VAL:H	1:A:214:VAL:HG12	18	0.14
(1,448)	1:A:214:VAL:H	1:A:214:VAL:HG13	18	0.14
(1,257)	1:A:205:GLN:HB3	1:A:206:VAL:H	5	0.14
(1,2417)	1:A:233:PHE:HB3	1:A:234:ILE:H	8	0.14
(1,2413)	1:A:232:GLN:H	1:A:232:GLN:HG3	11	0.14
(1,2404)	1:A:228:MET:HG3	1:A:229:VAL:H	2	0.14
(1,2404)	1:A:228:MET:HG3	1:A:229:VAL:H	13	0.14
(1,2397)	1:A:226:ARG:HB3	1:A:226:ARG:HD3	7	0.14
(1,2394)	1:A:224:GLU:HG3	1:A:225:THR:H	19	0.14
(1,2390)	1:A:224:GLU:H	1:A:224:GLU:HG3	8	0.14
(1,2383)	1:A:223:LYS:HB3	1:A:223:LYS:HD3	8	0.14
(1,2383)	1:A:223:LYS:HB3	1:A:223:LYS:HD3	13	0.14
(1,2377)	1:A:222:TRP:HE1	1:A:226:ARG:HD3	8	0.14
(1,2329)	1:A:212:GLU:HG3	1:A:216:LYS:HG3	14	0.14
(1,2289)	1:A:198:GLU:HA	1:A:198:GLU:HG3	6	0.14
(1,2283)	1:A:197:GLU:HA	1:A:197:GLU:HG3	18	0.14
(1,2250)	1:A:195:LEU:H	1:A:196:GLU:HG3	4	0.14
(1,2250)	1:A:195:LEU:H	1:A:196:GLU:HG3	17	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2244)	1:A:192:ILE:HG13	1:A:193:ASN:H	7	0.14
(1,2232)	1:A:189:LEU:HB3	1:A:190:GLN:H	19	0.14
(1,2206)	1:A:184:ARG:H	1:A:184:ARG:HG3	10	0.14
(1,2199)	1:A:182:ARG:HA	1:A:182:ARG:HG3	17	0.14
(1,2188)	1:A:180:LEU:HD11	1:A:181:PRO:HG3	3	0.14
(1,2188)	1:A:180:LEU:HD12	1:A:181:PRO:HG3	3	0.14
(1,2188)	1:A:180:LEU:HD13	1:A:181:PRO:HG3	3	0.14
(1,2188)	1:A:180:LEU:HD21	1:A:181:PRO:HG3	3	0.14
(1,2188)	1:A:180:LEU:HD22	1:A:181:PRO:HG3	3	0.14
(1,2188)	1:A:180:LEU:HD23	1:A:181:PRO:HG3	3	0.14
(1,2188)	1:A:180:LEU:HD11	1:A:181:PRO:HG3	8	0.14
(1,2188)	1:A:180:LEU:HD12	1:A:181:PRO:HG3	8	0.14
(1,2188)	1:A:180:LEU:HD13	1:A:181:PRO:HG3	8	0.14
(1,2188)	1:A:180:LEU:HD21	1:A:181:PRO:HG3	8	0.14
(1,2188)	1:A:180:LEU:HD22	1:A:181:PRO:HG3	8	0.14
(1,2188)	1:A:180:LEU:HD23	1:A:181:PRO:HG3	8	0.14
(1,2151)	1:A:176:LEU:HA	1:A:198:GLU:HB3	6	0.14
(1,2151)	1:A:176:LEU:HA	1:A:198:GLU:HB3	11	0.14
(1,2126)	1:A:171:ILE:HD11	1:A:172:PRO:HG3	18	0.14
(1,2126)	1:A:171:ILE:HD12	1:A:172:PRO:HG3	18	0.14
(1,2126)	1:A:171:ILE:HD13	1:A:172:PRO:HG3	18	0.14
(1,2123)	1:A:171:ILE:HG21	1:A:172:PRO:HD3	16	0.14
(1,2123)	1:A:171:ILE:HG22	1:A:172:PRO:HD3	16	0.14
(1,2123)	1:A:171:ILE:HG23	1:A:172:PRO:HD3	16	0.14
(1,2114)	1:A:169:SER:HB3	1:A:171:ILE:HD11	15	0.14
(1,2114)	1:A:169:SER:HB3	1:A:171:ILE:HD12	15	0.14
(1,2114)	1:A:169:SER:HB3	1:A:171:ILE:HD13	15	0.14
(1,2110)	1:A:169:SER:H	1:A:169:SER:HB3	6	0.14
(1,2091)	1:A:164:GLN:HB3	1:A:164:GLN:HE21	3	0.14
(1,2091)	1:A:164:GLN:HB3	1:A:164:GLN:HE22	3	0.14
(1,2087)	1:A:164:GLN:H	1:A:164:GLN:HB3	7	0.14
(1,2087)	1:A:164:GLN:H	1:A:164:GLN:HB3	8	0.14
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD11	1:A:158:MET:HG3	6	0.14
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD12	1:A:158:MET:HG3	6	0.14
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD13	1:A:158:MET:HG3	6	0.14
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD21	1:A:158:MET:HG3	6	0.14
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD22	1:A:158:MET:HG3	6	0.14
(1,2048)	1:A:157:LEU:HD23	1:A:158:MET:HG3	6	0.14
(1,2020)	1:A:145:ARG:HB3	1:A:145:ARG:HD3	13	0.14
(1,1999)	1:A:141:GLU:HG3	1:A:142:ASN:H	13	0.14
(1,1989)	1:A:140:THR:HG21	1:A:143:PHE:HB3	1	0.14
(1,1989)	1:A:140:THR:HG22	1:A:143:PHE:HB3	1	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1989)	1:A:140:THR:HG23	1:A:143:PHE:HB3	1	0.14
(1,1933)	1:A:132:SER:HB3	1:A:133:ALA:H	5	0.14
(1,1914)	1:A:125:LEU:HD11	1:A:157:LEU:HB3	10	0.14
(1,1914)	1:A:125:LEU:HD12	1:A:157:LEU:HB3	10	0.14
(1,1914)	1:A:125:LEU:HD13	1:A:157:LEU:HB3	10	0.14
(1,1914)	1:A:125:LEU:HD21	1:A:157:LEU:HB3	10	0.14
(1,1914)	1:A:125:LEU:HD22	1:A:157:LEU:HB3	10	0.14
(1,1914)	1:A:125:LEU:HD23	1:A:157:LEU:HB3	10	0.14
(1,1895)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:122:LEU:HD11	3	0.14
(1,1895)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:122:LEU:HD12	3	0.14
(1,1895)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:122:LEU:HD13	3	0.14
(1,1895)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:122:LEU:HD21	3	0.14
(1,1895)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:122:LEU:HD22	3	0.14
(1,1895)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:122:LEU:HD23	3	0.14
(1,1895)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:122:LEU:HD11	15	0.14
(1,1895)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:122:LEU:HD12	15	0.14
(1,1895)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:122:LEU:HD13	15	0.14
(1,1895)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:122:LEU:HD21	15	0.14
(1,1895)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:122:LEU:HD22	15	0.14
(1,1895)	1:A:121:HIS:HB3	1:A:122:LEU:HD23	15	0.14
(1,1880)	1:A:110:ILE:HD11	1:A:116:PRO:HG3	7	0.14
(1,1880)	1:A:110:ILE:HD12	1:A:116:PRO:HG3	7	0.14
(1,1880)	1:A:110:ILE:HD13	1:A:116:PRO:HG3	7	0.14
(1,1870)	1:A:107:LYS:H	1:A:107:LYS:HB3	18	0.14
(1,1805)	1:A:98:ASN:HA	1:A:101:GLN:HG3	6	0.14
(1,1800)	1:A:97:GLN:HB3	1:A:98:ASN:H	2	0.14
(1,1800)	1:A:97:GLN:HB3	1:A:98:ASN:H	5	0.14
(1,1800)	1:A:97:GLN:HB3	1:A:98:ASN:H	19	0.14
(1,1782)	1:A:94:LEU:HD11	1:A:114:GLU:HG3	1	0.14
(1,1782)	1:A:94:LEU:HD12	1:A:114:GLU:HG3	1	0.14
(1,1782)	1:A:94:LEU:HD13	1:A:114:GLU:HG3	1	0.14
(1,1782)	1:A:94:LEU:HD21	1:A:114:GLU:HG3	1	0.14
(1,1782)	1:A:94:LEU:HD22	1:A:114:GLU:HG3	1	0.14
(1,1782)	1:A:94:LEU:HD23	1:A:114:GLU:HG3	1	0.14
(1,1782)	1:A:94:LEU:HD11	1:A:114:GLU:HG3	14	0.14
(1,1782)	1:A:94:LEU:HD12	1:A:114:GLU:HG3	14	0.14
(1,1782)	1:A:94:LEU:HD13	1:A:114:GLU:HG3	14	0.14
(1,1782)	1:A:94:LEU:HD21	1:A:114:GLU:HG3	14	0.14
(1,1782)	1:A:94:LEU:HD22	1:A:114:GLU:HG3	14	0.14
(1,1782)	1:A:94:LEU:HD23	1:A:114:GLU:HG3	14	0.14
(1,1765)	1:A:93:ALA:HA	1:A:95:ARG:HB3	1	0.14
(1,1674)	1:A:80:LYS:H	1:A:80:LYS:HG3	7	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1644)	1:A:76:GLU:H	1:A:76:GLU:HB3	10	0.14
(1,1643)	1:A:75:GLU:HB3	1:A:76:GLU:H	5	0.14
(1,1603)	1:A:146:ASP:HB3	1:A:147:THR:HB	20	0.14
(1,1566)	1:A:71:PRO:HG3	1:A:74:SER:HB3	5	0.14
(1,145)	1:A:207:GLU:HB3	1:A:208:ARG:H	3	0.14
(1,145)	1:A:207:GLU:HB3	1:A:208:ARG:H	5	0.14
(1,1343)	1:A:216:LYS:H	1:A:216:LYS:HE3	5	0.14
(1,1338)	1:A:216:LYS:HB3	1:A:216:LYS:HE3	12	0.14
(1,1333)	1:A:107:LYS:H	1:A:107:LYS:HE3	1	0.14
(1,1323)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:166:LYS:HE3	16	0.14
(1,1301)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:87:GLU:HG3	12	0.14
(1,1291)	1:A:224:GLU:HB3	1:A:224:GLU:HG3	3	0.14
(1,1220)	1:A:216:LYS:HD3	1:A:217:THR:H	15	0.14
(1,1218)	1:A:213:SER:HA	1:A:216:LYS:HD3	12	0.14
(1,1213)	1:A:165:HIS:HA	1:A:166:LYS:HD3	3	0.14
(1,1135)	1:A:216:LYS:HG3	1:A:216:LYS:HD3	7	0.14
(1,1135)	1:A:216:LYS:HG3	1:A:216:LYS:HD3	10	0.14
(1,103)	1:A:197:GLU:HB3	1:A:199:SER:H	7	0.14
(1,103)	1:A:197:GLU:HB3	1:A:199:SER:H	9	0.14
(1,1004)	1:A:206:VAL:HG11	1:A:210:PHE:HE1	12	0.14
(1,1004)	1:A:206:VAL:HG11	1:A:210:PHE:HE2	12	0.14
(1,1004)	1:A:206:VAL:HG12	1:A:210:PHE:HE1	12	0.14
(1,1004)	1:A:206:VAL:HG12	1:A:210:PHE:HE2	12	0.14
(1,1004)	1:A:206:VAL:HG13	1:A:210:PHE:HE1	12	0.14
(1,1004)	1:A:206:VAL:HG13	1:A:210:PHE:HE2	12	0.14
(1,100)	1:A:145:ARG:HB3	1:A:146:ASP:H	1	0.14
(1,863)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG11	7	0.13
(1,863)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG12	7	0.13
(1,863)	1:A:75:GLU:HG3	1:A:77:VAL:HG13	7	0.13
(1,821)	1:A:173:MET:H	1:A:173:MET:HE1	17	0.13
(1,821)	1:A:173:MET:H	1:A:173:MET:HE2	17	0.13
(1,821)	1:A:173:MET:H	1:A:173:MET:HE3	17	0.13
(1,642)	1:A:209:ILE:HG21	1:A:210:PHE:HB3	4	0.13
(1,642)	1:A:209:ILE:HG22	1:A:210:PHE:HB3	4	0.13
(1,642)	1:A:209:ILE:HG23	1:A:210:PHE:HB3	4	0.13
(1,642)	1:A:209:ILE:HG21	1:A:210:PHE:HB3	5	0.13
(1,642)	1:A:209:ILE:HG22	1:A:210:PHE:HB3	5	0.13
(1,642)	1:A:209:ILE:HG23	1:A:210:PHE:HB3	5	0.13
(1,642)	1:A:209:ILE:HG21	1:A:210:PHE:HB3	12	0.13
(1,642)	1:A:209:ILE:HG22	1:A:210:PHE:HB3	12	0.13
(1,642)	1:A:209:ILE:HG23	1:A:210:PHE:HB3	12	0.13
(1,642)	1:A:209:ILE:HG21	1:A:210:PHE:HB3	15	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,642)	1:A:209:ILE:HG22	1:A:210:PHE:HB3	15	0.13
(1,642)	1:A:209:ILE:HG23	1:A:210:PHE:HB3	15	0.13
(1,616)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:83:ILE:HD11	20	0.13
(1,616)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:83:ILE:HD12	20	0.13
(1,616)	1:A:81:PHE:HB3	1:A:83:ILE:HD13	20	0.13
(1,43)	1:A:182:ARG:HB3	1:A:190:GLN:HE22	10	0.13
(1,3)	1:A:80:LYS:HD3	1:A:81:PHE:H	17	0.13
(1,262)	1:A:183:GLU:HB3	1:A:185:THR:H	6	0.13
(1,257)	1:A:205:GLN:HB3	1:A:206:VAL:H	6	0.13
(1,2417)	1:A:233:PHE:HB3	1:A:234:ILE:H	11	0.13
(1,2413)	1:A:232:GLN:H	1:A:232:GLN:HG3	5	0.13
(1,2413)	1:A:232:GLN:H	1:A:232:GLN:HG3	12	0.13
(1,2404)	1:A:228:MET:HG3	1:A:229:VAL:H	8	0.13
(1,2403)	1:A:228:MET:HA	1:A:228:MET:HG3	15	0.13
(1,2400)	1:A:227:ASN:H	1:A:227:ASN:HB3	12	0.13
(1,2397)	1:A:226:ARG:HB3	1:A:226:ARG:HD3	10	0.13
(1,2393)	1:A:224:GLU:HB3	1:A:224:GLU:HG3	14	0.13
(1,2391)	1:A:224:GLU:HA	1:A:224:GLU:HG3	3	0.13
(1,2383)	1:A:223:LYS:HB3	1:A:223:LYS:HD3	4	0.13
(1,2379)	1:A:223:LYS:H	1:A:223:LYS:HE3	1	0.13
(1,2379)	1:A:223:LYS:H	1:A:223:LYS:HE3	9	0.13
(1,2377)	1:A:222:TRP:HE1	1:A:226:ARG:HD3	3	0.13
(1,2377)	1:A:222:TRP:HE1	1:A:226:ARG:HD3	17	0.13
(1,2377)	1:A:222:TRP:HE1	1:A:226:ARG:HD3	20	0.13
(1,2369)	1:A:219:GLN:HE21	1:A:223:LYS:HE3	10	0.13
(1,2369)	1:A:219:GLN:HE22	1:A:223:LYS:HE3	10	0.13
(1,2363)	1:A:219:GLN:HG3	1:A:223:LYS:HG3	8	0.13
(1,2363)	1:A:219:GLN:HG3	1:A:223:LYS:HG3	9	0.13
(1,2320)	1:A:208:ARG:HA	1:A:208:ARG:HG3	4	0.13
(1,2297)	1:A:200:ARG:HG3	1:A:201:GLY:H	16	0.13
(1,2252)	1:A:195:LEU:HA	1:A:196:GLU:HG3	17	0.13
(1,2232)	1:A:189:LEU:HB3	1:A:190:GLN:H	7	0.13
(1,2224)	1:A:187:PHE:HB3	1:A:188:ALA:HA	20	0.13
(1,2159)	1:A:176:LEU:HG	1:A:198:GLU:HG3	13	0.13
(1,2149)	1:A:176:LEU:H	1:A:197:GLU:HG3	4	0.13
(1,2149)	1:A:176:LEU:H	1:A:197:GLU:HG3	15	0.13
(1,2133)	1:A:172:PRO:HG3	1:A:192:ILE:HD11	7	0.13
(1,2133)	1:A:172:PRO:HG3	1:A:192:ILE:HD12	7	0.13
(1,2133)	1:A:172:PRO:HG3	1:A:192:ILE:HD13	7	0.13
(1,211)	1:A:210:PHE:H	1:A:210:PHE:HB3	7	0.13
(1,2100)	1:A:166:LYS:HB3	1:A:221:ILE:HG21	10	0.13
(1,2100)	1:A:166:LYS:HB3	1:A:221:ILE:HG22	10	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2100)	1:A:166:LYS:HB3	1:A:221:ILE:HG23	10	0.13
(1,2087)	1:A:164:GLN:H	1:A:164:GLN:HB3	19	0.13
(1,2081)	1:A:162:ASN:HB3	1:A:164:GLN:HE21	5	0.13
(1,2081)	1:A:162:ASN:HB3	1:A:164:GLN:HE22	5	0.13
(1,2041)	1:A:156:SER:H	1:A:157:LEU:HB3	16	0.13
(1,2020)	1:A:145:ARG:HB3	1:A:145:ARG:HD3	2	0.13
(1,2020)	1:A:145:ARG:HB3	1:A:145:ARG:HD3	12	0.13
(1,1999)	1:A:141:GLU:HG3	1:A:142:ASN:H	9	0.13
(1,1999)	1:A:141:GLU:HG3	1:A:142:ASN:H	10	0.13
(1,1934)	1:A:132:SER:HB3	1:A:134:TRP:H	15	0.13
(1,1914)	1:A:125:LEU:HD11	1:A:157:LEU:HB3	3	0.13
(1,1914)	1:A:125:LEU:HD12	1:A:157:LEU:HB3	3	0.13
(1,1914)	1:A:125:LEU:HD13	1:A:157:LEU:HB3	3	0.13
(1,1914)	1:A:125:LEU:HD21	1:A:157:LEU:HB3	3	0.13
(1,1914)	1:A:125:LEU:HD22	1:A:157:LEU:HB3	3	0.13
(1,1914)	1:A:125:LEU:HD23	1:A:157:LEU:HB3	3	0.13
(1,1899)	1:A:123:GLN:HB3	1:A:123:GLN:HE21	5	0.13
(1,1899)	1:A:123:GLN:HB3	1:A:123:GLN:HE22	5	0.13
(1,1883)	1:A:113:ALA:HB1	1:A:114:GLU:HG3	7	0.13
(1,1883)	1:A:113:ALA:HB2	1:A:114:GLU:HG3	7	0.13
(1,1883)	1:A:113:ALA:HB3	1:A:114:GLU:HG3	7	0.13
(1,1880)	1:A:110:ILE:HD11	1:A:116:PRO:HG3	3	0.13
(1,1880)	1:A:110:ILE:HD12	1:A:116:PRO:HG3	3	0.13
(1,1880)	1:A:110:ILE:HD13	1:A:116:PRO:HG3	3	0.13
(1,1878)	1:A:110:ILE:HG13	1:A:111:ILE:H	10	0.13
(1,1820)	1:A:100:LEU:HB3	1:A:210:PHE:HD1	8	0.13
(1,1820)	1:A:100:LEU:HB3	1:A:210:PHE:HD2	8	0.13
(1,1800)	1:A:97:GLN:HB3	1:A:98:ASN:H	14	0.13
(1,1782)	1:A:94:LEU:HD11	1:A:114:GLU:HG3	19	0.13
(1,1782)	1:A:94:LEU:HD12	1:A:114:GLU:HG3	19	0.13
(1,1782)	1:A:94:LEU:HD13	1:A:114:GLU:HG3	19	0.13
(1,1782)	1:A:94:LEU:HD21	1:A:114:GLU:HG3	19	0.13
(1,1782)	1:A:94:LEU:HD22	1:A:114:GLU:HG3	19	0.13
(1,1782)	1:A:94:LEU:HD23	1:A:114:GLU:HG3	19	0.13
(1,1765)	1:A:93:ALA:HA	1:A:95:ARG:HB3	11	0.13
(1,1721)	1:A:84:LEU:HD11	1:A:112:PHE:HB3	4	0.13
(1,1721)	1:A:84:LEU:HD12	1:A:112:PHE:HB3	4	0.13
(1,1721)	1:A:84:LEU:HD13	1:A:112:PHE:HB3	4	0.13
(1,1721)	1:A:84:LEU:HD21	1:A:112:PHE:HB3	4	0.13
(1,1721)	1:A:84:LEU:HD22	1:A:112:PHE:HB3	4	0.13
(1,1721)	1:A:84:LEU:HD23	1:A:112:PHE:HB3	4	0.13
(1,1681)	1:A:80:LYS:HG3	1:A:106:ILE:HG21	1	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1681)	1:A:80:LYS:HG3	1:A:106:ILE:HG22	1	0.13
(1,1681)	1:A:80:LYS:HG3	1:A:106:ILE:HG23	1	0.13
(1,1676)	1:A:80:LYS:HA	1:A:80:LYS:HG3	16	0.13
(1,1674)	1:A:80:LYS:H	1:A:80:LYS:HG3	14	0.13
(1,1647)	1:A:76:GLU:HA	1:A:76:GLU:HG3	6	0.13
(1,1643)	1:A:75:GLU:HB3	1:A:76:GLU:H	11	0.13
(1,1603)	1:A:146:ASP:HB3	1:A:147:THR:HB	2	0.13
(1,1521)	1:A:182:ARG:HA	1:A:182:ARG:HD3	9	0.13
(1,1518)	1:A:104:PHE:HD1	1:A:106:ILE:HA	17	0.13
(1,1518)	1:A:104:PHE:HD2	1:A:106:ILE:HA	17	0.13
(1,1505)	1:A:212:GLU:HA	1:A:215:TYR:HA	14	0.13
(1,150)	1:A:176:LEU:H	1:A:176:LEU:HG	8	0.13
(1,1431)	1:A:197:GLU:HB3	1:A:198:GLU:HA	13	0.13
(1,1355)	1:A:182:ARG:HD3	1:A:190:GLN:HE22	2	0.13
(1,1341)	1:A:213:SER:HA	1:A:216:LYS:HE3	1	0.13
(1,1341)	1:A:213:SER:HA	1:A:216:LYS:HE3	8	0.13
(1,1337)	1:A:216:LYS:HD3	1:A:216:LYS:HE3	1	0.13
(1,1337)	1:A:216:LYS:HD3	1:A:216:LYS:HE3	10	0.13
(1,1301)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:87:GLU:HG3	11	0.13
(1,1220)	1:A:216:LYS:HD3	1:A:217:THR:H	10	0.13
(1,1215)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:167:TYR:H	15	0.13
(1,913)	1:A:222:TRP:H	1:A:225:THR:HG21	11	0.12
(1,913)	1:A:222:TRP:H	1:A:225:THR:HG22	11	0.12
(1,913)	1:A:222:TRP:H	1:A:225:THR:HG23	11	0.12
(1,821)	1:A:173:MET:H	1:A:173:MET:HE1	4	0.12
(1,821)	1:A:173:MET:H	1:A:173:MET:HE2	4	0.12
(1,821)	1:A:173:MET:H	1:A:173:MET:HE3	4	0.12
(1,821)	1:A:173:MET:H	1:A:173:MET:HE1	16	0.12
(1,821)	1:A:173:MET:H	1:A:173:MET:HE2	16	0.12
(1,821)	1:A:173:MET:H	1:A:173:MET:HE3	16	0.12
(1,810)	1:A:173:MET:HE1	1:A:197:GLU:HB3	8	0.12
(1,810)	1:A:173:MET:HE2	1:A:197:GLU:HB3	8	0.12
(1,810)	1:A:173:MET:HE3	1:A:197:GLU:HB3	8	0.12
(1,532)	1:A:171:ILE:HD11	1:A:193:ASN:HB3	3	0.12
(1,532)	1:A:171:ILE:HD12	1:A:193:ASN:HB3	3	0.12
(1,532)	1:A:171:ILE:HD13	1:A:193:ASN:HB3	3	0.12
(1,509)	1:A:148:TRP:HE1	1:A:186:PRO:HB3	13	0.12
(1,471)	1:A:196:GLU:H	1:A:196:GLU:HB3	14	0.12
(1,444)	1:A:106:ILE:H	1:A:107:LYS:HE3	20	0.12
(1,401)	1:A:74:SER:HB3	1:A:75:GLU:H	7	0.12
(1,262)	1:A:183:GLU:HB3	1:A:185:THR:H	3	0.12
(1,2418)	1:A:234:ILE:H	1:A:234:ILE:HG13	18	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2417)	1:A:233:PHE:HB3	1:A:234:ILE:H	16	0.12
(1,2403)	1:A:228:MET:HA	1:A:228:MET:HG3	14	0.12
(1,2398)	1:A:226:ARG:HB3	1:A:227:ASN:HD21	10	0.12
(1,2398)	1:A:226:ARG:HB3	1:A:227:ASN:HD22	10	0.12
(1,2391)	1:A:224:GLU:HA	1:A:224:GLU:HG3	13	0.12
(1,2363)	1:A:219:GLN:HG3	1:A:223:LYS:HG3	20	0.12
(1,2307)	1:A:204:THR:HG21	1:A:208:ARG:HG3	1	0.12
(1,2307)	1:A:204:THR:HG22	1:A:208:ARG:HG3	1	0.12
(1,2307)	1:A:204:THR:HG23	1:A:208:ARG:HG3	1	0.12
(1,2292)	1:A:199:SER:H	1:A:199:SER:HB3	7	0.12
(1,2289)	1:A:198:GLU:HA	1:A:198:GLU:HG3	12	0.12
(1,2289)	1:A:198:GLU:HA	1:A:198:GLU:HG3	20	0.12
(1,2285)	1:A:197:GLU:HG3	1:A:198:GLU:H	9	0.12
(1,2252)	1:A:195:LEU:HA	1:A:196:GLU:HG3	4	0.12
(1,2232)	1:A:189:LEU:HB3	1:A:190:GLN:H	17	0.12
(1,2206)	1:A:184:ARG:H	1:A:184:ARG:HG3	5	0.12
(1,2199)	1:A:182:ARG:HA	1:A:182:ARG:HG3	14	0.12
(1,2199)	1:A:182:ARG:HA	1:A:182:ARG:HG3	18	0.12
(1,2193)	1:A:180:LEU:HD11	1:A:184:ARG:HD3	18	0.12
(1,2193)	1:A:180:LEU:HD12	1:A:184:ARG:HD3	18	0.12
(1,2193)	1:A:180:LEU:HD13	1:A:184:ARG:HD3	18	0.12
(1,2193)	1:A:180:LEU:HD21	1:A:184:ARG:HD3	18	0.12
(1,2193)	1:A:180:LEU:HD22	1:A:184:ARG:HD3	18	0.12
(1,2193)	1:A:180:LEU:HD23	1:A:184:ARG:HD3	18	0.12
(1,2188)	1:A:180:LEU:HD11	1:A:181:PRO:HG3	7	0.12
(1,2188)	1:A:180:LEU:HD12	1:A:181:PRO:HG3	7	0.12
(1,2188)	1:A:180:LEU:HD13	1:A:181:PRO:HG3	7	0.12
(1,2188)	1:A:180:LEU:HD21	1:A:181:PRO:HG3	7	0.12
(1,2188)	1:A:180:LEU:HD22	1:A:181:PRO:HG3	7	0.12
(1,2188)	1:A:180:LEU:HD23	1:A:181:PRO:HG3	7	0.12
(1,2173)	1:A:178:ASN:H	1:A:179:PRO:HD3	1	0.12
(1,2173)	1:A:178:ASN:H	1:A:179:PRO:HD3	15	0.12
(1,2172)	1:A:177:ASN:HB3	1:A:178:ASN:H	13	0.12
(1,2126)	1:A:171:ILE:HD11	1:A:172:PRO:HG3	15	0.12
(1,2126)	1:A:171:ILE:HD12	1:A:172:PRO:HG3	15	0.12
(1,2126)	1:A:171:ILE:HD13	1:A:172:PRO:HG3	15	0.12
(1,2105)	1:A:167:TYR:H	1:A:221:ILE:HG13	20	0.12
(1,2098)	1:A:166:LYS:HB3	1:A:166:LYS:HE3	18	0.12
(1,2087)	1:A:164:GLN:H	1:A:164:GLN:HB3	3	0.12
(1,2087)	1:A:164:GLN:H	1:A:164:GLN:HB3	9	0.12
(1,2087)	1:A:164:GLN:H	1:A:164:GLN:HB3	11	0.12
(1,2087)	1:A:164:GLN:H	1:A:164:GLN:HB3	13	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2087)	1:A:164:GLN:H	1:A:164:GLN:HB3	16	0.12
(1,2086)	1:A:163:ARG:HG3	1:A:164:GLN:H	3	0.12
(1,2041)	1:A:156:SER:H	1:A:157:LEU:HB3	2	0.12
(1,2037)	1:A:152:GLN:HG3	1:A:153:PHE:H	6	0.12
(1,2036)	1:A:152:GLN:HG3	1:A:152:GLN:HE21	7	0.12
(1,2036)	1:A:152:GLN:HG3	1:A:152:GLN:HE22	7	0.12
(1,1914)	1:A:125:LEU:HD11	1:A:157:LEU:HB3	14	0.12
(1,1914)	1:A:125:LEU:HD12	1:A:157:LEU:HB3	14	0.12
(1,1914)	1:A:125:LEU:HD13	1:A:157:LEU:HB3	14	0.12
(1,1914)	1:A:125:LEU:HD21	1:A:157:LEU:HB3	14	0.12
(1,1914)	1:A:125:LEU:HD22	1:A:157:LEU:HB3	14	0.12
(1,1914)	1:A:125:LEU:HD23	1:A:157:LEU:HB3	14	0.12
(1,1882)	1:A:112:PHE:HA	1:A:115:MET:HG3	15	0.12
(1,1878)	1:A:110:ILE:HG13	1:A:111:ILE:H	7	0.12
(1,1870)	1:A:107:LYS:H	1:A:107:LYS:HB3	3	0.12
(1,1870)	1:A:107:LYS:H	1:A:107:LYS:HB3	5	0.12
(1,1854)	1:A:101:GLN:HB3	1:A:109:GLY:H	4	0.12
(1,1800)	1:A:97:GLN:HB3	1:A:98:ASN:H	16	0.12
(1,1782)	1:A:94:LEU:HD11	1:A:114:GLU:HG3	10	0.12
(1,1782)	1:A:94:LEU:HD12	1:A:114:GLU:HG3	10	0.12
(1,1782)	1:A:94:LEU:HD13	1:A:114:GLU:HG3	10	0.12
(1,1782)	1:A:94:LEU:HD21	1:A:114:GLU:HG3	10	0.12
(1,1782)	1:A:94:LEU:HD22	1:A:114:GLU:HG3	10	0.12
(1,1782)	1:A:94:LEU:HD23	1:A:114:GLU:HG3	10	0.12
(1,1734)	1:A:85:HIS:HB3	1:A:111:ILE:HD11	4	0.12
(1,1734)	1:A:85:HIS:HB3	1:A:111:ILE:HD12	4	0.12
(1,1734)	1:A:85:HIS:HB3	1:A:111:ILE:HD13	4	0.12
(1,1709)	1:A:83:ILE:HA	1:A:136:ILE:HG13	5	0.12
(1,168)	1:A:145:ARG:H	1:A:145:ARG:HB3	2	0.12
(1,168)	1:A:145:ARG:H	1:A:145:ARG:HB3	4	0.12
(1,168)	1:A:145:ARG:H	1:A:145:ARG:HB3	5	0.12
(1,168)	1:A:145:ARG:H	1:A:145:ARG:HB3	6	0.12
(1,168)	1:A:145:ARG:H	1:A:145:ARG:HB3	8	0.12
(1,168)	1:A:145:ARG:H	1:A:145:ARG:HB3	9	0.12
(1,168)	1:A:145:ARG:H	1:A:145:ARG:HB3	12	0.12
(1,168)	1:A:145:ARG:H	1:A:145:ARG:HB3	17	0.12
(1,1672)	1:A:79:LEU:HD11	1:A:132:SER:HB3	13	0.12
(1,1672)	1:A:79:LEU:HD12	1:A:132:SER:HB3	13	0.12
(1,1672)	1:A:79:LEU:HD13	1:A:132:SER:HB3	13	0.12
(1,1672)	1:A:79:LEU:HD21	1:A:132:SER:HB3	13	0.12
(1,1672)	1:A:79:LEU:HD22	1:A:132:SER:HB3	13	0.12
(1,1672)	1:A:79:LEU:HD23	1:A:132:SER:HB3	13	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1646)	1:A:76:GLU:HA	1:A:76:GLU:HB3	15	0.12
(1,1603)	1:A:146:ASP:HB3	1:A:147:THR:HB	15	0.12
(1,1588)	1:A:96:VAL:HA	1:A:99:LEU:HD11	12	0.12
(1,1588)	1:A:96:VAL:HA	1:A:99:LEU:HD12	12	0.12
(1,1588)	1:A:96:VAL:HA	1:A:99:LEU:HD13	12	0.12
(1,1588)	1:A:96:VAL:HA	1:A:99:LEU:HD11	13	0.12
(1,1588)	1:A:96:VAL:HA	1:A:99:LEU:HD12	13	0.12
(1,1588)	1:A:96:VAL:HA	1:A:99:LEU:HD13	13	0.12
(1,1535)	1:A:77:VAL:HA	1:A:78:PHE:HB3	9	0.12
(1,1529)	1:A:80:LYS:HA	1:A:80:LYS:HD3	14	0.12
(1,1514)	1:A:95:ARG:HA	1:A:98:ASN:HB3	13	0.12
(1,1505)	1:A:212:GLU:HA	1:A:215:TYR:HA	13	0.12
(1,1364)	1:A:208:ARG:HA	1:A:208:ARG:HD3	20	0.12
(1,1350)	1:A:200:ARG:HB3	1:A:200:ARG:HD3	20	0.12
(1,1340)	1:A:216:LYS:HA	1:A:216:LYS:HE3	6	0.12
(1,1340)	1:A:216:LYS:HA	1:A:216:LYS:HE3	19	0.12
(1,1302)	1:A:87:GLU:HA	1:A:87:GLU:HG3	8	0.12
(1,1301)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:87:GLU:HG3	13	0.12
(1,1245)	1:A:80:LYS:HB3	1:A:106:ILE:HG21	16	0.12
(1,1245)	1:A:80:LYS:HB3	1:A:106:ILE:HG22	16	0.12
(1,1245)	1:A:80:LYS:HB3	1:A:106:ILE:HG23	16	0.12
(1,1221)	1:A:216:LYS:H	1:A:216:LYS:HD3	4	0.12
(1,1215)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:167:TYR:H	10	0.12
(1,1214)	1:A:166:LYS:H	1:A:166:LYS:HD3	10	0.12
(1,1213)	1:A:165:HIS:HA	1:A:166:LYS:HD3	4	0.12
(1,104)	1:A:196:GLU:HB3	1:A:199:SER:H	8	0.12
(1,821)	1:A:173:MET:H	1:A:173:MET:HE1	11	0.11
(1,821)	1:A:173:MET:H	1:A:173:MET:HE2	11	0.11
(1,821)	1:A:173:MET:H	1:A:173:MET:HE3	11	0.11
(1,821)	1:A:173:MET:H	1:A:173:MET:HE1	13	0.11
(1,821)	1:A:173:MET:H	1:A:173:MET:HE2	13	0.11
(1,821)	1:A:173:MET:H	1:A:173:MET:HE3	13	0.11
(1,821)	1:A:173:MET:H	1:A:173:MET:HE1	19	0.11
(1,821)	1:A:173:MET:H	1:A:173:MET:HE2	19	0.11
(1,821)	1:A:173:MET:H	1:A:173:MET:HE3	19	0.11
(1,810)	1:A:173:MET:HE1	1:A:197:GLU:HB3	7	0.11
(1,810)	1:A:173:MET:HE2	1:A:197:GLU:HB3	7	0.11
(1,810)	1:A:173:MET:HE3	1:A:197:GLU:HB3	7	0.11
(1,810)	1:A:173:MET:HE1	1:A:197:GLU:HB3	18	0.11
(1,810)	1:A:173:MET:HE2	1:A:197:GLU:HB3	18	0.11
(1,810)	1:A:173:MET:HE3	1:A:197:GLU:HB3	18	0.11
(1,73)	1:A:104:PHE:H	1:A:104:PHE:HB3	7	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,73)	1:A:104:PHE:H	1:A:104:PHE:HB3	8	0.11
(1,509)	1:A:148:TRP:HE1	1:A:186:PRO:HB3	1	0.11
(1,480)	1:A:182:ARG:H	1:A:182:ARG:HD3	5	0.11
(1,471)	1:A:196:GLU:H	1:A:196:GLU:HB3	8	0.11
(1,471)	1:A:196:GLU:H	1:A:196:GLU:HB3	15	0.11
(1,438)	1:A:180:LEU:H	1:A:181:PRO:HG3	4	0.11
(1,438)	1:A:180:LEU:H	1:A:181:PRO:HG3	11	0.11
(1,332)	1:A:95:ARG:H	1:A:95:ARG:HD3	7	0.11
(1,262)	1:A:183:GLU:HB3	1:A:185:THR:H	12	0.11
(1,26)	1:A:108:PRO:HB3	1:A:109:GLY:H	20	0.11
(1,257)	1:A:205:GLN:HB3	1:A:206:VAL:H	7	0.11
(1,257)	1:A:205:GLN:HB3	1:A:206:VAL:H	15	0.11
(1,2418)	1:A:234:ILE:H	1:A:234:ILE:HG13	17	0.11
(1,2417)	1:A:233:PHE:HB3	1:A:234:ILE:H	3	0.11
(1,2397)	1:A:226:ARG:HB3	1:A:226:ARG:HD3	1	0.11
(1,2397)	1:A:226:ARG:HB3	1:A:226:ARG:HD3	9	0.11
(1,2394)	1:A:224:GLU:HG3	1:A:225:THR:H	2	0.11
(1,2386)	1:A:223:LYS:HG3	1:A:223:LYS:HE3	18	0.11
(1,2383)	1:A:223:LYS:HB3	1:A:223:LYS:HD3	6	0.11
(1,2377)	1:A:222:TRP:HE1	1:A:226:ARG:HD3	15	0.11
(1,2351)	1:A:216:LYS:HG3	1:A:216:LYS:HE3	3	0.11
(1,2350)	1:A:216:LYS:HB3	1:A:217:THR:H	6	0.11
(1,2325)	1:A:212:GLU:H	1:A:212:GLU:HG3	11	0.11
(1,2298)	1:A:200:ARG:HG3	1:A:202:PHE:H	4	0.11
(1,2293)	1:A:199:SER:HB3	1:A:202:PHE:HB3	3	0.11
(1,2290)	1:A:198:GLU:HB3	1:A:198:GLU:HG3	9	0.11
(1,2289)	1:A:198:GLU:HA	1:A:198:GLU:HG3	9	0.11
(1,2289)	1:A:198:GLU:HA	1:A:198:GLU:HG3	17	0.11
(1,2288)	1:A:198:GLU:HA	1:A:198:GLU:HB3	18	0.11
(1,2284)	1:A:197:GLU:HA	1:A:202:PHE:HB3	19	0.11
(1,2216)	1:A:185:THR:HG21	1:A:189:LEU:HB3	4	0.11
(1,2216)	1:A:185:THR:HG22	1:A:189:LEU:HB3	4	0.11
(1,2216)	1:A:185:THR:HG23	1:A:189:LEU:HB3	4	0.11
(1,2210)	1:A:184:ARG:HB3	1:A:185:THR:H	5	0.11
(1,2199)	1:A:182:ARG:HA	1:A:182:ARG:HG3	11	0.11
(1,2193)	1:A:180:LEU:HD11	1:A:184:ARG:HD3	2	0.11
(1,2193)	1:A:180:LEU:HD12	1:A:184:ARG:HD3	2	0.11
(1,2193)	1:A:180:LEU:HD13	1:A:184:ARG:HD3	2	0.11
(1,2193)	1:A:180:LEU:HD21	1:A:184:ARG:HD3	2	0.11
(1,2193)	1:A:180:LEU:HD22	1:A:184:ARG:HD3	2	0.11
(1,2193)	1:A:180:LEU:HD23	1:A:184:ARG:HD3	2	0.11
(1,2188)	1:A:180:LEU:HD11	1:A:181:PRO:HG3	1	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2188)	1:A:180:LEU:HD12	1:A:181:PRO:HG3	1	0.11
(1,2188)	1:A:180:LEU:HD13	1:A:181:PRO:HG3	1	0.11
(1,2188)	1:A:180:LEU:HD21	1:A:181:PRO:HG3	1	0.11
(1,2188)	1:A:180:LEU:HD22	1:A:181:PRO:HG3	1	0.11
(1,2188)	1:A:180:LEU:HD23	1:A:181:PRO:HG3	1	0.11
(1,2188)	1:A:180:LEU:HD11	1:A:181:PRO:HG3	2	0.11
(1,2188)	1:A:180:LEU:HD12	1:A:181:PRO:HG3	2	0.11
(1,2188)	1:A:180:LEU:HD13	1:A:181:PRO:HG3	2	0.11
(1,2188)	1:A:180:LEU:HD21	1:A:181:PRO:HG3	2	0.11
(1,2188)	1:A:180:LEU:HD22	1:A:181:PRO:HG3	2	0.11
(1,2188)	1:A:180:LEU:HD23	1:A:181:PRO:HG3	2	0.11
(1,2188)	1:A:180:LEU:HD11	1:A:181:PRO:HG3	10	0.11
(1,2188)	1:A:180:LEU:HD12	1:A:181:PRO:HG3	10	0.11
(1,2188)	1:A:180:LEU:HD13	1:A:181:PRO:HG3	10	0.11
(1,2188)	1:A:180:LEU:HD21	1:A:181:PRO:HG3	10	0.11
(1,2188)	1:A:180:LEU:HD22	1:A:181:PRO:HG3	10	0.11
(1,2188)	1:A:180:LEU:HD23	1:A:181:PRO:HG3	10	0.11
(1,2188)	1:A:180:LEU:HD11	1:A:181:PRO:HG3	12	0.11
(1,2188)	1:A:180:LEU:HD12	1:A:181:PRO:HG3	12	0.11
(1,2188)	1:A:180:LEU:HD13	1:A:181:PRO:HG3	12	0.11
(1,2188)	1:A:180:LEU:HD21	1:A:181:PRO:HG3	12	0.11
(1,2188)	1:A:180:LEU:HD22	1:A:181:PRO:HG3	12	0.11
(1,2188)	1:A:180:LEU:HD23	1:A:181:PRO:HG3	12	0.11
(1,2172)	1:A:177:ASN:HB3	1:A:178:ASN:H	5	0.11
(1,2172)	1:A:177:ASN:HB3	1:A:178:ASN:H	9	0.11
(1,2159)	1:A:176:LEU:HG	1:A:198:GLU:HG3	4	0.11
(1,2158)	1:A:176:LEU:HB3	1:A:197:GLU:HG3	18	0.11
(1,2132)	1:A:172:PRO:HG3	1:A:192:ILE:HG21	1	0.11
(1,2132)	1:A:172:PRO:HG3	1:A:192:ILE:HG22	1	0.11
(1,2132)	1:A:172:PRO:HG3	1:A:192:ILE:HG23	1	0.11
(1,2113)	1:A:169:SER:HB3	1:A:170:VAL:H	5	0.11
(1,2110)	1:A:169:SER:H	1:A:169:SER:HB3	18	0.11
(1,2087)	1:A:164:GLN:H	1:A:164:GLN:HB3	20	0.11
(1,2035)	1:A:152:GLN:H	1:A:152:GLN:HG3	2	0.11
(1,2035)	1:A:152:GLN:H	1:A:152:GLN:HG3	12	0.11
(1,1999)	1:A:141:GLU:HG3	1:A:142:ASN:H	3	0.11
(1,1992)	1:A:141:GLU:H	1:A:144:LEU:HB3	11	0.11
(1,1968)	1:A:139:LEU:HB3	1:A:189:LEU:HD11	16	0.11
(1,1968)	1:A:139:LEU:HB3	1:A:189:LEU:HD12	16	0.11
(1,1968)	1:A:139:LEU:HB3	1:A:189:LEU:HD13	16	0.11
(1,1968)	1:A:139:LEU:HB3	1:A:189:LEU:HD21	16	0.11
(1,1968)	1:A:139:LEU:HB3	1:A:189:LEU:HD22	16	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1968)	1:A:139:LEU:HB3	1:A:189:LEU:HD23	16	0.11
(1,1892)	1:A:120:GLN:HG3	1:A:120:GLN:HE21	16	0.11
(1,1892)	1:A:120:GLN:HG3	1:A:120:GLN:HE22	16	0.11
(1,1881)	1:A:111:ILE:HG13	1:A:114:GLU:HG3	12	0.11
(1,1880)	1:A:110:ILE:HD11	1:A:116:PRO:HG3	2	0.11
(1,1880)	1:A:110:ILE:HD12	1:A:116:PRO:HG3	2	0.11
(1,1880)	1:A:110:ILE:HD13	1:A:116:PRO:HG3	2	0.11
(1,1855)	1:A:101:GLN:HG3	1:A:102:ASP:H	5	0.11
(1,1855)	1:A:101:GLN:HG3	1:A:102:ASP:H	14	0.11
(1,1852)	1:A:101:GLN:HB3	1:A:107:LYS:HG3	10	0.11
(1,1846)	1:A:101:GLN:HA	1:A:101:GLN:HG3	10	0.11
(1,1800)	1:A:97:GLN:HB3	1:A:98:ASN:H	1	0.11
(1,1800)	1:A:97:GLN:HB3	1:A:98:ASN:H	3	0.11
(1,1800)	1:A:97:GLN:HB3	1:A:98:ASN:H	15	0.11
(1,1800)	1:A:97:GLN:HB3	1:A:98:ASN:H	18	0.11
(1,1782)	1:A:94:LEU:HD11	1:A:114:GLU:HG3	5	0.11
(1,1782)	1:A:94:LEU:HD12	1:A:114:GLU:HG3	5	0.11
(1,1782)	1:A:94:LEU:HD13	1:A:114:GLU:HG3	5	0.11
(1,1782)	1:A:94:LEU:HD21	1:A:114:GLU:HG3	5	0.11
(1,1782)	1:A:94:LEU:HD22	1:A:114:GLU:HG3	5	0.11
(1,1782)	1:A:94:LEU:HD23	1:A:114:GLU:HG3	5	0.11
(1,1774)	1:A:94:LEU:HD11	1:A:97:GLN:HB3	3	0.11
(1,1774)	1:A:94:LEU:HD12	1:A:97:GLN:HB3	3	0.11
(1,1774)	1:A:94:LEU:HD13	1:A:97:GLN:HB3	3	0.11
(1,1774)	1:A:94:LEU:HD21	1:A:97:GLN:HB3	3	0.11
(1,1774)	1:A:94:LEU:HD22	1:A:97:GLN:HB3	3	0.11
(1,1774)	1:A:94:LEU:HD23	1:A:97:GLN:HB3	3	0.11
(1,1751)	1:A:91:ASP:H	1:A:92:GLU:HB3	10	0.11
(1,1732)	1:A:85:HIS:HB3	1:A:93:ALA:HA	5	0.11
(1,168)	1:A:145:ARG:H	1:A:145:ARG:HB3	3	0.11
(1,1677)	1:A:80:LYS:HA	1:A:80:LYS:HE3	18	0.11
(1,1674)	1:A:80:LYS:H	1:A:80:LYS:HG3	9	0.11
(1,1644)	1:A:76:GLU:H	1:A:76:GLU:HB3	5	0.11
(1,1643)	1:A:75:GLU:HB3	1:A:76:GLU:H	14	0.11
(1,1518)	1:A:104:PHE:HD1	1:A:106:ILE:HA	19	0.11
(1,1518)	1:A:104:PHE:HD2	1:A:106:ILE:HA	19	0.11
(1,1514)	1:A:95:ARG:HA	1:A:98:ASN:HB3	17	0.11
(1,145)	1:A:207:GLU:HB3	1:A:208:ARG:H	15	0.11
(1,1425)	1:A:93:ALA:HA	1:A:96:VAL:HB	16	0.11
(1,1368)	1:A:163:ARG:HD3	1:A:192:ILE:HD11	20	0.11
(1,1368)	1:A:163:ARG:HD3	1:A:192:ILE:HD12	20	0.11
(1,1368)	1:A:163:ARG:HD3	1:A:192:ILE:HD13	20	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1350)	1:A:200:ARG:HB3	1:A:200:ARG:HD3	10	0.11
(1,1341)	1:A:213:SER:HA	1:A:216:LYS:HE3	10	0.11
(1,1340)	1:A:216:LYS:HA	1:A:216:LYS:HE3	9	0.11
(1,1323)	1:A:166:LYS:HD3	1:A:166:LYS:HE3	3	0.11
(1,1322)	1:A:166:LYS:HG3	1:A:166:LYS:HE3	16	0.11
(1,1312)	1:A:193:ASN:HB3	1:A:194:ALA:H	7	0.11
(1,1301)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:87:GLU:HG3	10	0.11
(1,1301)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:87:GLU:HG3	14	0.11
(1,1301)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:87:GLU:HG3	15	0.11
(1,1221)	1:A:216:LYS:H	1:A:216:LYS:HD3	15	0.11
(1,1219)	1:A:215:TYR:HD1	1:A:216:LYS:HD3	8	0.11
(1,1219)	1:A:215:TYR:HD2	1:A:216:LYS:HD3	8	0.11
(1,1135)	1:A:216:LYS:HG3	1:A:216:LYS:HD3	13	0.11
(1,104)	1:A:196:GLU:HB3	1:A:199:SER:H	16	0.11

10 Dihedral-angle violation analysis (i)

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