



Full wwPDB NMR Structure Validation Report i

Jun 6, 2023 – 06:25 PM EDT

PDB ID : 2N93
BMRB ID : 25400
Title : Solution structure of lcFABP
Authors : Tseng, K.; Lyu, P.
Deposited on : 2015-11-05

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:

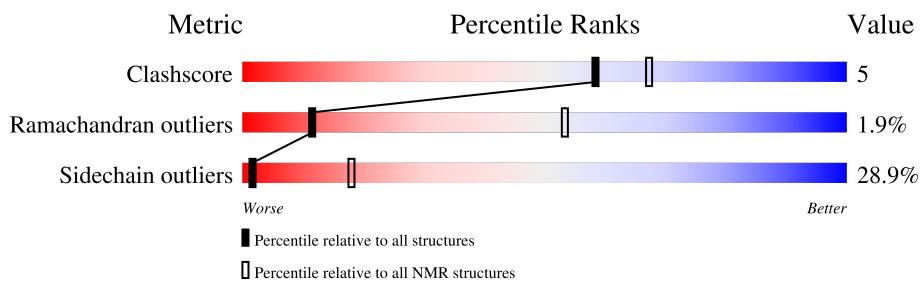
MolProbitiy : 4.02b-467
Percentile statistics : 20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
wwPDB-RCI : v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV : Wang et al. (2010)
wwPDB-ShiftChecker : v1.2
BMRB Restraints Analysis : v1.2
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)
Ideal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

1 Overall quality at a glance

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

The overall completeness of chemical shifts assignment is 86%.

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	130	 69%  29%  ..

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 10 models. Model 8 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:2-A:130 (129)	0.70	8

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 2 clusters and 1 single-model cluster was found.

Cluster number	Models
1	1, 5, 6, 7, 8, 9, 10
2	3, 4
Single-model clusters	2

3 Entry composition [\(i\)](#)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2033 atoms, of which 1022 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Fatty acid-binding protein.

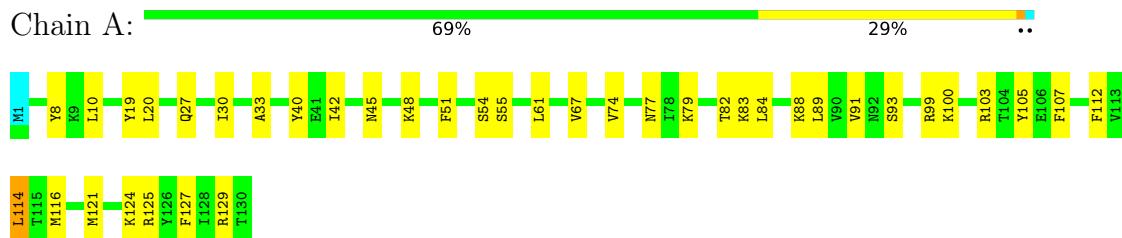
Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
			Total	C	H	N	O	S	
1	A	130	2033	640	1022	166	198	7	0

4 Residue-property plots [\(i\)](#)

4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

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

- Molecule 1: Fatty acid-binding protein

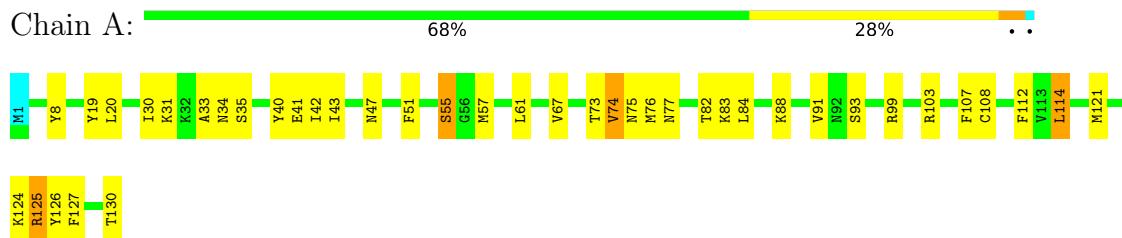


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

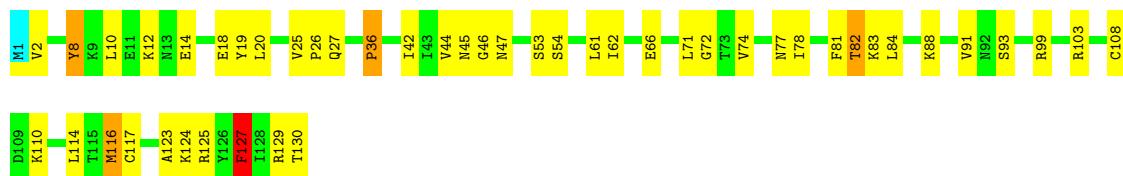
- Molecule 1: Fatty acid-binding protein



4.2.2 Score per residue for model 2

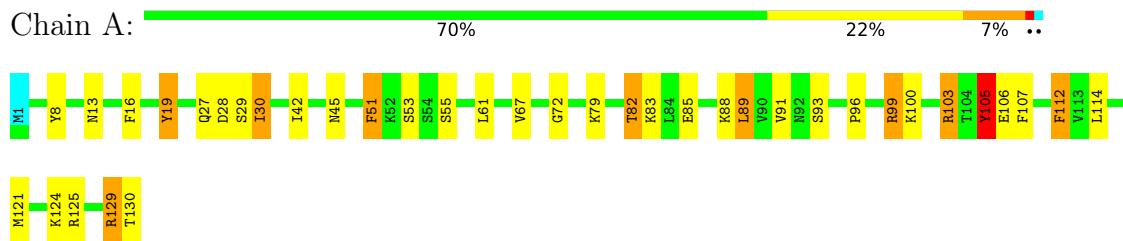
- Molecule 1: Fatty acid-binding protein





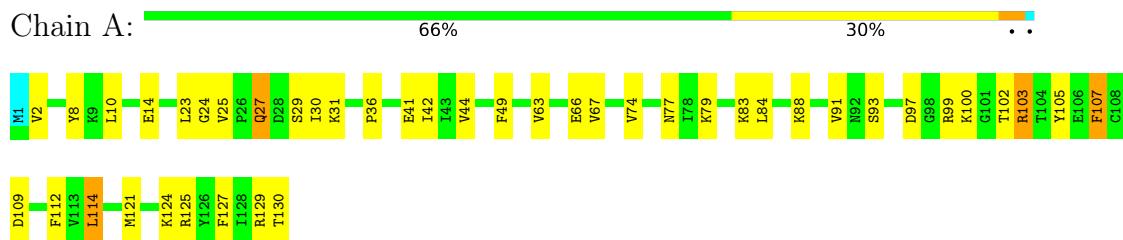
4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Fatty acid-binding protein



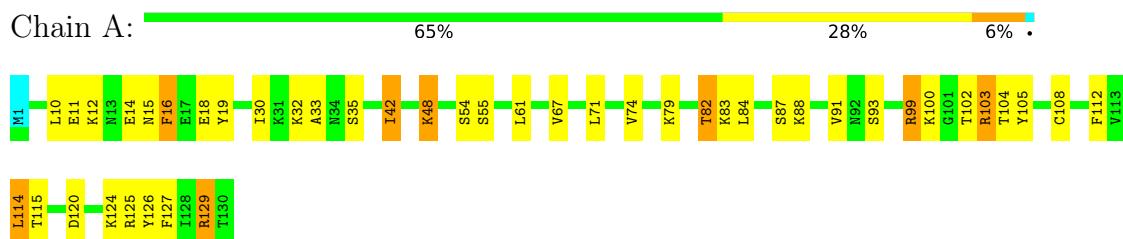
4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Fatty acid-binding protein



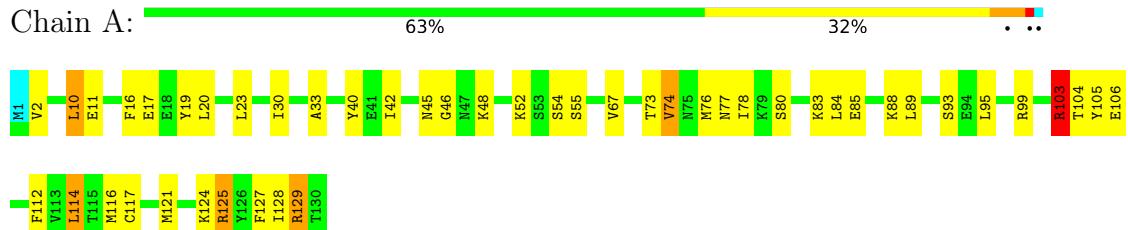
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Fatty acid-binding protein



4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Fatty acid-binding protein



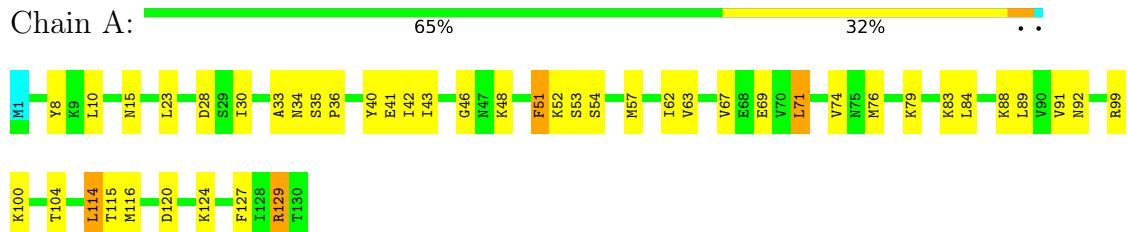
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Fatty acid-binding protein



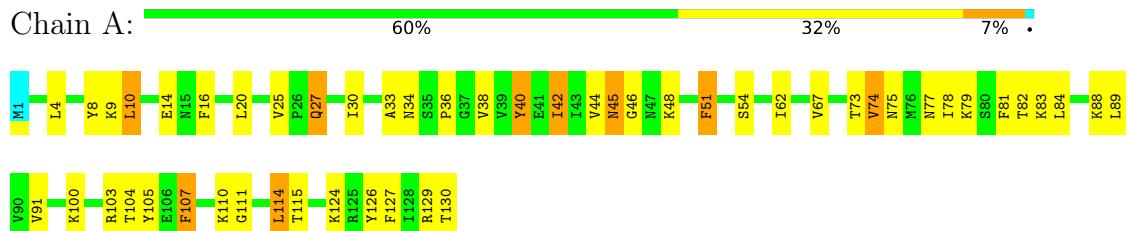
4.2.8 Score per residue for model 8 (medoid)

- Molecule 1: Fatty acid-binding protein



4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Fatty acid-binding protein



4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Fatty acid-binding protein



5 Refinement protocol and experimental data overview i

The models were refined using the following method: *DGSA-distance geometry simulated annealing*.

Of the 200 calculated structures, 10 were deposited, based on the following criterion: *structures with the lowest energy*.

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

Software name	Classification	Version
CNS	structure solution	1.1
Amber	refinement	

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

Chemical shift file(s)	working_cs.cif
Number of chemical shift lists	1
Total number of shifts	1501
Number of shifts mapped to atoms	1501
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Assignment completeness (well-defined parts)	86%

6 Model quality [\(i\)](#)

6.1 Standard geometry [\(i\)](#)

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	#Z>5	RMSZ	#Z>5
1	A	0.67±0.01	0±0/1017 (0.0± 0.0%)	1.20±0.05	3±2/1366 (0.2± 0.2%)
All	All	0.67	0/10170 (0.0%)	1.20	29/13660 (0.2%)

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

Mol	Chain	Chirality	Planarity
1	A	0.0±0.0	2.4±1.1
All	All	0	24

There are no bond-length outliers.

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

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	103	ARG	NE-CZ-NH1	8.52	124.56	120.30	9	7
1	A	125	ARG	NE-CZ-NH1	8.32	124.46	120.30	7	2
1	A	129	ARG	NE-CZ-NH1	8.16	124.38	120.30	5	4
1	A	99	ARG	NE-CZ-NH1	7.65	124.12	120.30	7	2
1	A	19	TYR	CB-CG-CD1	-7.26	116.65	121.00	3	2
1	A	127	PHE	CB-CG-CD2	-6.78	116.06	120.80	7	1
1	A	127	PHE	CB-CG-CD1	6.70	125.49	120.80	7	1
1	A	91	VAL	CG1-CB-CG2	-6.66	100.25	110.90	7	1
1	A	105	TYR	CB-CG-CD2	-6.56	117.07	121.00	10	1
1	A	10	LEU	CB-CG-CD1	6.29	121.69	111.00	7	1
1	A	74	VAL	CG1-CB-CG2	-5.86	101.53	110.90	10	2
1	A	74	VAL	CA-CB-CG2	5.67	119.40	110.90	1	1
1	A	44	VAL	CA-CB-CG1	5.43	119.04	110.90	2	1
1	A	91	VAL	CA-CB-CG2	5.31	118.87	110.90	8	2
1	A	107	PHE	CB-CG-CD2	-5.17	117.18	120.80	1	1

There are no chirality outliers.

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

Mol	Chain	Res	Type	Group	Models (Total)
1	A	126	TYR	Sidechain	4
1	A	103	ARG	Sidechain	4
1	A	19	TYR	Sidechain	3
1	A	8	TYR	Sidechain	2
1	A	105	TYR	Sidechain	2
1	A	127	PHE	Sidechain	1
1	A	16	PHE	Sidechain	1
1	A	99	ARG	Sidechain	1
1	A	49	PHE	Sidechain	1
1	A	15	ASN	Peptide	1
1	A	129	ARG	Sidechain	1
1	A	34	ASN	Peptide	1
1	A	107	PHE	Sidechain	1
1	A	111	GLY	Peptide	1

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	1003	1011	1011	10±4
All	All	10030	10110	10110	99

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 5.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:51:PHE:CZ	1:A:89:LEU:HD13	0.75	2.17	10	3
1:A:33:ALA:HB1	1:A:74:VAL:HG22	0.72	1.60	6	3
1:A:20:LEU:HD12	1:A:30:ILE:HD11	0.72	1.61	10	1
1:A:105:TYR:CE1	1:A:114:LEU:HD13	0.71	2.21	6	2
1:A:61:LEU:HD13	1:A:82:THR:HG21	0.68	1.64	3	5
1:A:114:LEU:HD11	1:A:127:PHE:CZ	0.66	2.25	5	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:71:LEU:HD23	1:A:74:VAL:CG1	0.64	2.22	8	1
1:A:105:TYR:CZ	1:A:114:LEU:HD13	0.61	2.30	3	1
1:A:42:ILE:HG21	1:A:112:PHE:CZ	0.61	2.31	5	1
1:A:10:LEU:HD23	1:A:127:PHE:CD2	0.56	2.36	2	1
1:A:51:PHE:CE1	1:A:89:LEU:HD13	0.56	2.36	10	2
1:A:20:LEU:HD13	1:A:30:ILE:HD11	0.55	1.77	7	1
1:A:49:PHE:HB2	1:A:63:VAL:HG22	0.55	1.77	7	1
1:A:33:ALA:HB1	1:A:74:VAL:HG12	0.54	1.79	7	3
1:A:33:ALA:CB	1:A:74:VAL:HG22	0.54	2.32	6	2
1:A:20:LEU:CD1	1:A:30:ILE:HD11	0.54	2.32	10	1
1:A:103:ARG:CD	1:A:114:LEU:HD11	0.52	2.34	3	1
1:A:10:LEU:HD23	1:A:38:VAL:HB	0.52	1.79	7	2
1:A:114:LEU:HD22	1:A:127:PHE:CZ	0.52	2.40	7	1
1:A:42:ILE:HD13	1:A:51:PHE:CD2	0.52	2.39	10	1
1:A:42:ILE:HG21	1:A:112:PHE:CE2	0.50	2.42	5	1
1:A:114:LEU:HB3	1:A:125:ARG:CZ	0.50	2.37	6	1
1:A:23:LEU:HD22	1:A:95:LEU:HG	0.50	1.84	6	1
1:A:61:LEU:CD1	1:A:82:THR:HG21	0.49	2.37	3	1
1:A:10:LEU:HD13	1:A:127:PHE:CD1	0.49	2.43	5	2
1:A:10:LEU:HD13	1:A:127:PHE:CE1	0.49	2.42	7	1
1:A:10:LEU:HD12	1:A:38:VAL:HB	0.48	1.83	9	1
1:A:103:ARG:NE	1:A:114:LEU:HD11	0.48	2.23	6	1
1:A:71:LEU:HD23	1:A:74:VAL:HG11	0.48	1.84	8	1
1:A:25:VAL:HG11	1:A:74:VAL:HG12	0.48	1.84	9	1
1:A:16:PHE:HA	1:A:19:TYR:CE1	0.47	2.44	6	2
1:A:27:GLN:HA	1:A:30:ILE:CG2	0.47	2.40	9	1
1:A:40:TYR:CD1	1:A:127:PHE:CE2	0.47	3.03	9	1
1:A:61:LEU:CD2	1:A:67:VAL:HG21	0.47	2.40	7	1
1:A:42:ILE:HD11	1:A:44:VAL:HG13	0.46	1.85	9	2
1:A:27:GLN:HA	1:A:30:ILE:HG22	0.46	1.88	4	3
1:A:114:LEU:HD21	1:A:127:PHE:CE1	0.46	2.45	9	1
1:A:40:TYR:CD2	1:A:127:PHE:CZ	0.46	3.04	1	3
1:A:25:VAL:CG1	1:A:74:VAL:HG23	0.45	2.42	2	1
1:A:44:VAL:HG12	1:A:49:PHE:CD2	0.45	2.47	4	1
1:A:33:ALA:HB1	1:A:74:VAL:CG2	0.44	2.39	1	2
1:A:16:PHE:CE1	1:A:30:ILE:HG23	0.44	2.47	3	1
1:A:71:LEU:HD22	1:A:76:MET:O	0.44	2.12	8	1
1:A:25:VAL:HG11	1:A:74:VAL:HG23	0.44	1.89	10	2
1:A:105:TYR:HB3	1:A:112:PHE:CE2	0.44	2.47	5	2
1:A:105:TYR:HE1	1:A:114:LEU:HD13	0.44	1.71	6	1
1:A:116:MET:HB3	1:A:123:ALA:HB3	0.43	1.90	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:105:TYR:CE1	1:A:114:LEU:CD1	0.43	3.00	7	1
1:A:67:VAL:HG23	1:A:80:SER:HB2	0.43	1.91	7	1
1:A:61:LEU:HD12	1:A:61:LEU:C	0.43	2.34	5	1
1:A:13:ASN:HA	1:A:125:ARG:HB3	0.43	1.89	7	1
1:A:10:LEU:HD11	1:A:36:PRO:CB	0.43	2.44	2	1
1:A:103:ARG:HD3	1:A:114:LEU:HD11	0.42	1.91	3	1
1:A:10:LEU:HD23	1:A:127:PHE:CE1	0.42	2.49	6	1
1:A:42:ILE:HD13	1:A:112:PHE:CD2	0.42	2.49	6	1
1:A:105:TYR:CG	1:A:114:LEU:HD12	0.42	2.50	10	1
1:A:13:ASN:HA	1:A:125:ARG:CB	0.42	2.44	7	1
1:A:105:TYR:CE1	1:A:114:LEU:HD12	0.42	2.49	7	1
1:A:105:TYR:CE1	1:A:114:LEU:HB3	0.42	2.49	9	1
1:A:114:LEU:CD2	1:A:127:PHE:CZ	0.42	3.02	1	1
1:A:33:ALA:HB1	1:A:74:VAL:CG1	0.42	2.44	8	1
1:A:42:ILE:HD11	1:A:44:VAL:CG1	0.42	2.43	9	1
1:A:19:TYR:CE1	1:A:20:LEU:HG	0.41	2.50	1	1
1:A:15:ASN:CB	1:A:123:ALA:HA	0.41	2.45	7	1
1:A:17:GLU:OE2	1:A:31:LYS:HE3	0.41	2.16	10	1
1:A:40:TYR:CG	1:A:127:PHE:CE2	0.41	3.08	6	2
1:A:71:LEU:HD23	1:A:74:VAL:HG13	0.41	1.89	8	1
1:A:104:THR:CG2	1:A:115:THR:HG22	0.41	2.46	5	1
1:A:61:LEU:HD22	1:A:67:VAL:HG21	0.41	1.92	7	1
1:A:114:LEU:HD21	1:A:127:PHE:CE2	0.41	2.51	8	1
1:A:91:VAL:CG2	1:A:105:TYR:CZ	0.40	3.04	7	1
1:A:20:LEU:HD11	1:A:26:PRO:C	0.40	2.37	2	1
1:A:128:ILE:HG22	1:A:129:ARG:N	0.40	2.31	6	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	128/130 (98%)	106±4 (82±3%)	20±3 (16±2%)	2±1 (2±1%)	11 53
All	All	1280/1300 (98%)	1055 (82%)	201 (16%)	24 (2%)	11 53

All 13 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	46	GLY	5
1	A	36	PRO	4
1	A	55	SER	2
1	A	72	GLY	2
1	A	48	LYS	2
1	A	62	ILE	2
1	A	47	ASN	1
1	A	112	PHE	1
1	A	24	GLY	1
1	A	107	PHE	1
1	A	109	ASP	1
1	A	45	ASN	1
1	A	86	GLY	1

6.3.2 Protein sidechains [\(i\)](#)

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles
1	A	112/113 (99%)	80±2 (71±2%)	32±2 (29±2%)	2 18
All	All	1120/1130 (99%)	796 (71%)	324 (29%)	2 18

All 87 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	83	LYS	10
1	A	88	LYS	10
1	A	124	LYS	10
1	A	84	LEU	9
1	A	8	TYR	8
1	A	99	ARG	8
1	A	114	LEU	8
1	A	125	ARG	8
1	A	42	ILE	7
1	A	67	VAL	7
1	A	93	SER	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	30	ILE	6
1	A	51	PHE	6
1	A	77	ASN	6
1	A	91	VAL	6
1	A	121	MET	6
1	A	54	SER	6
1	A	79	LYS	6
1	A	100	LYS	6
1	A	129	ARG	6
1	A	73	THR	5
1	A	108	CYS	5
1	A	130	THR	5
1	A	14	GLU	5
1	A	27	GLN	5
1	A	45	ASN	5
1	A	78	ILE	5
1	A	82	THR	5
1	A	116	MET	5
1	A	48	LYS	5
1	A	35	SER	4
1	A	55	SER	4
1	A	12	LYS	4
1	A	53	SER	4
1	A	71	LEU	4
1	A	107	PHE	4
1	A	10	LEU	4
1	A	31	LYS	3
1	A	41	GLU	3
1	A	57	MET	3
1	A	76	MET	3
1	A	112	PHE	3
1	A	2	VAL	3
1	A	110	LYS	3
1	A	28	ASP	3
1	A	85	GLU	3
1	A	106	GLU	3
1	A	104	THR	3
1	A	4	LEU	3
1	A	40	TYR	3
1	A	115	THR	3
1	A	34	ASN	2
1	A	43	ILE	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	75	ASN	2
1	A	18	GLU	2
1	A	62	ILE	2
1	A	66	GLU	2
1	A	81	PHE	2
1	A	117	CYS	2
1	A	13	ASN	2
1	A	29	SER	2
1	A	89	LEU	2
1	A	23	LEU	2
1	A	63	VAL	2
1	A	102	THR	2
1	A	11	GLU	2
1	A	32	LYS	2
1	A	120	ASP	2
1	A	20	LEU	2
1	A	52	LYS	2
1	A	74	VAL	2
1	A	80	SER	2
1	A	69	GLU	2
1	A	47	ASN	1
1	A	127	PHE	1
1	A	96	PRO	1
1	A	105	TYR	1
1	A	97	ASP	1
1	A	15	ASN	1
1	A	87	SER	1
1	A	17	GLU	1
1	A	103	ARG	1
1	A	61	LEU	1
1	A	122	VAL	1
1	A	92	ASN	1
1	A	9	LYS	1
1	A	16	PHE	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 86% for the well-defined parts and 86% 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	1501
Number of shifts mapped to atoms	1501
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Number of shift outliers (ShiftChecker)	0

7.1.2 Chemical shift referencing (i)

The following table shows the suggested chemical shift referencing corrections.

Nucleus	# values	Correction \pm precision, ppm	Suggested action
$^{13}\text{C}_\alpha$	130	-0.31 \pm 0.18	None needed (< 0.5 ppm)
$^{13}\text{C}_\beta$	119	-0.05 \pm 0.07	None needed (< 0.5 ppm)
$^{13}\text{C}'$	130	0.08 \pm 0.15	None needed (< 0.5 ppm)
^{15}N	124	-0.99 \pm 0.19	Should be applied

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 86%, i.e. 1495 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1735. 0 out of 23 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	^1H	^{13}C	^{15}N
Backbone	646/650 (99%)	264/266 (99%)	258/258 (100%)	124/126 (98%)
Sidechain	835/970 (86%)	572/629 (91%)	251/305 (82%)	12/36 (33%)

Continued on next page...

Continued from previous page...

	Total	¹ H	¹³ C	¹⁵ N
Aromatic	14/115 (12%)	14/55 (25%)	0/60 (0%)	0/0 (—%)
Overall	1495/1735 (86%)	850/950 (89%)	509/623 (82%)	136/162 (84%)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 86%, i.e. 1501 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1750. 0 out of 23 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	¹ H	¹³ C	¹⁵ N
Backbone	649/655 (99%)	265/268 (99%)	260/260 (100%)	124/127 (98%)
Sidechain	838/980 (86%)	574/636 (90%)	252/308 (82%)	12/36 (33%)
Aromatic	14/115 (12%)	14/55 (25%)	0/60 (0%)	0/0 (—%)
Overall	1501/1750 (86%)	853/959 (89%)	512/628 (82%)	136/163 (83%)

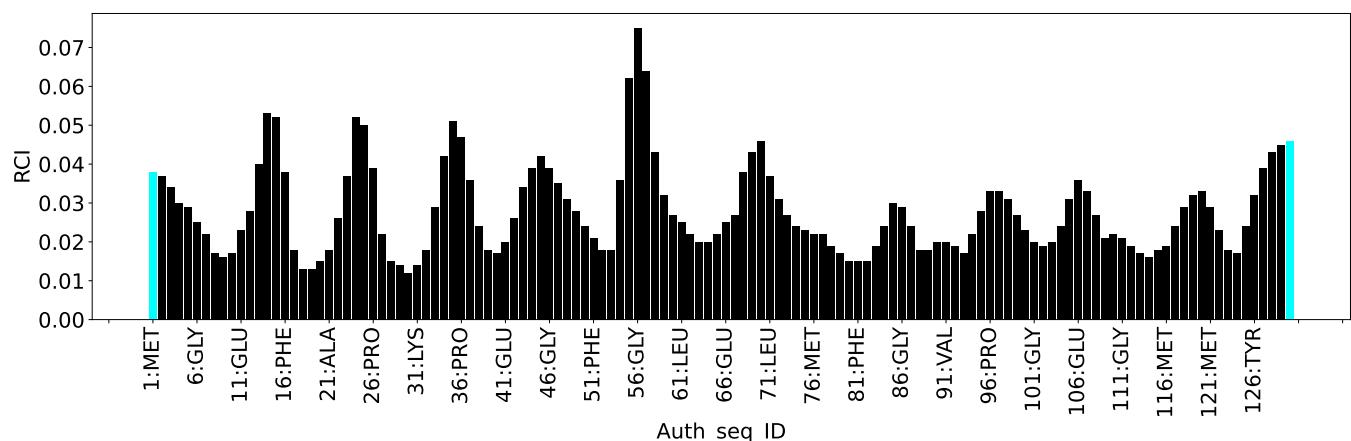
7.1.4 Statistically unusual chemical shifts [\(i\)](#)

There are no statistically unusual chemical shifts.

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

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

Random coil index (RCI) for chain A:



8 NMR restraints analysis 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	2137
Intra-residue ($ i-j =0$)	522
Sequential ($ i-j =1$)	588
Medium range ($ i-j >1$ and $ i-j <5$)	284
Long range ($ i-j \geq 5$)	679
Inter-chain	0
Hydrogen bond restraints	64
Disulfide bond restraints	0
Total dihedral-angle restraints	232
Number of unmapped restraints	0
Number of restraints per residue	18.2
Number of long range restraints per residue ¹	5.6

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

8.2 Residual restraint violations 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)	41.6	0.2
0.2-0.5 (Medium)	112.5	0.5
>0.5 (Large)	117.0	9.49

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

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

Bins (°)	Average number of violations per model	Max (°)
1.0-10.0 (Small)	36.4	10.0
10.0-20.0 (Medium)	18.5	20.0
>20.0 (Large)	13.1	59.1

9 Distance violation analysis (i)

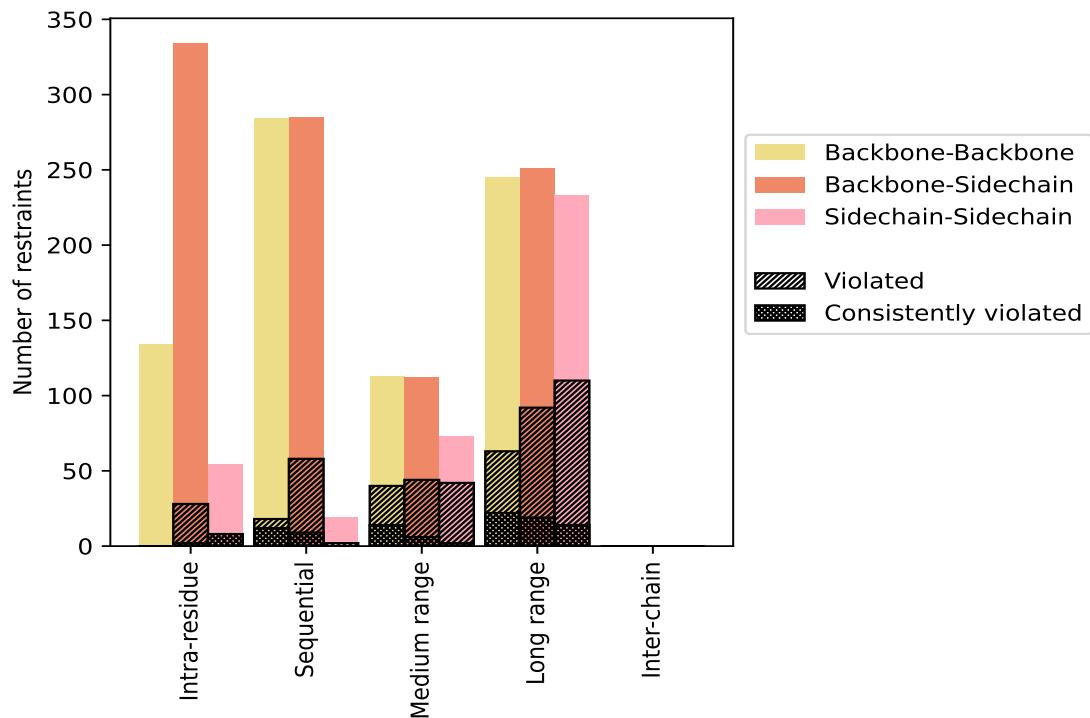
9.1 Summary of distance violations (i)

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$)	522	24.4	36	6.9	1.7	10	1.9	0.5
Backbone-Backbone	134	6.3	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	334	15.6	28	8.4	1.3	2	0.6	0.1
Sidechain-Sidechain	54	2.5	8	14.8	0.4	8	14.8	0.4
Sequential ($ i-j =1$)	588	27.5	78	13.3	3.6	21	3.6	1.0
Backbone-Backbone	284	13.3	18	6.3	0.8	12	4.2	0.6
Backbone-Sidechain	285	13.3	58	20.4	2.7	9	3.2	0.4
Sidechain-Sidechain	19	0.9	2	10.5	0.1	0	0.0	0.0
Medium range ($ i-j >1 \text{ & } i-j <5$)	284	13.3	115	40.5	5.4	21	7.4	1.0
Backbone-Backbone	99	4.6	29	29.3	1.4	13	13.1	0.6
Backbone-Sidechain	112	5.2	44	39.3	2.1	6	5.4	0.3
Sidechain-Sidechain	73	3.4	42	57.5	2.0	2	2.7	0.1
Long range ($ i-j \geq 5$)	679	31.8	251	37.0	11.7	52	7.7	2.4
Backbone-Backbone	195	9.1	49	25.1	2.3	19	9.7	0.9
Backbone-Sidechain	251	11.7	92	36.7	4.3	19	7.6	0.9
Sidechain-Sidechain	233	10.9	110	47.2	5.1	14	6.0	0.7
Inter-chain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Backbone	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Hydrogen bond	64	3.0	25	39.1	1.2	4	6.2	0.2
Disulfide bond	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Total	2137	100.0	505	23.6	23.6	108	5.1	5.1
Backbone-Backbone	776	36.3	121	15.6	5.7	48	6.2	2.2
Backbone-Sidechain	982	46.0	222	22.6	10.4	36	3.7	1.7
Sidechain-Sidechain	379	17.7	162	42.7	7.6	24	6.3	1.1

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

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



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

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

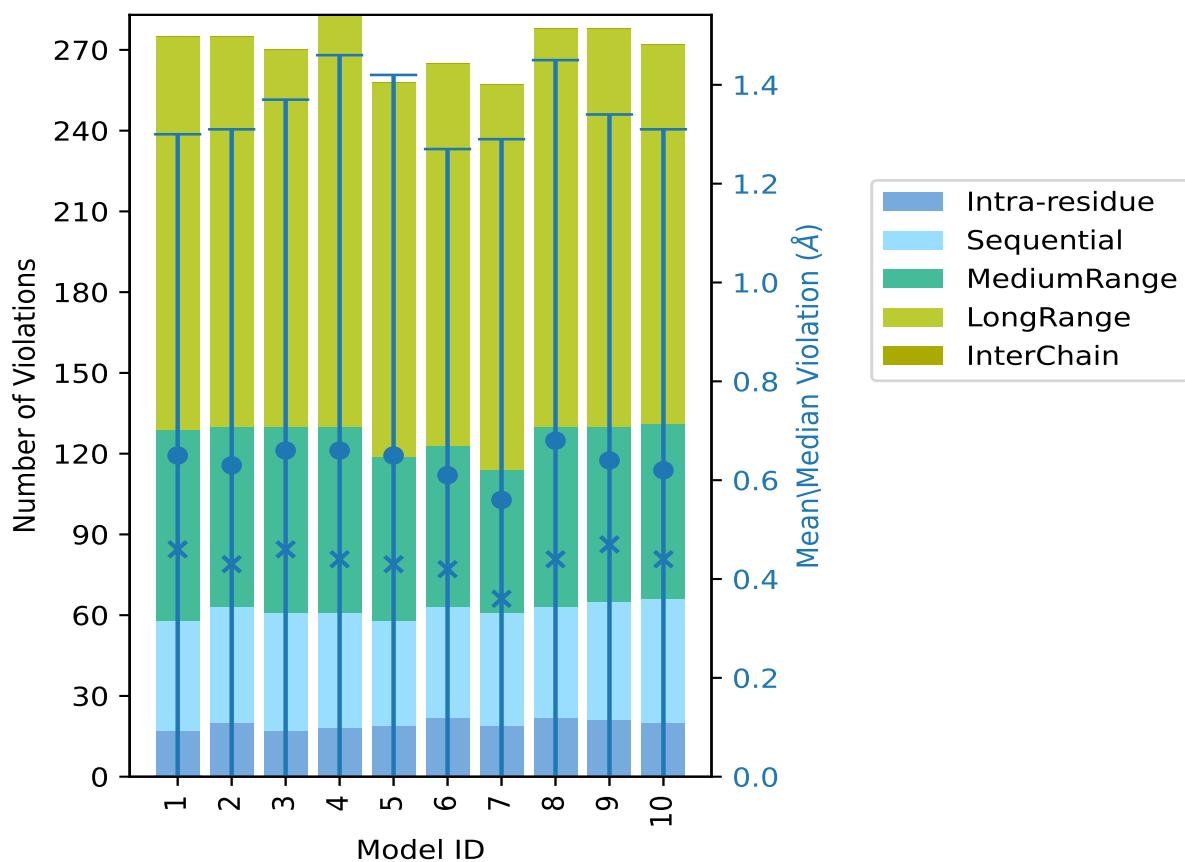
The following table provides the distance violation statistics for each model in the ensemble. Violations less than 0.1 Å are not included in the statistics.

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	17	41	71	146	0	275	0.65	7.22	0.65	0.46
2	20	43	67	145	0	275	0.63	7.52	0.68	0.43
3	17	44	69	140	0	270	0.66	7.41	0.71	0.46
4	18	43	69	153	0	283	0.66	9.49	0.8	0.44
5	19	39	61	139	0	258	0.65	8.7	0.77	0.43
6	22	41	60	142	0	265	0.61	7.43	0.66	0.42
7	19	42	53	143	0	257	0.56	8.66	0.73	0.36
8	22	41	67	148	0	278	0.68	7.92	0.77	0.44
9	21	44	65	148	0	278	0.64	7.78	0.7	0.47
10	20	46	65	141	0	272	0.62	7.71	0.69	0.44

¹Intra-residue restraints, ²Sequential restraints, ³Medium range restraints, ⁴Long range restraints,

⁵Inter-chain restraints, ⁶Standard deviation

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



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

9.3 Distance violation statistics for the ensemble [\(i\)](#)

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, 1593(IR:486, SQ:510, MR:169, LR:428, IC:0) restraints are not violated in the ensemble.

IR ¹	SQ ²	MR ³	LR ⁴	IC ⁵	Total	Fraction of the ensemble	
						Count ⁶	%
8	15	23	42	0	88	1	10.0
6	8	16	29	0	59	2	20.0
2	9	8	27	0	46	3	30.0
1	6	6	21	0	34	4	40.0

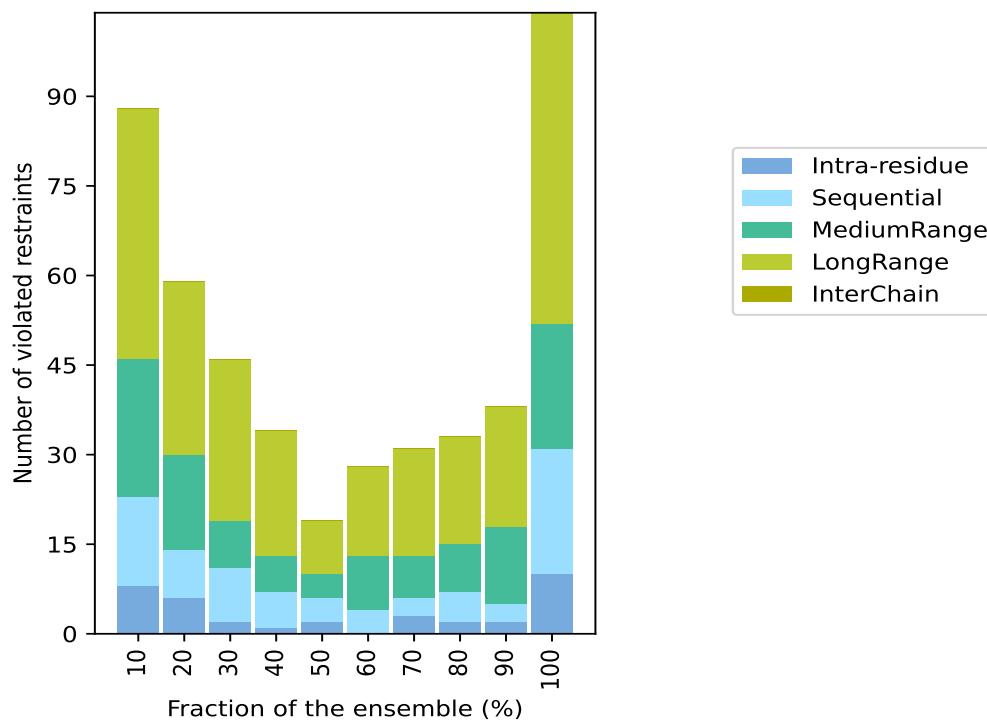
Continued on next page...

Continued from previous page...

IR ¹	Number of violated restraints					Fraction of the ensemble	
	SQ ²	MR ³	LR ⁴	IC ⁵	Total	Count ⁶	%
2	4	4	9	0	19	5	50.0
0	4	9	15	0	28	6	60.0
3	3	7	18	0	31	7	70.0
2	5	8	18	0	33	8	80.0
2	3	13	20	0	38	9	90.0
10	21	21	52	0	104	10	100.0

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

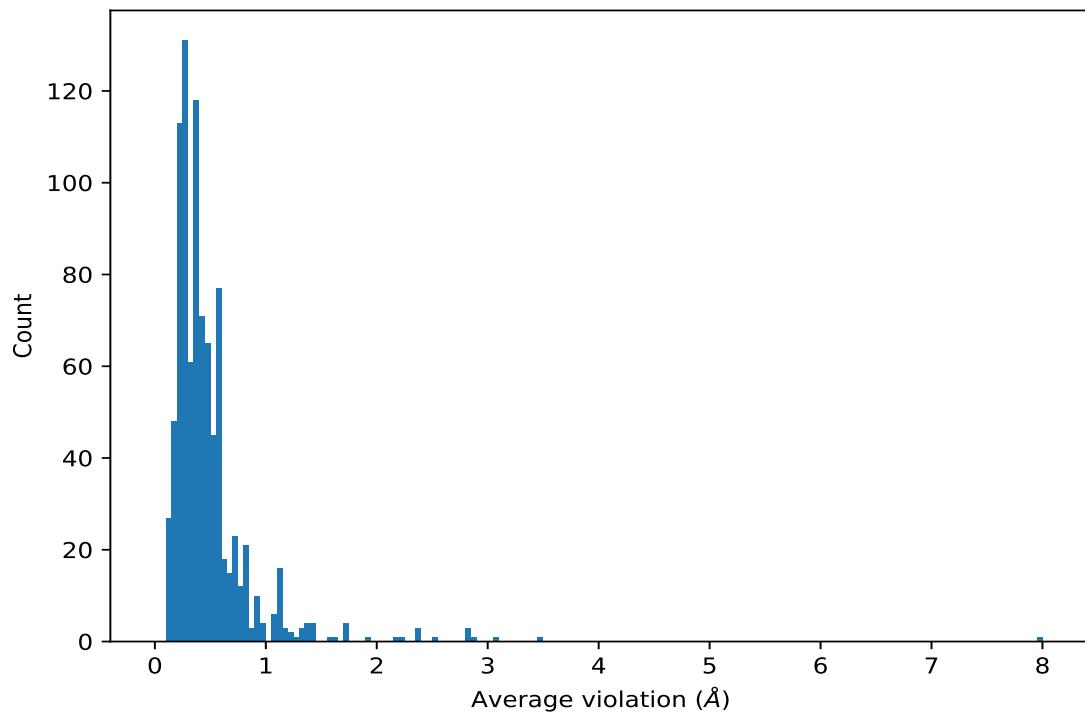
9.3.1 Bar graph : Distance violation statistics for the ensemble [\(i\)](#)



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

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

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



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

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

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,1982)	1:A:37:GLY:HA3	1:A:31:LYS:HG2	10	7.98	0.69	7.74
(1,1979)	1:A:75:ASN:HB3	1:A:29:SER:HB3	10	3.49	0.94	3.72
(1,1960)	1:A:125:ARG:HB2	1:A:10:LEU:HB3	10	3.09	0.88	3.15
(1,746)	1:A:75:ASN:HB2	1:A:29:SER:HB3	10	2.85	0.79	2.9
(1,388)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:63:VAL:HB	10	2.82	0.31	2.95
(1,393)	1:A:77:ASN:HB2	1:A:96:PRO:HG3	10	2.81	0.38	2.9
(1,393)	1:A:77:ASN:HB3	1:A:96:PRO:HG3	10	2.81	0.38	2.9
(1,1904)	1:A:34:ASN:HB3	1:A:30:ILE:HB	10	2.51	0.4	2.57
(1,2027)	1:A:77:ASN:HA	1:A:96:PRO:HG3	10	2.21	0.18	2.18
(1,1968)	1:A:124:LYS:HB3	1:A:14:GLU:HB3	10	1.95	0.43	2.14
(1,1969)	1:A:124:LYS:HE2	1:A:14:GLU:HB3	10	1.74	0.47	1.9
(1,1969)	1:A:124:LYS:HE3	1:A:14:GLU:HB3	10	1.74	0.47	1.9
(1,2062)	1:A:111:GLY:HA3	1:A:129:ARG:HB2	10	1.72	0.28	1.7
(1,2062)	1:A:111:GLY:HA3	1:A:129:ARG:HB3	10	1.72	0.28	1.7
(1,791)	1:A:129:ARG:H	1:A:7:THR:HA	10	1.61	0.17	1.58
(1,2063)	1:A:111:GLY:HA3	1:A:129:ARG:HG2	10	1.45	0.68	1.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,2063)	1:A:111:GLY:HA3	1:A:129:ARG:HG3	10	1.45	0.68	1.48
(1,1966)	1:A:123:ALA:HA	1:A:14:GLU:HB3	10	1.45	0.3	1.53
(1,209)	1:A:112:PHE:H	1:A:113:VAL:HA	10	1.44	0.4	1.38
(1,350)	1:A:124:LYS:H	1:A:15:ASN:HA	10	1.4	0.19	1.42
(1,2046)	1:A:14:GLU:HB3	1:A:123:ALA:HB1	10	1.37	0.24	1.4
(1,2046)	1:A:14:GLU:HB3	1:A:123:ALA:HB2	10	1.37	0.24	1.4
(1,2046)	1:A:14:GLU:HB3	1:A:123:ALA:HB3	10	1.37	0.24	1.4
(1,256)	1:A:128:ILE:H	1:A:127:PHE:H	10	1.27	0.08	1.3
(1,74)	1:A:34:ASN:H	1:A:32:LYS:H	10	1.22	0.28	1.23
(1,62)	1:A:32:LYS:H	1:A:30:ILE:HG21	10	1.2	0.22	1.18
(1,62)	1:A:32:LYS:H	1:A:30:ILE:HG22	10	1.2	0.22	1.18
(1,62)	1:A:32:LYS:H	1:A:30:ILE:HG23	10	1.2	0.22	1.18
(1,21)	1:A:10:LEU:H	1:A:10:LEU:HG	10	1.14	0.18	1.18
(1,97)	1:A:45:ASN:H	1:A:46:GLY:HA2	10	1.14	0.06	1.14
(1,97)	1:A:45:ASN:H	1:A:46:GLY:HA3	10	1.14	0.06	1.14
(1,742)	1:A:114:LEU:HG	1:A:13:ASN:HD22	10	1.11	0.35	1.07
(1,211)	1:A:127:PHE:H	1:A:113:VAL:HG21	10	1.07	0.21	1.11
(1,211)	1:A:127:PHE:H	1:A:113:VAL:HG22	10	1.07	0.21	1.11
(1,211)	1:A:127:PHE:H	1:A:113:VAL:HG23	10	1.07	0.21	1.11
(1,56)	1:A:22:ALA:H	1:A:23:LEU:HG	10	1.06	0.11	1.06
(1,47)	1:A:19:TYR:H	1:A:19:TYR:HE1	10	1.05	0.31	1.05
(1,374)	1:A:80:SER:H	1:A:94:GLU:HG2	10	0.97	0.17	0.96
(1,374)	1:A:80:SER:H	1:A:94:GLU:HG3	10	0.97	0.17	0.96
(1,215)	1:A:124:LYS:H	1:A:115:THR:HA	10	0.95	0.25	0.94
(1,1652)	1:A:65:GLU:HA	1:A:83:LYS:HA	10	0.94	0.11	0.93
(1,45)	1:A:23:LEU:H	1:A:19:TYR:HA	10	0.91	0.23	0.94
(1,22)	1:A:11:GLU:H	1:A:10:LEU:HG	10	0.9	0.36	0.91
(1,2026)	1:A:78:ILE:HG13	1:A:96:PRO:HD2	10	0.87	0.29	0.76
(1,247)	1:A:124:LYS:H	1:A:125:ARG:H	10	0.85	0.24	0.84
(1,222)	1:A:120:ASP:H	1:A:118:ALA:HA	10	0.83	0.27	0.81
(1,371)	1:A:32:LYS:H	1:A:33:ALA:HB1	10	0.83	0.23	0.9
(1,371)	1:A:32:LYS:H	1:A:33:ALA:HB2	10	0.83	0.23	0.9
(1,371)	1:A:32:LYS:H	1:A:33:ALA:HB3	10	0.83	0.23	0.9
(1,73)	1:A:30:ILE:H	1:A:32:LYS:H	10	0.82	0.28	0.77
(1,88)	1:A:54:SER:H	1:A:39:VAL:H	10	0.82	0.23	0.8
(2,6)	1:A:39:VAL:H	1:A:54:SER:H	10	0.82	0.23	0.8
(1,1828)	1:A:35:SER:H	1:A:74:VAL:HG11	10	0.8	0.17	0.78
(1,1828)	1:A:35:SER:H	1:A:74:VAL:HG12	10	0.8	0.17	0.78
(1,1828)	1:A:35:SER:H	1:A:74:VAL:HG13	10	0.8	0.17	0.78
(1,66)	1:A:29:SER:H	1:A:31:LYS:H	10	0.8	0.25	0.85
(1,171)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:H	10	0.8	0.11	0.82
(1,1783)	1:A:22:ALA:H	1:A:25:VAL:HG21	10	0.79	0.13	0.84

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,1783)	1:A:22:ALA:H	1:A:25:VAL:HG22	10	0.79	0.13	0.84
(1,1783)	1:A:22:ALA:H	1:A:25:VAL:HG23	10	0.79	0.13	0.84
(1,373)	1:A:76:MET:H	1:A:71:LEU:HD11	10	0.75	0.34	0.68
(1,373)	1:A:76:MET:H	1:A:71:LEU:HD12	10	0.75	0.34	0.68
(1,373)	1:A:76:MET:H	1:A:71:LEU:HD13	10	0.75	0.34	0.68
(1,1816)	1:A:39:VAL:H	1:A:54:SER:HA	10	0.74	0.21	0.76
(1,1862)	1:A:32:LYS:HA	1:A:31:LYS:HG3	10	0.73	0.09	0.72
(3,63)	1:A:129:ARG:N	1:A:109:ASP:O	10	0.71	0.24	0.66
(1,1965)	1:A:114:LEU:HD21	1:A:13:ASN:HB2	10	0.7	0.29	0.58
(1,1965)	1:A:114:LEU:HD22	1:A:13:ASN:HB2	10	0.7	0.29	0.58
(1,1965)	1:A:114:LEU:HD23	1:A:13:ASN:HB2	10	0.7	0.29	0.58
(1,164)	1:A:81:PHE:H	1:A:91:VAL:HA	10	0.7	0.22	0.68
(1,64)	1:A:33:ALA:H	1:A:31:LYS:HA	10	0.69	0.25	0.67
(1,68)	1:A:33:ALA:H	1:A:31:LYS:H	10	0.68	0.15	0.72
(1,729)	1:A:125:ARG:H	1:A:13:ASN:HA	10	0.68	0.1	0.68
(1,727)	1:A:85:GLU:H	1:A:89:LEU:HG	10	0.64	0.22	0.62
(3,17)	1:A:124:LYS:N	1:A:14:GLU:O	10	0.64	0.2	0.55
(1,110)	1:A:41:GLU:H	1:A:53:SER:HA	10	0.63	0.22	0.68
(1,49)	1:A:23:LEU:H	1:A:21:ALA:HA	10	0.58	0.18	0.56
(1,181)	1:A:95:LEU:H	1:A:96:PRO:HD2	10	0.58	0.09	0.6
(1,181)	1:A:95:LEU:H	1:A:96:PRO:HD3	10	0.58	0.09	0.6
(1,1651)	1:A:65:GLU:H	1:A:84:LEU:HD11	10	0.57	0.22	0.57
(1,1651)	1:A:65:GLU:H	1:A:84:LEU:HD12	10	0.57	0.22	0.57
(1,1651)	1:A:65:GLU:H	1:A:84:LEU:HD13	10	0.57	0.22	0.57
(1,1651)	1:A:65:GLU:H	1:A:84:LEU:HD21	10	0.57	0.22	0.57
(1,1651)	1:A:65:GLU:H	1:A:84:LEU:HD22	10	0.57	0.22	0.57
(1,1651)	1:A:65:GLU:H	1:A:84:LEU:HD23	10	0.57	0.22	0.57
(1,205)	1:A:129:ARG:H	1:A:111:GLY:HA2	10	0.57	0.17	0.57
(1,205)	1:A:129:ARG:H	1:A:111:GLY:HA3	10	0.57	0.17	0.57
(1,1578)	1:A:73:THR:HG21	1:A:71:LEU:HD11	10	0.56	0.17	0.62
(1,1578)	1:A:73:THR:HG21	1:A:71:LEU:HD12	10	0.56	0.17	0.62
(1,1578)	1:A:73:THR:HG21	1:A:71:LEU:HD13	10	0.56	0.17	0.62
(1,1578)	1:A:73:THR:HG21	1:A:71:LEU:HD21	10	0.56	0.17	0.62
(1,1578)	1:A:73:THR:HG21	1:A:71:LEU:HD22	10	0.56	0.17	0.62
(1,1578)	1:A:73:THR:HG21	1:A:71:LEU:HD23	10	0.56	0.17	0.62
(1,1578)	1:A:73:THR:HG22	1:A:71:LEU:HD11	10	0.56	0.17	0.62
(1,1578)	1:A:73:THR:HG22	1:A:71:LEU:HD12	10	0.56	0.17	0.62
(1,1578)	1:A:73:THR:HG22	1:A:71:LEU:HD13	10	0.56	0.17	0.62
(1,1578)	1:A:73:THR:HG22	1:A:71:LEU:HD21	10	0.56	0.17	0.62
(1,1578)	1:A:73:THR:HG22	1:A:71:LEU:HD22	10	0.56	0.17	0.62
(1,1578)	1:A:73:THR:HG22	1:A:71:LEU:HD23	10	0.56	0.17	0.62
(1,1578)	1:A:73:THR:HG23	1:A:71:LEU:HD11	10	0.56	0.17	0.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,1578)	1:A:73:THR:HG23	1:A:71:LEU:HD12	10	0.56	0.17	0.62
(1,1578)	1:A:73:THR:HG23	1:A:71:LEU:HD13	10	0.56	0.17	0.62
(1,1578)	1:A:73:THR:HG23	1:A:71:LEU:HD21	10	0.56	0.17	0.62
(1,1578)	1:A:73:THR:HG23	1:A:71:LEU:HD22	10	0.56	0.17	0.62
(1,1578)	1:A:73:THR:HG23	1:A:71:LEU:HD23	10	0.56	0.17	0.62
(1,152)	1:A:92:ASN:H	1:A:82:THR:HA	10	0.56	0.07	0.55
(1,1989)	1:A:39:VAL:HG21	1:A:54:SER:HA	10	0.55	0.17	0.57
(1,1989)	1:A:39:VAL:HG22	1:A:54:SER:HA	10	0.55	0.17	0.57
(1,1989)	1:A:39:VAL:HG23	1:A:54:SER:HA	10	0.55	0.17	0.57
(1,286)	1:A:23:LEU:HG	1:A:95:LEU:HG	10	0.54	0.09	0.52
(3,9)	1:A:10:LEU:N	1:A:40:TYR:O	10	0.52	0.17	0.51
(1,155)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD11	10	0.51	0.18	0.52
(1,155)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD12	10	0.51	0.18	0.52
(1,155)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD13	10	0.51	0.18	0.52
(1,155)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD21	10	0.51	0.18	0.52
(1,155)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD22	10	0.51	0.18	0.52
(1,155)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD23	10	0.51	0.18	0.52
(1,156)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD11	10	0.51	0.18	0.52
(1,156)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD12	10	0.51	0.18	0.52
(1,156)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD13	10	0.51	0.18	0.52
(1,156)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD21	10	0.51	0.18	0.52
(1,156)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD22	10	0.51	0.18	0.52
(1,156)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD23	10	0.51	0.18	0.52
(3,19)	1:A:19:TYR:N	1:A:15:ASN:O	10	0.51	0.28	0.48
(1,728)	1:A:45:ASN:H	1:A:2:VAL:HG11	10	0.51	0.14	0.56
(1,728)	1:A:45:ASN:H	1:A:2:VAL:HG12	10	0.51	0.14	0.56
(1,728)	1:A:45:ASN:H	1:A:2:VAL:HG13	10	0.51	0.14	0.56
(1,1877)	1:A:3:GLN:HB3	1:A:6:GLY:HA2	10	0.51	0.22	0.55
(1,39)	1:A:17:GLU:H	1:A:15:ASN:H	10	0.51	0.21	0.52
(1,43)	1:A:22:ALA:H	1:A:18:GLU:HA	10	0.49	0.11	0.52
(1,2017)	1:A:63:VAL:HG11	1:A:89:LEU:HA	10	0.49	0.12	0.49
(1,2017)	1:A:63:VAL:HG12	1:A:89:LEU:HA	10	0.49	0.12	0.49
(1,2017)	1:A:63:VAL:HG13	1:A:89:LEU:HA	10	0.49	0.12	0.49
(1,196)	1:A:106:GLU:H	1:A:105:TYR:HB2	10	0.49	0.12	0.44
(1,196)	1:A:106:GLU:H	1:A:105:TYR:HB3	10	0.49	0.12	0.44
(1,749)	1:A:54:SER:HA	1:A:39:VAL:HG11	10	0.47	0.17	0.49
(1,749)	1:A:54:SER:HA	1:A:39:VAL:HG12	10	0.47	0.17	0.49
(1,749)	1:A:54:SER:HA	1:A:39:VAL:HG13	10	0.47	0.17	0.49
(1,1527)	1:A:47:ASN:HA	1:A:2:VAL:HB	10	0.46	0.21	0.44
(1,1817)	1:A:81:PHE:H	1:A:61:LEU:HD21	10	0.46	0.17	0.43
(1,1817)	1:A:81:PHE:H	1:A:61:LEU:HD22	10	0.46	0.17	0.43
(1,1817)	1:A:81:PHE:H	1:A:61:LEU:HD23	10	0.46	0.17	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,42)	1:A:19:TYR:H	1:A:18:GLU:HA	10	0.46	0.05	0.47
(1,65)	1:A:34:ASN:H	1:A:31:LYS:HA	10	0.45	0.19	0.46
(1,1792)	1:A:72:GLY:H	1:A:75:ASN:HA	10	0.42	0.16	0.39
(1,281)	1:A:84:LEU:HA	1:A:89:LEU:HB2	10	0.42	0.19	0.4
(1,281)	1:A:84:LEU:HA	1:A:89:LEU:HB3	10	0.42	0.19	0.4
(1,23)	1:A:12:LYS:H	1:A:11:GLU:HA	10	0.41	0.03	0.4
(1,48)	1:A:21:ALA:H	1:A:20:LEU:HA	10	0.41	0.04	0.42
(1,284)	1:A:23:LEU:HB2	1:A:95:LEU:HB2	10	0.41	0.14	0.45
(1,284)	1:A:23:LEU:HB2	1:A:95:LEU:HB3	10	0.41	0.14	0.45
(1,284)	1:A:23:LEU:HB3	1:A:95:LEU:HB2	10	0.41	0.14	0.45
(1,284)	1:A:23:LEU:HB3	1:A:95:LEU:HB3	10	0.41	0.14	0.45
(1,285)	1:A:23:LEU:HB2	1:A:95:LEU:HB2	10	0.41	0.14	0.45
(1,285)	1:A:23:LEU:HB2	1:A:95:LEU:HB3	10	0.41	0.14	0.45
(1,285)	1:A:23:LEU:HB3	1:A:95:LEU:HB2	10	0.41	0.14	0.45
(1,285)	1:A:23:LEU:HB3	1:A:95:LEU:HB3	10	0.41	0.14	0.45
(1,353)	1:A:6:GLY:H	1:A:5:ALA:HA	10	0.39	0.04	0.4
(1,202)	1:A:111:GLY:H	1:A:110:LYS:HB2	10	0.39	0.11	0.38
(1,202)	1:A:111:GLY:H	1:A:110:LYS:HB3	10	0.39	0.11	0.38
(1,599)	1:A:127:PHE:H	1:A:112:PHE:HA	10	0.38	0.07	0.38
(1,125)	1:A:53:SER:H	1:A:60:THR:HA	10	0.38	0.1	0.41
(1,723)	1:A:16:PHE:H	1:A:14:GLU:HB2	10	0.38	0.1	0.36
(2,3)	1:A:59:SER:H	1:A:54:SER:HA	10	0.38	0.09	0.42
(1,429)	1:A:22:ALA:H	1:A:20:LEU:HA	10	0.38	0.18	0.36
(1,4)	1:A:5:ALA:H	1:A:4:LEU:HA	10	0.36	0.04	0.36
(1,1049)	1:A:48:LYS:H	1:A:44:VAL:HG11	10	0.35	0.12	0.39
(1,1049)	1:A:48:LYS:H	1:A:44:VAL:HG12	10	0.35	0.12	0.39
(1,1049)	1:A:48:LYS:H	1:A:44:VAL:HG13	10	0.35	0.12	0.39
(1,1049)	1:A:48:LYS:H	1:A:44:VAL:HG21	10	0.35	0.12	0.39
(1,1049)	1:A:48:LYS:H	1:A:44:VAL:HG22	10	0.35	0.12	0.39
(1,1049)	1:A:48:LYS:H	1:A:44:VAL:HG23	10	0.35	0.12	0.39
(1,170)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:HG11	10	0.34	0.08	0.3
(1,170)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:HG12	10	0.34	0.08	0.3
(1,170)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:HG13	10	0.34	0.08	0.3
(1,170)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:HG21	10	0.34	0.08	0.3
(1,170)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:HG22	10	0.34	0.08	0.3
(1,170)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:HG23	10	0.34	0.08	0.3
(1,75)	1:A:34:ASN:H	1:A:33:ALA:HA	10	0.34	0.03	0.34
(1,210)	1:A:127:PHE:H	1:A:113:VAL:HA	10	0.33	0.15	0.32
(1,219)	1:A:104:THR:H	1:A:116:MET:HA	10	0.32	0.15	0.3
(1,63)	1:A:32:LYS:H	1:A:31:LYS:HA	10	0.31	0.08	0.34
(1,216)	1:A:125:ARG:H	1:A:115:THR:HA	10	0.27	0.07	0.28
(1,91)	1:A:8:TYR:H	1:A:43:ILE:HA	10	0.26	0.08	0.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,93)	1:A:45:ASN:HD21	1:A:45:ASN:HD22	10	0.24	0.01	0.24
(1,93)	1:A:45:ASN:HD22	1:A:45:ASN:HD21	10	0.24	0.01	0.24
(1,94)	1:A:45:ASN:HD21	1:A:45:ASN:HD22	10	0.24	0.01	0.24
(1,94)	1:A:45:ASN:HD22	1:A:45:ASN:HD21	10	0.24	0.01	0.24
(1,95)	1:A:45:ASN:HD21	1:A:45:ASN:HD22	10	0.24	0.01	0.24
(1,95)	1:A:45:ASN:HD22	1:A:45:ASN:HD21	10	0.24	0.01	0.24
(1,96)	1:A:45:ASN:HD21	1:A:45:ASN:HD22	10	0.24	0.01	0.24
(1,96)	1:A:45:ASN:HD22	1:A:45:ASN:HD21	10	0.24	0.01	0.24
(1,464)	1:A:34:ASN:HD21	1:A:34:ASN:HD22	10	0.24	0.01	0.23
(1,464)	1:A:34:ASN:HD22	1:A:34:ASN:HD21	10	0.24	0.01	0.23
(1,465)	1:A:34:ASN:HD21	1:A:34:ASN:HD22	10	0.24	0.01	0.23
(1,465)	1:A:34:ASN:HD22	1:A:34:ASN:HD21	10	0.24	0.01	0.23
(1,37)	1:A:16:PHE:H	1:A:15:ASN:HB2	10	0.23	0.05	0.24
(1,37)	1:A:16:PHE:H	1:A:15:ASN:HB3	10	0.23	0.05	0.24
(1,498)	1:A:58:ASN:HD21	1:A:58:ASN:HD22	10	0.23	0.01	0.23
(1,498)	1:A:58:ASN:HD22	1:A:58:ASN:HD21	10	0.23	0.01	0.23
(1,499)	1:A:58:ASN:HD21	1:A:58:ASN:HD22	10	0.23	0.01	0.23
(1,499)	1:A:58:ASN:HD22	1:A:58:ASN:HD21	10	0.23	0.01	0.23
(1,379)	1:A:48:LYS:HG3	1:A:2:VAL:HG11	9	2.4	0.52	2.55
(1,379)	1:A:48:LYS:HG3	1:A:2:VAL:HG12	9	2.4	0.52	2.55
(1,379)	1:A:48:LYS:HG3	1:A:2:VAL:HG13	9	2.4	0.52	2.55
(1,2050)	1:A:12:LYS:HD3	1:A:126:TYR:HD1	9	2.16	0.74	2.52
(1,1993)	1:A:82:THR:HB	1:A:61:LEU:HB3	9	1.55	0.32	1.69
(1,1210)	1:A:72:GLY:H	1:A:74:VAL:HB	9	1.22	0.5	1.36
(1,759)	1:A:78:ILE:HB	1:A:93:SER:HB3	9	1.15	0.49	1.05
(1,1942)	1:A:124:LYS:HB3	1:A:126:TYR:HE1	9	0.98	0.47	1.04
(1,2002)	1:A:34:ASN:HB3	1:A:74:VAL:HG11	9	0.85	0.35	0.85
(1,2002)	1:A:34:ASN:HB3	1:A:74:VAL:HG12	9	0.85	0.35	0.85
(1,2002)	1:A:34:ASN:HB3	1:A:74:VAL:HG13	9	0.85	0.35	0.85
(1,395)	1:A:115:THR:HB	1:A:124:LYS:HD2	9	0.82	0.27	0.77
(1,395)	1:A:115:THR:HB	1:A:124:LYS:HD3	9	0.82	0.27	0.77
(1,1933)	1:A:97:ASP:HB3	1:A:95:LEU:HD11	9	0.73	0.3	0.73
(1,1933)	1:A:97:ASP:HB3	1:A:95:LEU:HD12	9	0.73	0.3	0.73
(1,1933)	1:A:97:ASP:HB3	1:A:95:LEU:HD13	9	0.73	0.3	0.73
(1,1768)	1:A:12:LYS:H	1:A:10:LEU:HB3	9	0.71	0.24	0.69
(1,1992)	1:A:80:SER:HB2	1:A:61:LEU:HB3	9	0.65	0.33	0.76
(1,1992)	1:A:80:SER:HB3	1:A:61:LEU:HB3	9	0.65	0.33	0.76
(1,1801)	1:A:45:ASN:HD22	1:A:2:VAL:HG11	9	0.6	0.21	0.61
(1,1801)	1:A:45:ASN:HD22	1:A:2:VAL:HG12	9	0.6	0.21	0.61
(1,1801)	1:A:45:ASN:HD22	1:A:2:VAL:HG13	9	0.6	0.21	0.61
(1,1938)	1:A:118:ALA:HB1	1:A:122:VAL:HB	9	0.57	0.16	0.57
(1,1938)	1:A:118:ALA:HB2	1:A:122:VAL:HB	9	0.57	0.16	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,1938)	1:A:118:ALA:HB3	1:A:122:VAL:HB	9	0.57	0.16	0.57
(1,396)	1:A:11:GLU:HG2	1:A:128:ILE:HG12	9	0.56	0.09	0.54
(1,396)	1:A:11:GLU:HG3	1:A:128:ILE:HG12	9	0.56	0.09	0.54
(1,38)	1:A:15:ASN:H	1:A:15:ASN:HD21	9	0.56	0.28	0.61
(1,38)	1:A:15:ASN:H	1:A:15:ASN:HD22	9	0.56	0.28	0.61
(1,1898)	1:A:31:LYS:HG2	1:A:27:GLN:HG2	9	0.54	0.26	0.56
(1,1898)	1:A:31:LYS:HG2	1:A:27:GLN:HG3	9	0.54	0.26	0.56
(1,1910)	1:A:27:GLN:HG2	1:A:31:LYS:HG2	9	0.54	0.26	0.56
(1,1910)	1:A:27:GLN:HG3	1:A:31:LYS:HG2	9	0.54	0.26	0.56
(1,1951)	1:A:87:SER:HB3	1:A:4:LEU:HD21	9	0.54	0.3	0.43
(1,1951)	1:A:87:SER:HB3	1:A:4:LEU:HD22	9	0.54	0.3	0.43
(1,1951)	1:A:87:SER:HB3	1:A:4:LEU:HD23	9	0.54	0.3	0.43
(1,418)	1:A:19:TYR:H	1:A:17:GLU:HA	9	0.54	0.13	0.52
(1,34)	1:A:124:LYS:H	1:A:14:GLU:HB2	9	0.53	0.17	0.46
(1,34)	1:A:124:LYS:H	1:A:14:GLU:HB3	9	0.53	0.17	0.46
(1,724)	1:A:17:GLU:H	1:A:20:LEU:HB2	9	0.52	0.16	0.54
(1,428)	1:A:17:GLU:H	1:A:19:TYR:H	9	0.51	0.15	0.42
(1,385)	1:A:33:ALA:HB1	1:A:25:VAL:HG11	9	0.49	0.25	0.37
(1,385)	1:A:33:ALA:HB1	1:A:25:VAL:HG12	9	0.49	0.25	0.37
(1,385)	1:A:33:ALA:HB1	1:A:25:VAL:HG13	9	0.49	0.25	0.37
(1,385)	1:A:33:ALA:HB2	1:A:25:VAL:HG11	9	0.49	0.25	0.37
(1,385)	1:A:33:ALA:HB2	1:A:25:VAL:HG12	9	0.49	0.25	0.37
(1,385)	1:A:33:ALA:HB2	1:A:25:VAL:HG13	9	0.49	0.25	0.37
(1,385)	1:A:33:ALA:HB3	1:A:25:VAL:HG11	9	0.49	0.25	0.37
(1,385)	1:A:33:ALA:HB3	1:A:25:VAL:HG12	9	0.49	0.25	0.37
(1,385)	1:A:33:ALA:HB3	1:A:25:VAL:HG13	9	0.49	0.25	0.37
(1,1953)	1:A:111:GLY:HA3	1:A:8:TYR:HD1	9	0.47	0.24	0.44
(1,1953)	1:A:111:GLY:HA3	1:A:8:TYR:HD2	9	0.47	0.24	0.44
(1,168)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:HB	9	0.45	0.29	0.21
(1,732)	1:A:33:ALA:H	1:A:74:VAL:HG11	9	0.44	0.15	0.41
(1,732)	1:A:33:ALA:H	1:A:74:VAL:HG12	9	0.44	0.15	0.41
(1,732)	1:A:33:ALA:H	1:A:74:VAL:HG13	9	0.44	0.15	0.41
(1,253)	1:A:112:PHE:H	1:A:127:PHE:HB2	9	0.43	0.25	0.4
(1,253)	1:A:112:PHE:H	1:A:127:PHE:HB3	9	0.43	0.25	0.4
(1,1631)	1:A:113:VAL:HG21	1:A:126:TYR:HE1	9	0.43	0.13	0.43
(1,1631)	1:A:113:VAL:HG22	1:A:126:TYR:HE1	9	0.43	0.13	0.43
(1,1631)	1:A:113:VAL:HG23	1:A:126:TYR:HE1	9	0.43	0.13	0.43
(1,220)	1:A:123:ALA:H	1:A:117:CYS:HA	9	0.41	0.16	0.42
(1,635)	1:A:129:ARG:H	1:A:128:ILE:HD11	9	0.39	0.1	0.44
(1,635)	1:A:129:ARG:H	1:A:128:ILE:HD12	9	0.39	0.1	0.44
(1,635)	1:A:129:ARG:H	1:A:128:ILE:HD13	9	0.39	0.1	0.44
(1,648)	1:A:50:THR:HB	1:A:43:ILE:HB	9	0.36	0.1	0.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,713)	1:A:51:PHE:H	1:A:61:LEU:HB2	9	0.36	0.09	0.35
(1,713)	1:A:51:PHE:H	1:A:61:LEU:HB3	9	0.36	0.09	0.35
(1,223)	1:A:121:MET:H	1:A:118:ALA:H	9	0.36	0.16	0.33
(1,376)	1:A:106:GLU:H	1:A:113:VAL:HB	9	0.28	0.13	0.29
(1,351)	1:A:88:LYS:H	1:A:85:GLU:H	9	0.27	0.14	0.23
(1,99)	1:A:45:ASN:H	1:A:48:LYS:HB2	9	0.25	0.11	0.18
(1,99)	1:A:45:ASN:H	1:A:48:LYS:HB3	9	0.25	0.11	0.18
(1,132)	1:A:63:VAL:H	1:A:62:ILE:HG21	9	0.23	0.12	0.2
(1,132)	1:A:63:VAL:H	1:A:62:ILE:HG22	9	0.23	0.12	0.2
(1,132)	1:A:63:VAL:H	1:A:62:ILE:HG23	9	0.23	0.12	0.2
(1,126)	1:A:60:THR:H	1:A:60:THR:HB	9	0.18	0.07	0.16
(1,1924)	1:A:65:GLU:HB3	1:A:67:VAL:HG21	8	1.14	0.86	0.88
(1,1924)	1:A:65:GLU:HB3	1:A:67:VAL:HG22	8	1.14	0.86	0.88
(1,1924)	1:A:65:GLU:HB3	1:A:67:VAL:HG23	8	1.14	0.86	0.88
(1,1778)	1:A:15:ASN:H	1:A:18:GLU:HB3	8	1.05	0.39	0.98
(1,2054)	1:A:12:LYS:HD3	1:A:126:TYR:HE1	8	0.93	0.2	0.96
(1,2022)	1:A:78:ILE:HG13	1:A:93:SER:HB2	8	0.86	0.22	0.86
(1,382)	1:A:36:PRO:HB2	1:A:10:LEU:HG	8	0.83	0.36	0.96
(1,1789)	1:A:48:LYS:H	1:A:45:ASN:HD21	8	0.73	0.3	0.65
(1,378)	1:A:48:LYS:HB2	1:A:2:VAL:HG11	8	0.72	0.17	0.7
(1,378)	1:A:48:LYS:HB2	1:A:2:VAL:HG12	8	0.72	0.17	0.7
(1,378)	1:A:48:LYS:HB2	1:A:2:VAL:HG13	8	0.72	0.17	0.7
(1,691)	1:A:34:ASN:H	1:A:32:LYS:HA	8	0.7	0.17	0.7
(1,1807)	1:A:122:VAL:H	1:A:15:ASN:HD21	8	0.61	0.28	0.58
(1,1976)	1:A:75:ASN:HB2	1:A:25:VAL:HG11	8	0.59	0.25	0.56
(1,1976)	1:A:75:ASN:HB2	1:A:25:VAL:HG12	8	0.59	0.25	0.56
(1,1976)	1:A:75:ASN:HB2	1:A:25:VAL:HG13	8	0.59	0.25	0.56
(1,381)	1:A:39:VAL:HG11	1:A:9:LYS:HG2	8	0.48	0.38	0.23
(1,381)	1:A:39:VAL:HG12	1:A:9:LYS:HG2	8	0.48	0.38	0.23
(1,381)	1:A:39:VAL:HG13	1:A:9:LYS:HG2	8	0.48	0.38	0.23
(1,1249)	1:A:94:GLU:H	1:A:78:ILE:HG21	8	0.46	0.15	0.44
(1,1249)	1:A:94:GLU:H	1:A:78:ILE:HG22	8	0.46	0.15	0.44
(1,1249)	1:A:94:GLU:H	1:A:78:ILE:HG23	8	0.46	0.15	0.44
(1,2044)	1:A:122:VAL:HG21	1:A:117:CYS:HB2	8	0.44	0.27	0.34
(1,2044)	1:A:122:VAL:HG22	1:A:117:CYS:HB2	8	0.44	0.27	0.34
(1,2044)	1:A:122:VAL:HG23	1:A:117:CYS:HB2	8	0.44	0.27	0.34
(1,493)	1:A:56:GLY:H	1:A:57:MET:HB2	8	0.43	0.17	0.44
(1,493)	1:A:56:GLY:H	1:A:57:MET:HB3	8	0.43	0.17	0.44
(1,1760)	1:A:77:ASN:HD21	1:A:76:MET:HB2	8	0.43	0.17	0.37
(1,710)	1:A:51:PHE:HB2	1:A:61:LEU:HB2	8	0.43	0.14	0.45
(1,710)	1:A:51:PHE:HB2	1:A:61:LEU:HB3	8	0.43	0.14	0.45
(1,710)	1:A:51:PHE:HB3	1:A:61:LEU:HB2	8	0.43	0.14	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,710)	1:A:51:PHE:HB3	1:A:61:LEU:HB3	8	0.43	0.14	0.45
(1,19)	1:A:128:ILE:H	1:A:10:LEU:HA	8	0.41	0.15	0.41
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD11	8	0.39	0.1	0.36
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD12	8	0.39	0.1	0.36
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD13	8	0.39	0.1	0.36
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD21	8	0.39	0.1	0.36
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD22	8	0.39	0.1	0.36
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD23	8	0.39	0.1	0.36
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD11	8	0.39	0.1	0.36
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD12	8	0.39	0.1	0.36
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD13	8	0.39	0.1	0.36
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD21	8	0.39	0.1	0.36
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD22	8	0.39	0.1	0.36
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD23	8	0.39	0.1	0.36
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD11	8	0.39	0.1	0.36
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD12	8	0.39	0.1	0.36
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD13	8	0.39	0.1	0.36
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD21	8	0.39	0.1	0.36
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD22	8	0.39	0.1	0.36
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD23	8	0.39	0.1	0.36
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD11	8	0.39	0.1	0.36
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD12	8	0.39	0.1	0.36
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD13	8	0.39	0.1	0.36
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD21	8	0.39	0.1	0.36
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD22	8	0.39	0.1	0.36
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD23	8	0.39	0.1	0.36
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD11	8	0.39	0.1	0.36
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD12	8	0.39	0.1	0.36
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD13	8	0.39	0.1	0.36
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD21	8	0.39	0.1	0.36
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD22	8	0.39	0.1	0.36
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD23	8	0.39	0.1	0.36
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD11	8	0.39	0.1	0.36
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD12	8	0.39	0.1	0.36
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD13	8	0.39	0.1	0.36
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD21	8	0.39	0.1	0.36
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD22	8	0.39	0.1	0.36
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD23	8	0.39	0.1	0.36
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD11	8	0.39	0.1	0.36
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD12	8	0.39	0.1	0.36
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD13	8	0.39	0.1	0.36
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD21	8	0.39	0.1	0.36

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD22	8	0.39	0.1	0.36
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD23	8	0.39	0.1	0.36
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD11	8	0.39	0.1	0.36
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD12	8	0.39	0.1	0.36
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD13	8	0.39	0.1	0.36
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD21	8	0.39	0.1	0.36
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD22	8	0.39	0.1	0.36
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD23	8	0.39	0.1	0.36
(1,240)	1:A:124:LYS:H	1:A:124:LYS:HD2	8	0.38	0.22	0.31
(1,240)	1:A:124:LYS:H	1:A:124:LYS:HD3	8	0.38	0.22	0.31
(1,109)	1:A:53:SER:H	1:A:52:LYS:HG2	8	0.31	0.09	0.31
(1,109)	1:A:53:SER:H	1:A:52:LYS:HG3	8	0.31	0.09	0.31
(3,15)	1:A:14:GLU:N	1:A:124:LYS:O	8	0.28	0.14	0.24
(2,5)	1:A:94:GLU:H	1:A:80:SER:HA	8	0.28	0.08	0.25
(1,551)	1:A:83:LYS:H	1:A:83:LYS:HD2	8	0.27	0.08	0.24
(1,551)	1:A:83:LYS:H	1:A:83:LYS:HD3	8	0.27	0.08	0.24
(1,70)	1:A:33:ALA:H	1:A:32:LYS:HA	8	0.26	0.07	0.28
(1,1753)	1:A:27:GLN:H	1:A:26:PRO:HD2	8	0.25	0.09	0.22
(1,145)	1:A:94:GLU:H	1:A:79:LYS:H	8	0.25	0.1	0.2
(1,1625)	1:A:12:LYS:HG2	1:A:126:TYR:HB2	8	0.25	0.09	0.24
(1,1625)	1:A:12:LYS:HG2	1:A:126:TYR:HB3	8	0.25	0.09	0.24
(1,1625)	1:A:12:LYS:HG3	1:A:126:TYR:HB2	8	0.25	0.09	0.24
(1,1625)	1:A:12:LYS:HG3	1:A:126:TYR:HB3	8	0.25	0.09	0.24
(1,1626)	1:A:12:LYS:HG2	1:A:126:TYR:HB2	8	0.25	0.09	0.24
(1,1626)	1:A:12:LYS:HG2	1:A:126:TYR:HB3	8	0.25	0.09	0.24
(1,1626)	1:A:12:LYS:HG3	1:A:126:TYR:HB2	8	0.25	0.09	0.24
(1,1626)	1:A:12:LYS:HG3	1:A:126:TYR:HB3	8	0.25	0.09	0.24
(1,1717)	1:A:126:TYR:HB2	1:A:12:LYS:HG2	8	0.25	0.09	0.24
(1,1717)	1:A:126:TYR:HB2	1:A:12:LYS:HG3	8	0.25	0.09	0.24
(1,1717)	1:A:126:TYR:HB3	1:A:12:LYS:HG2	8	0.25	0.09	0.24
(1,1717)	1:A:126:TYR:HB3	1:A:12:LYS:HG3	8	0.25	0.09	0.24
(1,1718)	1:A:126:TYR:HB2	1:A:12:LYS:HG2	8	0.25	0.09	0.24
(1,1718)	1:A:126:TYR:HB2	1:A:12:LYS:HG3	8	0.25	0.09	0.24
(1,1718)	1:A:126:TYR:HB3	1:A:12:LYS:HG2	8	0.25	0.09	0.24
(1,1718)	1:A:126:TYR:HB3	1:A:12:LYS:HG3	8	0.25	0.09	0.24
(1,165)	1:A:83:LYS:H	1:A:91:VAL:HA	8	0.21	0.07	0.21
(1,1967)	1:A:124:LYS:HB2	1:A:14:GLU:HB3	7	0.9	0.37	0.88
(1,1788)	1:A:47:ASN:H	1:A:45:ASN:HB3	7	0.86	0.49	1.2
(1,1946)	1:A:48:LYS:HA	1:A:2:VAL:HG11	7	0.79	0.13	0.82
(1,1946)	1:A:48:LYS:HA	1:A:2:VAL:HG12	7	0.79	0.13	0.82
(1,1946)	1:A:48:LYS:HA	1:A:2:VAL:HG13	7	0.79	0.13	0.82
(1,491)	1:A:41:GLU:H	1:A:51:PHE:HA	7	0.72	0.22	0.75

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,136)	1:A:66:GLU:H	1:A:65:GLU:HG2	7	0.63	0.16	0.59
(1,136)	1:A:66:GLU:H	1:A:65:GLU:HG3	7	0.63	0.16	0.59
(1,1957)	1:A:114:LEU:HD21	1:A:10:LEU:HA	7	0.62	0.48	0.46
(1,1957)	1:A:114:LEU:HD22	1:A:10:LEU:HA	7	0.62	0.48	0.46
(1,1957)	1:A:114:LEU:HD23	1:A:10:LEU:HA	7	0.62	0.48	0.46
(1,750)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:44:VAL:HG11	7	0.58	0.24	0.5
(1,750)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:44:VAL:HG12	7	0.58	0.24	0.5
(1,750)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:44:VAL:HG13	7	0.58	0.24	0.5
(1,750)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:44:VAL:HG11	7	0.58	0.24	0.5
(1,750)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:44:VAL:HG12	7	0.58	0.24	0.5
(1,750)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:44:VAL:HG13	7	0.58	0.24	0.5
(1,750)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:44:VAL:HG11	7	0.58	0.24	0.5
(1,750)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:44:VAL:HG12	7	0.58	0.24	0.5
(1,750)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:44:VAL:HG13	7	0.58	0.24	0.5
(1,1207)	1:A:76:MET:H	1:A:72:GLY:HA2	7	0.56	0.16	0.52
(1,1207)	1:A:76:MET:H	1:A:72:GLY:HA3	7	0.56	0.16	0.52
(1,1978)	1:A:74:VAL:HG21	1:A:29:SER:HB3	7	0.56	0.58	0.31
(1,1978)	1:A:74:VAL:HG22	1:A:29:SER:HB3	7	0.56	0.58	0.31
(1,1978)	1:A:74:VAL:HG23	1:A:29:SER:HB3	7	0.56	0.58	0.31
(1,1808)	1:A:33:ALA:H	1:A:20:LEU:HD11	7	0.56	0.29	0.6
(1,1808)	1:A:33:ALA:H	1:A:20:LEU:HD12	7	0.56	0.29	0.6
(1,1808)	1:A:33:ALA:H	1:A:20:LEU:HD13	7	0.56	0.29	0.6
(1,634)	1:A:112:PHE:H	1:A:128:ILE:HD11	7	0.55	0.19	0.5
(1,634)	1:A:112:PHE:H	1:A:128:ILE:HD12	7	0.55	0.19	0.5
(1,634)	1:A:112:PHE:H	1:A:128:ILE:HD13	7	0.55	0.19	0.5
(3,10)	1:A:10:LEU:H	1:A:40:TYR:O	7	0.53	0.27	0.53
(1,2019)	1:A:63:VAL:HG21	1:A:89:LEU:HB2	7	0.48	0.24	0.43
(1,2019)	1:A:63:VAL:HG22	1:A:89:LEU:HB2	7	0.48	0.24	0.43
(1,2019)	1:A:63:VAL:HG23	1:A:89:LEU:HB2	7	0.48	0.24	0.43
(1,572)	1:A:84:LEU:H	1:A:89:LEU:HG	7	0.48	0.25	0.49
(1,1885)	1:A:22:ALA:HB1	1:A:18:GLU:HB2	7	0.43	0.15	0.39
(1,1885)	1:A:22:ALA:HB2	1:A:18:GLU:HB2	7	0.43	0.15	0.39
(1,1885)	1:A:22:ALA:HB3	1:A:18:GLU:HB2	7	0.43	0.15	0.39
(1,1991)	1:A:82:THR:HB	1:A:61:LEU:HB2	7	0.4	0.13	0.44
(1,1935)	1:A:94:GLU:HG2	1:A:96:PRO:HB2	7	0.39	0.16	0.44
(1,1935)	1:A:94:GLU:HG3	1:A:96:PRO:HB2	7	0.39	0.16	0.44
(1,245)	1:A:125:ARG:H	1:A:125:ARG:HD2	7	0.39	0.14	0.44
(1,245)	1:A:125:ARG:H	1:A:125:ARG:HD3	7	0.39	0.14	0.44
(1,1799)	1:A:47:ASN:HD21	1:A:2:VAL:HB	7	0.36	0.16	0.38
(1,1647)	1:A:14:GLU:H	1:A:124:LYS:HG2	7	0.35	0.23	0.28
(1,1647)	1:A:14:GLU:H	1:A:124:LYS:HG3	7	0.35	0.23	0.28
(3,51)	1:A:106:GLU:N	1:A:113:VAL:O	7	0.34	0.15	0.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,179)	1:A:97:ASP:H	1:A:95:LEU:HB2	7	0.32	0.19	0.24
(1,179)	1:A:97:ASP:H	1:A:95:LEU:HB3	7	0.32	0.19	0.24
(1,614)	1:A:121:MET:H	1:A:118:ALA:HA	7	0.31	0.11	0.35
(1,270)	1:A:73:THR:HG21	1:A:33:ALA:HB1	7	0.3	0.2	0.23
(1,270)	1:A:73:THR:HG21	1:A:33:ALA:HB2	7	0.3	0.2	0.23
(1,270)	1:A:73:THR:HG21	1:A:33:ALA:HB3	7	0.3	0.2	0.23
(1,270)	1:A:73:THR:HG22	1:A:33:ALA:HB1	7	0.3	0.2	0.23
(1,270)	1:A:73:THR:HG22	1:A:33:ALA:HB2	7	0.3	0.2	0.23
(1,270)	1:A:73:THR:HG22	1:A:33:ALA:HB3	7	0.3	0.2	0.23
(1,270)	1:A:73:THR:HG23	1:A:33:ALA:HB1	7	0.3	0.2	0.23
(1,270)	1:A:73:THR:HG23	1:A:33:ALA:HB2	7	0.3	0.2	0.23
(1,270)	1:A:73:THR:HG23	1:A:33:ALA:HB3	7	0.3	0.2	0.23
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD11	1:A:83:LYS:HE2	7	0.28	0.14	0.26
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD11	1:A:83:LYS:HE3	7	0.28	0.14	0.26
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD12	1:A:83:LYS:HE2	7	0.28	0.14	0.26
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD12	1:A:83:LYS:HE3	7	0.28	0.14	0.26
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD13	1:A:83:LYS:HE2	7	0.28	0.14	0.26
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD13	1:A:83:LYS:HE3	7	0.28	0.14	0.26
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD21	1:A:83:LYS:HE2	7	0.28	0.14	0.26
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD21	1:A:83:LYS:HE3	7	0.28	0.14	0.26
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD22	1:A:83:LYS:HE2	7	0.28	0.14	0.26
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD22	1:A:83:LYS:HE3	7	0.28	0.14	0.26
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD23	1:A:83:LYS:HE2	7	0.28	0.14	0.26
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD23	1:A:83:LYS:HE3	7	0.28	0.14	0.26
(1,370)	1:A:5:ALA:H	1:A:4:LEU:HD21	7	0.26	0.09	0.25
(1,370)	1:A:5:ALA:H	1:A:4:LEU:HD22	7	0.26	0.09	0.25
(1,370)	1:A:5:ALA:H	1:A:4:LEU:HD23	7	0.26	0.09	0.25
(1,189)	1:A:104:THR:H	1:A:103:ARG:HG2	7	0.25	0.08	0.26
(1,189)	1:A:104:THR:H	1:A:103:ARG:HG3	7	0.25	0.08	0.26
(1,409)	1:A:124:LYS:H	1:A:14:GLU:H	7	0.25	0.09	0.21
(1,627)	1:A:14:GLU:H	1:A:124:LYS:H	7	0.25	0.09	0.21
(1,725)	1:A:29:SER:H	1:A:32:LYS:HG2	7	0.25	0.08	0.21
(1,667)	1:A:88:LYS:HA	1:A:106:GLU:HB2	7	0.22	0.1	0.15
(1,667)	1:A:88:LYS:HA	1:A:106:GLU:HB3	7	0.22	0.1	0.15
(1,237)	1:A:124:LYS:H	1:A:124:LYS:HB2	7	0.21	0.05	0.19
(1,237)	1:A:124:LYS:H	1:A:124:LYS:HB3	7	0.21	0.05	0.19
(1,238)	1:A:124:LYS:H	1:A:124:LYS:HB2	7	0.21	0.05	0.19
(1,238)	1:A:124:LYS:H	1:A:124:LYS:HB3	7	0.21	0.05	0.19
(3,33)	1:A:48:LYS:N	1:A:45:ASN:O	7	0.16	0.04	0.16
(1,1886)	1:A:22:ALA:HB1	1:A:18:GLU:HG3	6	1.13	0.22	1.18
(1,1886)	1:A:22:ALA:HB2	1:A:18:GLU:HG3	6	1.13	0.22	1.18
(1,1886)	1:A:22:ALA:HB3	1:A:18:GLU:HG3	6	1.13	0.22	1.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,1892)	1:A:18:GLU:HG3	1:A:22:ALA:HB1	6	1.13	0.22	1.18
(1,1892)	1:A:18:GLU:HG3	1:A:22:ALA:HB2	6	1.13	0.22	1.18
(1,1892)	1:A:18:GLU:HG3	1:A:22:ALA:HB3	6	1.13	0.22	1.18
(1,2023)	1:A:78:ILE:HG13	1:A:93:SER:HB3	6	0.92	0.42	1.0
(1,1784)	1:A:27:GLN:HE21	1:A:29:SER:H	6	0.63	0.17	0.64
(1,1791)	1:A:45:ASN:HD21	1:A:48:LYS:HG2	6	0.61	0.38	0.7
(1,1286)	1:A:88:LYS:H	1:A:84:LEU:HG	6	0.54	0.25	0.52
(1,212)	1:A:125:ARG:H	1:A:114:LEU:HB2	6	0.49	0.29	0.44
(1,212)	1:A:125:ARG:H	1:A:114:LEU:HB3	6	0.49	0.29	0.44
(1,213)	1:A:125:ARG:H	1:A:114:LEU:HB2	6	0.49	0.29	0.44
(1,213)	1:A:125:ARG:H	1:A:114:LEU:HB3	6	0.49	0.29	0.44
(1,139)	1:A:33:ALA:H	1:A:73:THR:HB	6	0.48	0.17	0.5
(1,972)	1:A:35:SER:H	1:A:31:LYS:HB2	6	0.48	0.27	0.39
(1,972)	1:A:35:SER:H	1:A:31:LYS:HB3	6	0.48	0.27	0.39
(3,64)	1:A:129:ARG:H	1:A:109:ASP:O	6	0.44	0.22	0.44
(1,29)	1:A:14:GLU:H	1:A:13:ASN:HB2	6	0.43	0.16	0.45
(1,29)	1:A:14:GLU:H	1:A:13:ASN:HB3	6	0.43	0.16	0.45
(1,275)	1:A:77:ASN:HB2	1:A:70:VAL:HA	6	0.4	0.17	0.37
(1,275)	1:A:77:ASN:HB3	1:A:70:VAL:HA	6	0.4	0.17	0.37
(1,169)	1:A:81:PHE:H	1:A:91:VAL:HG11	6	0.38	0.14	0.42
(1,169)	1:A:81:PHE:H	1:A:91:VAL:HG12	6	0.38	0.14	0.42
(1,169)	1:A:81:PHE:H	1:A:91:VAL:HG13	6	0.38	0.14	0.42
(1,169)	1:A:81:PHE:H	1:A:91:VAL:HG21	6	0.38	0.14	0.42
(1,169)	1:A:81:PHE:H	1:A:91:VAL:HG22	6	0.38	0.14	0.42
(1,169)	1:A:81:PHE:H	1:A:91:VAL:HG23	6	0.38	0.14	0.42
(1,430)	1:A:24:GLY:H	1:A:20:LEU:HA	6	0.36	0.13	0.39
(1,1800)	1:A:45:ASN:HD21	1:A:2:VAL:HG11	6	0.36	0.18	0.34
(1,1800)	1:A:45:ASN:HD21	1:A:2:VAL:HG12	6	0.36	0.18	0.34
(1,1800)	1:A:45:ASN:HD21	1:A:2:VAL:HG13	6	0.36	0.18	0.34
(1,394)	1:A:126:TYR:HB2	1:A:113:VAL:HA	6	0.32	0.15	0.26
(1,113)	1:A:59:SER:H	1:A:53:SER:H	6	0.31	0.15	0.27
(1,124)	1:A:53:SER:H	1:A:59:SER:H	6	0.31	0.15	0.27
(1,2051)	1:A:12:LYS:HE2	1:A:126:TYR:HD1	6	0.3	0.1	0.29
(1,2051)	1:A:12:LYS:HE3	1:A:126:TYR:HD1	6	0.3	0.1	0.29
(1,1922)	1:A:65:GLU:HG2	1:A:63:VAL:HG11	6	0.28	0.08	0.29
(1,1922)	1:A:65:GLU:HG2	1:A:63:VAL:HG12	6	0.28	0.08	0.29
(1,1922)	1:A:65:GLU:HG2	1:A:63:VAL:HG13	6	0.28	0.08	0.29
(1,1824)	1:A:77:ASN:H	1:A:71:LEU:HD11	6	0.26	0.12	0.23
(1,1824)	1:A:77:ASN:H	1:A:71:LEU:HD12	6	0.26	0.12	0.23
(1,1824)	1:A:77:ASN:H	1:A:71:LEU:HD13	6	0.26	0.12	0.23
(1,1654)	1:A:16:PHE:HB2	1:A:33:ALA:HB1	6	0.24	0.18	0.13
(1,1654)	1:A:16:PHE:HB2	1:A:33:ALA:HB2	6	0.24	0.18	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,1654)	1:A:16:PHE:HB2	1:A:33:ALA:HB3	6	0.24	0.18	0.13
(1,1654)	1:A:16:PHE:HB3	1:A:33:ALA:HB1	6	0.24	0.18	0.13
(1,1654)	1:A:16:PHE:HB3	1:A:33:ALA:HB2	6	0.24	0.18	0.13
(1,1654)	1:A:16:PHE:HB3	1:A:33:ALA:HB3	6	0.24	0.18	0.13
(1,24)	1:A:128:ILE:H	1:A:11:GLU:HB2	6	0.23	0.11	0.22
(1,24)	1:A:128:ILE:H	1:A:11:GLU:HB3	6	0.23	0.11	0.22
(1,221)	1:A:118:ALA:H	1:A:117:CYS:HB2	6	0.23	0.05	0.23
(1,221)	1:A:118:ALA:H	1:A:117:CYS:HB3	6	0.23	0.05	0.23
(1,747)	1:A:9:LYS:HB2	1:A:39:VAL:HG11	6	0.22	0.07	0.2
(1,747)	1:A:9:LYS:HB2	1:A:39:VAL:HG12	6	0.22	0.07	0.2
(1,747)	1:A:9:LYS:HB2	1:A:39:VAL:HG13	6	0.22	0.07	0.2
(1,747)	1:A:9:LYS:HB3	1:A:39:VAL:HG11	6	0.22	0.07	0.2
(1,747)	1:A:9:LYS:HB3	1:A:39:VAL:HG12	6	0.22	0.07	0.2
(1,747)	1:A:9:LYS:HB3	1:A:39:VAL:HG13	6	0.22	0.07	0.2
(1,1356)	1:A:99:ARG:H	1:A:95:LEU:HG	6	0.22	0.06	0.22
(1,254)	1:A:128:ILE:H	1:A:127:PHE:HB2	6	0.16	0.02	0.15
(1,254)	1:A:128:ILE:H	1:A:127:PHE:HB3	6	0.16	0.02	0.15
(1,255)	1:A:128:ILE:H	1:A:127:PHE:HB2	6	0.16	0.02	0.15
(1,255)	1:A:128:ILE:H	1:A:127:PHE:HB3	6	0.16	0.02	0.15
(1,1973)	1:A:121:MET:HB2	1:A:18:GLU:HG3	5	0.99	0.59	0.88
(1,1761)	1:A:75:ASN:H	1:A:76:MET:HB3	5	0.94	0.39	1.11
(1,654)	1:A:89:LEU:HA	1:A:84:LEU:HG	5	0.83	0.23	0.79
(1,1907)	1:A:34:ASN:HB2	1:A:30:ILE:HG13	5	0.67	0.18	0.67
(1,1914)	1:A:30:ILE:HG13	1:A:34:ASN:HB2	5	0.67	0.18	0.67
(1,1921)	1:A:48:LYS:HD2	1:A:45:ASN:HB3	5	0.66	0.5	0.55
(1,1921)	1:A:48:LYS:HD3	1:A:45:ASN:HB3	5	0.66	0.5	0.55
(1,1813)	1:A:3:GLN:HE22	1:A:45:ASN:HA	5	0.61	0.25	0.63
(1,257)	1:A:112:PHE:H	1:A:128:ILE:HA	5	0.57	0.39	0.48
(1,78)	1:A:35:SER:H	1:A:33:ALA:H	5	0.52	0.18	0.48
(1,390)	1:A:106:GLU:HA	1:A:88:LYS:HB3	5	0.52	0.1	0.51
(3,18)	1:A:124:LYS:H	1:A:14:GLU:O	5	0.36	0.13	0.4
(1,131)	1:A:63:VAL:H	1:A:62:ILE:HD11	5	0.33	0.22	0.27
(1,131)	1:A:63:VAL:H	1:A:62:ILE:HD12	5	0.33	0.22	0.27
(1,131)	1:A:63:VAL:H	1:A:62:ILE:HD13	5	0.33	0.22	0.27
(1,1627)	1:A:12:LYS:HG2	1:A:126:TYR:HD1	5	0.31	0.07	0.28
(1,1627)	1:A:12:LYS:HG3	1:A:126:TYR:HD1	5	0.31	0.07	0.28
(1,1628)	1:A:12:LYS:HG2	1:A:126:TYR:HD1	5	0.31	0.07	0.28
(1,1628)	1:A:12:LYS:HG3	1:A:126:TYR:HD1	5	0.31	0.07	0.28
(1,197)	1:A:89:LEU:H	1:A:106:GLU:HA	5	0.3	0.11	0.26
(1,123)	1:A:60:THR:H	1:A:59:SER:HB2	5	0.3	0.13	0.24
(1,123)	1:A:60:THR:H	1:A:59:SER:HB3	5	0.3	0.13	0.24
(1,552)	1:A:83:LYS:H	1:A:83:LYS:HE2	5	0.28	0.1	0.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,552)	1:A:83:LYS:H	1:A:83:LYS:HE3	5	0.28	0.1	0.27
(1,192)	1:A:104:THR:H	1:A:104:THR:HB	5	0.23	0.07	0.23
(1,766)	1:A:124:LYS:HA	1:A:115:THR:H	5	0.21	0.09	0.16
(1,102)	1:A:50:THR:H	1:A:49:PHE:HB2	5	0.18	0.07	0.14
(1,102)	1:A:50:THR:H	1:A:49:PHE:HB3	5	0.18	0.07	0.14
(1,1805)	1:A:128:ILE:H	1:A:10:LEU:HD21	4	1.32	0.14	1.32
(1,1805)	1:A:128:ILE:H	1:A:10:LEU:HD22	4	1.32	0.14	1.32
(1,1805)	1:A:128:ILE:H	1:A:10:LEU:HD23	4	1.32	0.14	1.32
(1,384)	1:A:25:VAL:HG11	1:A:20:LEU:HD11	4	0.72	0.27	0.82
(1,384)	1:A:25:VAL:HG11	1:A:20:LEU:HD12	4	0.72	0.27	0.82
(1,384)	1:A:25:VAL:HG11	1:A:20:LEU:HD13	4	0.72	0.27	0.82
(1,384)	1:A:25:VAL:HG12	1:A:20:LEU:HD11	4	0.72	0.27	0.82
(1,384)	1:A:25:VAL:HG12	1:A:20:LEU:HD12	4	0.72	0.27	0.82
(1,384)	1:A:25:VAL:HG12	1:A:20:LEU:HD13	4	0.72	0.27	0.82
(1,384)	1:A:25:VAL:HG13	1:A:20:LEU:HD11	4	0.72	0.27	0.82
(1,384)	1:A:25:VAL:HG13	1:A:20:LEU:HD12	4	0.72	0.27	0.82
(1,384)	1:A:25:VAL:HG13	1:A:20:LEU:HD13	4	0.72	0.27	0.82
(1,1244)	1:A:94:GLU:H	1:A:78:ILE:HD11	4	0.64	0.07	0.62
(1,1244)	1:A:94:GLU:H	1:A:78:ILE:HD12	4	0.64	0.07	0.62
(1,1244)	1:A:94:GLU:H	1:A:78:ILE:HD13	4	0.64	0.07	0.62
(1,1943)	1:A:45:ASN:HB3	1:A:2:VAL:HA	4	0.64	0.32	0.58
(1,1458)	1:A:115:THR:H	1:A:114:LEU:HG	4	0.64	0.23	0.72
(1,387)	1:A:10:LEU:HG	1:A:38:VAL:HB	4	0.57	0.07	0.57
(1,1330)	1:A:82:THR:H	1:A:91:VAL:HB	4	0.57	0.11	0.54
(1,261)	1:A:112:PHE:H	1:A:128:ILE:HG12	4	0.57	0.47	0.35
(1,261)	1:A:112:PHE:H	1:A:128:ILE:HG13	4	0.57	0.47	0.35
(1,1901)	1:A:32:LYS:HE2	1:A:29:SER:HB2	4	0.56	0.39	0.45
(1,1901)	1:A:32:LYS:HE3	1:A:29:SER:HB2	4	0.56	0.39	0.45
(1,389)	1:A:33:ALA:HB1	1:A:71:LEU:HD21	4	0.48	0.22	0.52
(1,389)	1:A:33:ALA:HB1	1:A:71:LEU:HD22	4	0.48	0.22	0.52
(1,389)	1:A:33:ALA:HB1	1:A:71:LEU:HD23	4	0.48	0.22	0.52
(1,389)	1:A:33:ALA:HB2	1:A:71:LEU:HD21	4	0.48	0.22	0.52
(1,389)	1:A:33:ALA:HB2	1:A:71:LEU:HD22	4	0.48	0.22	0.52
(1,389)	1:A:33:ALA:HB2	1:A:71:LEU:HD23	4	0.48	0.22	0.52
(1,389)	1:A:33:ALA:HB3	1:A:71:LEU:HD21	4	0.48	0.22	0.52
(1,389)	1:A:33:ALA:HB3	1:A:71:LEU:HD22	4	0.48	0.22	0.52
(1,389)	1:A:33:ALA:HB3	1:A:71:LEU:HD23	4	0.48	0.22	0.52
(1,159)	1:A:88:LYS:H	1:A:88:LYS:HE2	4	0.47	0.27	0.4
(1,159)	1:A:88:LYS:H	1:A:88:LYS:HE3	4	0.47	0.27	0.4
(1,1785)	1:A:27:GLN:HE22	1:A:31:LYS:HD2	4	0.44	0.17	0.37
(1,1785)	1:A:27:GLN:HE22	1:A:31:LYS:HD3	4	0.44	0.17	0.37
(1,12)	1:A:130:THR:H	1:A:8:TYR:HA	4	0.38	0.18	0.35

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,1923)	1:A:67:VAL:HG21	1:A:65:GLU:HB2	4	0.37	0.22	0.32
(1,1923)	1:A:67:VAL:HG22	1:A:65:GLU:HB2	4	0.37	0.22	0.32
(1,1923)	1:A:67:VAL:HG23	1:A:65:GLU:HB2	4	0.37	0.22	0.32
(1,1927)	1:A:88:LYS:HG2	1:A:84:LEU:HD21	4	0.37	0.13	0.32
(1,1927)	1:A:88:LYS:HG2	1:A:84:LEU:HD22	4	0.37	0.13	0.32
(1,1927)	1:A:88:LYS:HG2	1:A:84:LEU:HD23	4	0.37	0.13	0.32
(1,1927)	1:A:88:LYS:HG3	1:A:84:LEU:HD21	4	0.37	0.13	0.32
(1,1927)	1:A:88:LYS:HG3	1:A:84:LEU:HD22	4	0.37	0.13	0.32
(1,1927)	1:A:88:LYS:HG3	1:A:84:LEU:HD23	4	0.37	0.13	0.32
(1,1928)	1:A:84:LEU:HD21	1:A:88:LYS:HG2	4	0.37	0.13	0.32
(1,1928)	1:A:84:LEU:HD21	1:A:88:LYS:HG3	4	0.37	0.13	0.32
(1,1928)	1:A:84:LEU:HD22	1:A:88:LYS:HG2	4	0.37	0.13	0.32
(1,1928)	1:A:84:LEU:HD22	1:A:88:LYS:HG3	4	0.37	0.13	0.32
(1,1928)	1:A:84:LEU:HD23	1:A:88:LYS:HG2	4	0.37	0.13	0.32
(1,1928)	1:A:84:LEU:HD23	1:A:88:LYS:HG3	4	0.37	0.13	0.32
(1,2032)	1:A:105:TYR:HB2	1:A:112:PHE:HA	4	0.37	0.12	0.38
(1,2032)	1:A:105:TYR:HB3	1:A:112:PHE:HA	4	0.37	0.12	0.38
(1,971)	1:A:28:ASP:H	1:A:31:LYS:HB2	4	0.35	0.17	0.37
(1,971)	1:A:28:ASP:H	1:A:31:LYS:HB3	4	0.35	0.17	0.37
(1,233)	1:A:19:TYR:H	1:A:123:ALA:HB1	4	0.34	0.2	0.26
(1,233)	1:A:19:TYR:H	1:A:123:ALA:HB2	4	0.34	0.2	0.26
(1,233)	1:A:19:TYR:H	1:A:123:ALA:HB3	4	0.34	0.2	0.26
(1,347)	1:A:43:ILE:H	1:A:50:THR:HB	4	0.34	0.19	0.26
(3,34)	1:A:48:LYS:H	1:A:45:ASN:O	4	0.28	0.07	0.3
(1,296)	1:A:6:GLY:H	1:A:44:VAL:HG11	4	0.28	0.17	0.22
(1,296)	1:A:6:GLY:H	1:A:44:VAL:HG12	4	0.28	0.17	0.22
(1,296)	1:A:6:GLY:H	1:A:44:VAL:HG13	4	0.28	0.17	0.22
(1,296)	1:A:6:GLY:H	1:A:44:VAL:HG21	4	0.28	0.17	0.22
(1,296)	1:A:6:GLY:H	1:A:44:VAL:HG22	4	0.28	0.17	0.22
(1,296)	1:A:6:GLY:H	1:A:44:VAL:HG23	4	0.28	0.17	0.22
(1,2052)	1:A:14:GLU:HB2	1:A:126:TYR:HD1	4	0.28	0.09	0.24
(1,239)	1:A:125:ARG:H	1:A:124:LYS:HB2	4	0.28	0.1	0.28
(1,239)	1:A:125:ARG:H	1:A:124:LYS:HB3	4	0.28	0.1	0.28
(1,703)	1:A:69:GLU:H	1:A:78:ILE:HD11	4	0.28	0.11	0.26
(1,703)	1:A:69:GLU:H	1:A:78:ILE:HD12	4	0.28	0.11	0.26
(1,703)	1:A:69:GLU:H	1:A:78:ILE:HD13	4	0.28	0.11	0.26
(1,229)	1:A:123:ALA:H	1:A:122:VAL:HG11	4	0.26	0.05	0.25
(1,229)	1:A:123:ALA:H	1:A:122:VAL:HG12	4	0.26	0.05	0.25
(1,229)	1:A:123:ALA:H	1:A:122:VAL:HG13	4	0.26	0.05	0.25
(1,229)	1:A:123:ALA:H	1:A:122:VAL:HG21	4	0.26	0.05	0.25
(1,229)	1:A:123:ALA:H	1:A:122:VAL:HG22	4	0.26	0.05	0.25
(1,229)	1:A:123:ALA:H	1:A:122:VAL:HG23	4	0.26	0.05	0.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,230)	1:A:123:ALA:H	1:A:122:VAL:HG11	4	0.26	0.05	0.25
(1,230)	1:A:123:ALA:H	1:A:122:VAL:HG12	4	0.26	0.05	0.25
(1,230)	1:A:123:ALA:H	1:A:122:VAL:HG13	4	0.26	0.05	0.25
(1,230)	1:A:123:ALA:H	1:A:122:VAL:HG21	4	0.26	0.05	0.25
(1,230)	1:A:123:ALA:H	1:A:122:VAL:HG22	4	0.26	0.05	0.25
(1,230)	1:A:123:ALA:H	1:A:122:VAL:HG23	4	0.26	0.05	0.25
(1,1456)	1:A:104:THR:H	1:A:114:LEU:HD11	4	0.25	0.07	0.25
(1,1456)	1:A:104:THR:H	1:A:114:LEU:HD12	4	0.25	0.07	0.25
(1,1456)	1:A:104:THR:H	1:A:114:LEU:HD13	4	0.25	0.07	0.25
(1,1456)	1:A:104:THR:H	1:A:114:LEU:HD21	4	0.25	0.07	0.25
(1,1456)	1:A:104:THR:H	1:A:114:LEU:HD22	4	0.25	0.07	0.25
(1,1456)	1:A:104:THR:H	1:A:114:LEU:HD23	4	0.25	0.07	0.25
(1,1638)	1:A:130:THR:H	1:A:7:THR:H	4	0.25	0.06	0.26
(1,1639)	1:A:7:THR:H	1:A:130:THR:H	4	0.25	0.06	0.26
(1,1219)	1:A:76:MET:H	1:A:75:ASN:HD21	4	0.23	0.09	0.2
(1,1219)	1:A:76:MET:H	1:A:75:ASN:HD22	4	0.23	0.09	0.2
(1,1755)	1:A:60:THR:H	1:A:61:LEU:HG	4	0.23	0.09	0.21
(1,1566)	1:A:43:ILE:HB	1:A:7:THR:HB	4	0.2	0.07	0.2
(1,1337)	1:A:79:LYS:H	1:A:93:SER:HB2	4	0.2	0.07	0.19
(1,1337)	1:A:79:LYS:H	1:A:93:SER:HB3	4	0.2	0.07	0.19
(1,1822)	1:A:34:ASN:HD21	1:A:71:LEU:HB2	4	0.19	0.06	0.17
(3,11)	1:A:12:LYS:N	1:A:126:TYR:O	4	0.18	0.05	0.18
(1,743)	1:A:121:MET:HB3	1:A:18:GLU:HG3	3	1.13	0.41	1.31
(1,1902)	1:A:32:LYS:HE2	1:A:29:SER:HB3	3	0.91	0.13	0.86
(1,1902)	1:A:32:LYS:HE3	1:A:29:SER:HB3	3	0.91	0.13	0.86
(1,2036)	1:A:125:ARG:HB3	1:A:114:LEU:HD11	3	0.79	0.13	0.78
(1,2036)	1:A:125:ARG:HB3	1:A:114:LEU:HD12	3	0.79	0.13	0.78
(1,2036)	1:A:125:ARG:HB3	1:A:114:LEU:HD13	3	0.79	0.13	0.78
(1,754)	1:A:79:LYS:HG3	1:A:68:GLU:HA	3	0.72	0.16	0.71
(1,1770)	1:A:13:ASN:HD21	1:A:10:LEU:HG	3	0.7	0.2	0.56
(1,1906)	1:A:27:GLN:HA	1:A:30:ILE:HG13	3	0.64	0.18	0.58
(1,1950)	1:A:87:SER:HB2	1:A:4:LEU:HD21	3	0.58	0.15	0.56
(1,1950)	1:A:87:SER:HB2	1:A:4:LEU:HD22	3	0.58	0.15	0.56
(1,1950)	1:A:87:SER:HB2	1:A:4:LEU:HD23	3	0.58	0.15	0.56
(1,1970)	1:A:124:LYS:HG3	1:A:14:GLU:HB3	3	0.52	0.14	0.54
(1,217)	1:A:116:MET:H	1:A:115:THR:HG21	3	0.49	0.09	0.53
(1,217)	1:A:116:MET:H	1:A:115:THR:HG22	3	0.49	0.09	0.53
(1,217)	1:A:116:MET:H	1:A:115:THR:HG23	3	0.49	0.09	0.53
(1,2001)	1:A:34:ASN:HB2	1:A:74:VAL:HG11	3	0.49	0.16	0.57
(1,2001)	1:A:34:ASN:HB2	1:A:74:VAL:HG12	3	0.49	0.16	0.57
(1,2001)	1:A:34:ASN:HB2	1:A:74:VAL:HG13	3	0.49	0.16	0.57
(1,2047)	1:A:113:VAL:HG21	1:A:124:LYS:HB2	3	0.44	0.31	0.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,2047)	1:A:113:VAL:HG22	1:A:124:LYS:HB2	3	0.44	0.31	0.27
(1,2047)	1:A:113:VAL:HG23	1:A:124:LYS:HB2	3	0.44	0.31	0.27
(1,267)	1:A:74:VAL:HB	1:A:25:VAL:HG11	3	0.42	0.06	0.46
(1,267)	1:A:74:VAL:HB	1:A:25:VAL:HG12	3	0.42	0.06	0.46
(1,267)	1:A:74:VAL:HB	1:A:25:VAL:HG13	3	0.42	0.06	0.46
(1,267)	1:A:74:VAL:HB	1:A:25:VAL:HG21	3	0.42	0.06	0.46
(1,267)	1:A:74:VAL:HB	1:A:25:VAL:HG22	3	0.42	0.06	0.46
(1,267)	1:A:74:VAL:HB	1:A:25:VAL:HG23	3	0.42	0.06	0.46
(1,276)	1:A:25:VAL:HG11	1:A:74:VAL:HB	3	0.42	0.06	0.46
(1,276)	1:A:25:VAL:HG12	1:A:74:VAL:HB	3	0.42	0.06	0.46
(1,276)	1:A:25:VAL:HG13	1:A:74:VAL:HB	3	0.42	0.06	0.46
(1,276)	1:A:25:VAL:HG21	1:A:74:VAL:HB	3	0.42	0.06	0.46
(1,276)	1:A:25:VAL:HG22	1:A:74:VAL:HB	3	0.42	0.06	0.46
(1,276)	1:A:25:VAL:HG23	1:A:74:VAL:HB	3	0.42	0.06	0.46
(1,907)	1:A:25:VAL:H	1:A:23:LEU:HG	3	0.39	0.1	0.38
(1,2056)	1:A:14:GLU:HB3	1:A:126:TYR:HE1	3	0.37	0.17	0.44
(1,10)	1:A:8:TYR:H	1:A:7:THR:HG21	3	0.36	0.05	0.33
(1,10)	1:A:8:TYR:H	1:A:7:THR:HG22	3	0.36	0.05	0.33
(1,10)	1:A:8:TYR:H	1:A:7:THR:HG23	3	0.36	0.05	0.33
(1,594)	1:A:93:SER:H	1:A:101:GLY:H	3	0.36	0.12	0.33
(1,392)	1:A:79:LYS:HE2	1:A:94:GLU:HG2	3	0.33	0.1	0.26
(1,392)	1:A:79:LYS:HE2	1:A:94:GLU:HG3	3	0.33	0.1	0.26
(1,392)	1:A:79:LYS:HE3	1:A:94:GLU:HG2	3	0.33	0.1	0.26
(1,392)	1:A:79:LYS:HE3	1:A:94:GLU:HG3	3	0.33	0.1	0.26
(1,1845)	1:A:17:GLU:H	1:A:123:ALA:HB1	3	0.32	0.14	0.23
(1,1845)	1:A:17:GLU:H	1:A:123:ALA:HB2	3	0.32	0.14	0.23
(1,1845)	1:A:17:GLU:H	1:A:123:ALA:HB3	3	0.32	0.14	0.23
(1,193)	1:A:104:THR:H	1:A:104:THR:HG21	3	0.32	0.12	0.29
(1,193)	1:A:104:THR:H	1:A:104:THR:HG22	3	0.32	0.12	0.29
(1,193)	1:A:104:THR:H	1:A:104:THR:HG23	3	0.32	0.12	0.29
(1,1947)	1:A:47:ASN:HA	1:A:2:VAL:HG21	3	0.31	0.02	0.31
(1,1947)	1:A:47:ASN:HA	1:A:2:VAL:HG22	3	0.31	0.02	0.31
(1,1947)	1:A:47:ASN:HA	1:A:2:VAL:HG23	3	0.31	0.02	0.31
(1,383)	1:A:36:PRO:HG2	1:A:12:LYS:HA	3	0.3	0.13	0.31
(1,383)	1:A:36:PRO:HG3	1:A:12:LYS:HA	3	0.3	0.13	0.31
(1,1757)	1:A:64:ASN:HD22	1:A:63:VAL:HB	3	0.29	0.09	0.33
(1,1053)	1:A:48:LYS:H	1:A:45:ASN:HA	3	0.25	0.07	0.2
(1,55)	1:A:24:GLY:H	1:A:23:LEU:HB2	3	0.24	0.1	0.19
(1,55)	1:A:24:GLY:H	1:A:23:LEU:HB3	3	0.24	0.1	0.19
(1,1949)	1:A:87:SER:HA	1:A:4:LEU:HD21	3	0.24	0.08	0.22
(1,1949)	1:A:87:SER:HA	1:A:4:LEU:HD22	3	0.24	0.08	0.22
(1,1949)	1:A:87:SER:HA	1:A:4:LEU:HD23	3	0.24	0.08	0.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,2059)	1:A:11:GLU:HA	1:A:127:PHE:HA	3	0.24	0.07	0.24
(1,1322)	1:A:105:TYR:H	1:A:89:LEU:HG	3	0.23	0.09	0.23
(1,1459)	1:A:125:ARG:H	1:A:114:LEU:HG	3	0.23	0.06	0.27
(3,49)	1:A:101:GLY:N	1:A:93:SER:O	3	0.21	0.07	0.21
(1,2028)	1:A:91:VAL:HA	1:A:103:ARG:HB2	3	0.2	0.09	0.18
(1,214)	1:A:125:ARG:H	1:A:114:LEU:H	3	0.2	0.05	0.23
(1,1795)	1:A:92:ASN:HD21	1:A:90:VAL:HG11	3	0.2	0.05	0.19
(1,1795)	1:A:92:ASN:HD21	1:A:90:VAL:HG12	3	0.2	0.05	0.19
(1,1795)	1:A:92:ASN:HD21	1:A:90:VAL:HG13	3	0.2	0.05	0.19
(1,1795)	1:A:92:ASN:HD21	1:A:90:VAL:HG21	3	0.2	0.05	0.19
(1,1795)	1:A:92:ASN:HD21	1:A:90:VAL:HG22	3	0.2	0.05	0.19
(1,1795)	1:A:92:ASN:HD21	1:A:90:VAL:HG23	3	0.2	0.05	0.19
(1,2033)	1:A:126:TYR:HA	1:A:113:VAL:HB	3	0.19	0.06	0.17
(1,1786)	1:A:31:LYS:H	1:A:27:GLN:HB2	3	0.19	0.03	0.2
(1,649)	1:A:44:VAL:HB	1:A:49:PHE:HA	3	0.18	0.03	0.18
(1,448)	1:A:31:LYS:H	1:A:30:ILE:HG12	3	0.17	0.05	0.14
(1,448)	1:A:31:LYS:H	1:A:30:ILE:HG13	3	0.17	0.05	0.14
(1,59)	1:A:27:GLN:H	1:A:26:PRO:HB2	3	0.16	0.01	0.15
(1,59)	1:A:27:GLN:H	1:A:26:PRO:HB3	3	0.16	0.01	0.15
(1,1812)	1:A:49:PHE:H	1:A:44:VAL:HG11	3	0.16	0.04	0.15
(1,1812)	1:A:49:PHE:H	1:A:44:VAL:HG12	3	0.16	0.04	0.15
(1,1812)	1:A:49:PHE:H	1:A:44:VAL:HG13	3	0.16	0.04	0.15
(1,129)	1:A:51:PHE:H	1:A:62:ILE:HA	3	0.15	0.06	0.11
(1,1782)	1:A:27:GLN:H	1:A:25:VAL:HG11	3	0.15	0.03	0.14
(1,1782)	1:A:27:GLN:H	1:A:25:VAL:HG12	3	0.15	0.03	0.14
(1,1782)	1:A:27:GLN:H	1:A:25:VAL:HG13	3	0.15	0.03	0.14
(1,187)	1:A:104:THR:H	1:A:103:ARG:HB2	3	0.13	0.02	0.11
(1,187)	1:A:104:THR:H	1:A:103:ARG:HB3	3	0.13	0.02	0.11
(1,188)	1:A:104:THR:H	1:A:103:ARG:HB2	3	0.13	0.02	0.11
(1,188)	1:A:104:THR:H	1:A:103:ARG:HB3	3	0.13	0.02	0.11
(1,542)	1:A:79:LYS:H	1:A:79:LYS:HD2	3	0.13	0.0	0.13
(1,542)	1:A:79:LYS:H	1:A:79:LYS:HD3	3	0.13	0.0	0.13
(1,852)	1:A:15:ASN:H	1:A:16:PHE:HB2	3	0.12	0.0	0.12
(1,852)	1:A:15:ASN:H	1:A:16:PHE:HB3	3	0.12	0.0	0.12
(1,1630)	1:A:113:VAL:HG11	1:A:126:TYR:HE1	3	0.12	0.02	0.11
(1,1630)	1:A:113:VAL:HG12	1:A:126:TYR:HE1	3	0.12	0.02	0.11
(1,1630)	1:A:113:VAL:HG13	1:A:126:TYR:HE1	3	0.12	0.02	0.11
(1,2057)	1:A:113:VAL:HG11	1:A:126:TYR:HE1	3	0.12	0.02	0.11
(1,2057)	1:A:113:VAL:HG12	1:A:126:TYR:HE1	3	0.12	0.02	0.11
(1,2057)	1:A:113:VAL:HG13	1:A:126:TYR:HE1	3	0.12	0.02	0.11
(1,2042)	1:A:93:SER:HB3	1:A:116:MET:HG3	2	1.12	0.12	1.12
(1,1905)	1:A:27:GLN:HA	1:A:30:ILE:HG12	2	0.81	0.13	0.81

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,1972)	1:A:27:GLN:HA	1:A:17:GLU:HA	2	0.72	0.06	0.72
(1,451)	1:A:35:SER:H	1:A:31:LYS:HA	2	0.57	0.04	0.57
(1,1956)	1:A:130:THR:HB	1:A:9:LYS:HB2	2	0.54	0.02	0.54
(1,1956)	1:A:130:THR:HB	1:A:9:LYS:HB3	2	0.54	0.02	0.54
(1,2064)	1:A:9:LYS:HB2	1:A:130:THR:HB	2	0.54	0.02	0.54
(1,2064)	1:A:9:LYS:HB3	1:A:130:THR:HB	2	0.54	0.02	0.54
(3,20)	1:A:19:TYR:H	1:A:15:ASN:O	2	0.53	0.09	0.53
(1,1974)	1:A:121:MET:HB2	1:A:19:TYR:HA	2	0.5	0.3	0.5
(1,2045)	1:A:19:TYR:HA	1:A:121:MET:HB2	2	0.5	0.3	0.5
(1,2041)	1:A:93:SER:HB2	1:A:116:MET:HG3	2	0.5	0.21	0.5
(1,1948)	1:A:44:VAL:HB	1:A:4:LEU:HB3	2	0.48	0.01	0.48
(1,1985)	1:A:10:LEU:HB2	1:A:38:VAL:HG21	2	0.48	0.09	0.48
(1,1985)	1:A:10:LEU:HB2	1:A:38:VAL:HG22	2	0.48	0.09	0.48
(1,1985)	1:A:10:LEU:HB2	1:A:38:VAL:HG23	2	0.48	0.09	0.48
(1,1779)	1:A:15:ASN:HD22	1:A:18:GLU:HB3	2	0.44	0.21	0.44
(1,1920)	1:A:42:ILE:HG13	1:A:44:VAL:HG11	2	0.43	0.04	0.43
(1,1920)	1:A:42:ILE:HG13	1:A:44:VAL:HG12	2	0.43	0.04	0.43
(1,1920)	1:A:42:ILE:HG13	1:A:44:VAL:HG13	2	0.43	0.04	0.43
(1,1769)	1:A:13:ASN:H	1:A:10:LEU:HD11	2	0.42	0.08	0.42
(1,1769)	1:A:13:ASN:H	1:A:10:LEU:HD12	2	0.42	0.08	0.42
(1,1769)	1:A:13:ASN:H	1:A:10:LEU:HD13	2	0.42	0.08	0.42
(1,1793)	1:A:87:SER:H	1:A:85:GLU:HG2	2	0.42	0.16	0.42
(1,1793)	1:A:87:SER:H	1:A:85:GLU:HG3	2	0.42	0.16	0.42
(1,186)	1:A:102:THR:H	1:A:102:THR:HG21	2	0.4	0.06	0.4
(1,186)	1:A:102:THR:H	1:A:102:THR:HG22	2	0.4	0.06	0.4
(1,186)	1:A:102:THR:H	1:A:102:THR:HG23	2	0.4	0.06	0.4
(1,369)	1:A:3:GLN:H	1:A:2:VAL:HG11	2	0.38	0.05	0.38
(1,369)	1:A:3:GLN:H	1:A:2:VAL:HG12	2	0.38	0.05	0.38
(1,369)	1:A:3:GLN:H	1:A:2:VAL:HG13	2	0.38	0.05	0.38
(1,377)	1:A:74:VAL:HG11	1:A:71:LEU:HB2	2	0.38	0.17	0.38
(1,377)	1:A:74:VAL:HG12	1:A:71:LEU:HB2	2	0.38	0.17	0.38
(1,377)	1:A:74:VAL:HG13	1:A:71:LEU:HB2	2	0.38	0.17	0.38
(1,2004)	1:A:93:SER:HB2	1:A:78:ILE:HG12	2	0.37	0.25	0.37
(1,1963)	1:A:125:ARG:HB2	1:A:10:LEU:HD21	2	0.36	0.24	0.36
(1,1963)	1:A:125:ARG:HB2	1:A:10:LEU:HD22	2	0.36	0.24	0.36
(1,1963)	1:A:125:ARG:HB2	1:A:10:LEU:HD23	2	0.36	0.24	0.36
(1,183)	1:A:99:ARG:H	1:A:99:ARG:HD2	2	0.36	0.12	0.36
(1,183)	1:A:99:ARG:H	1:A:99:ARG:HD3	2	0.36	0.12	0.36
(1,708)	1:A:43:ILE:HB	1:A:7:THR:HG21	2	0.35	0.13	0.35
(1,708)	1:A:43:ILE:HB	1:A:7:THR:HG22	2	0.35	0.13	0.35
(1,708)	1:A:43:ILE:HB	1:A:7:THR:HG23	2	0.35	0.13	0.35
(1,1737)	1:A:43:ILE:HG12	1:A:41:GLU:HB2	2	0.33	0.19	0.33

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,1737)	1:A:43:ILE:HG12	1:A:41:GLU:HB3	2	0.33	0.19	0.33
(1,1737)	1:A:43:ILE:HG13	1:A:41:GLU:HB2	2	0.33	0.19	0.33
(1,1737)	1:A:43:ILE:HG13	1:A:41:GLU:HB3	2	0.33	0.19	0.33
(1,1531)	1:A:130:THR:HB	1:A:7:THR:HB	2	0.32	0.2	0.32
(1,643)	1:A:126:TYR:HB2	1:A:12:LYS:HB2	2	0.3	0.1	0.3
(1,643)	1:A:126:TYR:HB2	1:A:12:LYS:HB3	2	0.3	0.1	0.3
(1,643)	1:A:126:TYR:HB3	1:A:12:LYS:HB2	2	0.3	0.1	0.3
(1,643)	1:A:126:TYR:HB3	1:A:12:LYS:HB3	2	0.3	0.1	0.3
(1,644)	1:A:126:TYR:HB2	1:A:12:LYS:HB2	2	0.3	0.1	0.3
(1,644)	1:A:126:TYR:HB2	1:A:12:LYS:HB3	2	0.3	0.1	0.3
(1,644)	1:A:126:TYR:HB3	1:A:12:LYS:HB2	2	0.3	0.1	0.3
(1,644)	1:A:126:TYR:HB3	1:A:12:LYS:HB3	2	0.3	0.1	0.3
(1,157)	1:A:85:GLU:H	1:A:86:GLY:H	2	0.3	0.05	0.3
(1,289)	1:A:92:ASN:HA	1:A:102:THR:HG21	2	0.3	0.05	0.3
(1,289)	1:A:92:ASN:HA	1:A:102:THR:HG22	2	0.3	0.05	0.3
(1,289)	1:A:92:ASN:HA	1:A:102:THR:HG23	2	0.3	0.05	0.3
(1,693)	1:A:61:LEU:HA	1:A:67:VAL:HG11	2	0.28	0.0	0.28
(1,693)	1:A:61:LEU:HA	1:A:67:VAL:HG12	2	0.28	0.0	0.28
(1,693)	1:A:61:LEU:HA	1:A:67:VAL:HG13	2	0.28	0.0	0.28
(1,693)	1:A:61:LEU:HA	1:A:67:VAL:HG21	2	0.28	0.0	0.28
(1,693)	1:A:61:LEU:HA	1:A:67:VAL:HG22	2	0.28	0.0	0.28
(1,693)	1:A:61:LEU:HA	1:A:67:VAL:HG23	2	0.28	0.0	0.28
(1,5)	1:A:5:ALA:H	1:A:4:LEU:HB2	2	0.26	0.02	0.26
(1,5)	1:A:5:ALA:H	1:A:4:LEU:HB3	2	0.26	0.02	0.26
(1,441)	1:A:29:SER:H	1:A:27:GLN:HA	2	0.26	0.06	0.26
(1,554)	1:A:84:LEU:H	1:A:83:LYS:HG2	2	0.26	0.01	0.26
(1,554)	1:A:84:LEU:H	1:A:83:LYS:HG3	2	0.26	0.01	0.26
(1,764)	1:A:12:LYS:HE2	1:A:126:TYR:HE1	2	0.24	0.1	0.24
(1,764)	1:A:12:LYS:HE3	1:A:126:TYR:HE1	2	0.24	0.1	0.24
(1,706)	1:A:65:GLU:HB2	1:A:62:ILE:HD11	2	0.24	0.03	0.24
(1,706)	1:A:65:GLU:HB2	1:A:62:ILE:HD12	2	0.24	0.03	0.24
(1,706)	1:A:65:GLU:HB2	1:A:62:ILE:HD13	2	0.24	0.03	0.24
(1,706)	1:A:65:GLU:HB3	1:A:62:ILE:HD11	2	0.24	0.03	0.24
(1,706)	1:A:65:GLU:HB3	1:A:62:ILE:HD12	2	0.24	0.03	0.24
(1,706)	1:A:65:GLU:HB3	1:A:62:ILE:HD13	2	0.24	0.03	0.24
(1,268)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:28:ASP:HA	2	0.24	0.11	0.24
(1,268)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:28:ASP:HA	2	0.24	0.11	0.24
(1,269)	1:A:28:ASP:HA	1:A:31:LYS:HB2	2	0.24	0.11	0.24
(1,269)	1:A:28:ASP:HA	1:A:31:LYS:HB3	2	0.24	0.11	0.24
(1,386)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:28:ASP:HA	2	0.24	0.11	0.24
(1,386)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:28:ASP:HA	2	0.24	0.11	0.24
(1,140)	1:A:73:THR:H	1:A:73:THR:HB	2	0.24	0.0	0.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,1632)	1:A:9:LYS:HA	1:A:127:PHE:HD1	2	0.22	0.02	0.22
(1,1632)	1:A:9:LYS:HA	1:A:127:PHE:HD2	2	0.22	0.02	0.22
(1,757)	1:A:61:LEU:HD21	1:A:89:LEU:HD11	2	0.22	0.04	0.22
(1,757)	1:A:61:LEU:HD21	1:A:89:LEU:HD12	2	0.22	0.04	0.22
(1,757)	1:A:61:LEU:HD21	1:A:89:LEU:HD13	2	0.22	0.04	0.22
(1,757)	1:A:61:LEU:HD21	1:A:89:LEU:HD21	2	0.22	0.04	0.22
(1,757)	1:A:61:LEU:HD21	1:A:89:LEU:HD22	2	0.22	0.04	0.22
(1,757)	1:A:61:LEU:HD21	1:A:89:LEU:HD23	2	0.22	0.04	0.22
(1,757)	1:A:61:LEU:HD22	1:A:89:LEU:HD11	2	0.22	0.04	0.22
(1,757)	1:A:61:LEU:HD22	1:A:89:LEU:HD12	2	0.22	0.04	0.22
(1,757)	1:A:61:LEU:HD22	1:A:89:LEU:HD13	2	0.22	0.04	0.22
(1,757)	1:A:61:LEU:HD22	1:A:89:LEU:HD21	2	0.22	0.04	0.22
(1,757)	1:A:61:LEU:HD22	1:A:89:LEU:HD22	2	0.22	0.04	0.22
(1,757)	1:A:61:LEU:HD22	1:A:89:LEU:HD23	2	0.22	0.04	0.22
(1,757)	1:A:61:LEU:HD23	1:A:89:LEU:HD11	2	0.22	0.04	0.22
(1,757)	1:A:61:LEU:HD23	1:A:89:LEU:HD12	2	0.22	0.04	0.22
(1,757)	1:A:61:LEU:HD23	1:A:89:LEU:HD13	2	0.22	0.04	0.22
(1,757)	1:A:61:LEU:HD23	1:A:89:LEU:HD21	2	0.22	0.04	0.22
(1,757)	1:A:61:LEU:HD23	1:A:89:LEU:HD22	2	0.22	0.04	0.22
(1,757)	1:A:61:LEU:HD23	1:A:89:LEU:HD23	2	0.22	0.04	0.22
(1,356)	1:A:63:VAL:H	1:A:62:ILE:HA	2	0.21	0.06	0.21
(1,348)	1:A:116:MET:HA	1:A:103:ARG:HG2	2	0.2	0.06	0.2
(1,348)	1:A:116:MET:HA	1:A:103:ARG:HG3	2	0.2	0.06	0.2
(1,1823)	1:A:34:ASN:HD22	1:A:71:LEU:HB2	2	0.2	0.03	0.2
(1,583)	1:A:101:GLY:H	1:A:93:SER:HB2	2	0.2	0.03	0.2
(1,583)	1:A:101:GLY:H	1:A:93:SER:HB3	2	0.2	0.03	0.2
(1,1494)	1:A:124:LYS:H	1:A:124:LYS:HE2	2	0.2	0.01	0.2
(1,1494)	1:A:124:LYS:H	1:A:124:LYS:HE3	2	0.2	0.01	0.2
(1,265)	1:A:130:THR:H	1:A:130:THR:HG21	2	0.18	0.05	0.18
(1,265)	1:A:130:THR:H	1:A:130:THR:HG22	2	0.18	0.05	0.18
(1,265)	1:A:130:THR:H	1:A:130:THR:HG23	2	0.18	0.05	0.18
(1,1352)	1:A:98:GLY:H	1:A:95:LEU:HD11	2	0.18	0.06	0.18
(1,1352)	1:A:98:GLY:H	1:A:95:LEU:HD12	2	0.18	0.06	0.18
(1,1352)	1:A:98:GLY:H	1:A:95:LEU:HD13	2	0.18	0.06	0.18
(1,1352)	1:A:98:GLY:H	1:A:95:LEU:HD21	2	0.18	0.06	0.18
(1,1352)	1:A:98:GLY:H	1:A:95:LEU:HD22	2	0.18	0.06	0.18
(1,1352)	1:A:98:GLY:H	1:A:95:LEU:HD23	2	0.18	0.06	0.18
(1,1703)	1:A:104:THR:H	1:A:115:THR:HB	2	0.18	0.04	0.18
(1,25)	1:A:128:ILE:H	1:A:11:GLU:HG2	2	0.18	0.06	0.18
(1,25)	1:A:128:ILE:H	1:A:11:GLU:HG3	2	0.18	0.06	0.18
(1,883)	1:A:19:TYR:H	1:A:20:LEU:HD11	2	0.17	0.04	0.17
(1,883)	1:A:19:TYR:H	1:A:20:LEU:HD12	2	0.17	0.04	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

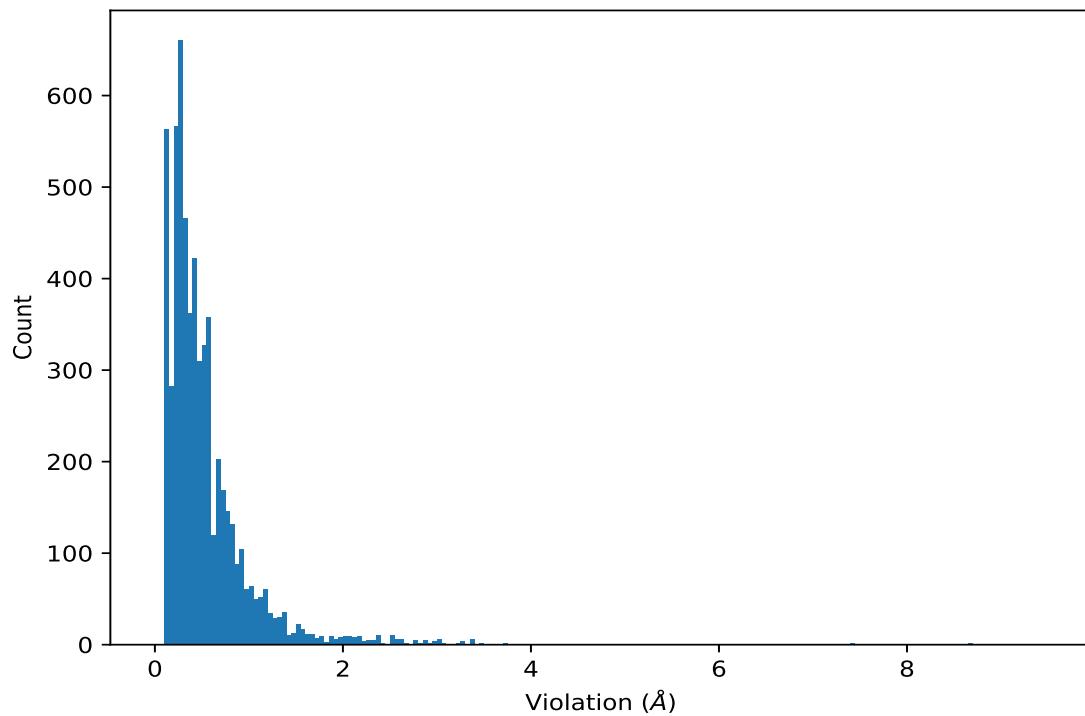
Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,883)	1:A:19:TYR:H	1:A:20:LEU:HD13	2	0.17	0.04	0.17
(1,883)	1:A:19:TYR:H	1:A:20:LEU:HD21	2	0.17	0.04	0.17
(1,883)	1:A:19:TYR:H	1:A:20:LEU:HD22	2	0.17	0.04	0.17
(1,883)	1:A:19:TYR:H	1:A:20:LEU:HD23	2	0.17	0.04	0.17
(1,1645)	1:A:14:GLU:H	1:A:124:LYS:HB2	2	0.17	0.05	0.17
(1,1645)	1:A:14:GLU:H	1:A:124:LYS:HB3	2	0.17	0.05	0.17
(1,1646)	1:A:14:GLU:H	1:A:124:LYS:HB2	2	0.17	0.05	0.17
(1,1646)	1:A:14:GLU:H	1:A:124:LYS:HB3	2	0.17	0.05	0.17
(1,1706)	1:A:77:ASN:H	1:A:96:PRO:HG2	2	0.16	0.03	0.16
(1,1706)	1:A:77:ASN:H	1:A:96:PRO:HG3	2	0.16	0.03	0.16
(1,1036)	1:A:50:THR:H	1:A:43:ILE:HB	2	0.16	0.05	0.16
(1,1934)	1:A:99:ARG:HA	1:A:95:LEU:HD21	2	0.16	0.04	0.16
(1,1934)	1:A:99:ARG:HA	1:A:95:LEU:HD22	2	0.16	0.04	0.16
(1,1934)	1:A:99:ARG:HA	1:A:95:LEU:HD23	2	0.16	0.04	0.16
(1,135)	1:A:66:GLU:H	1:A:65:GLU:HB2	2	0.14	0.03	0.14
(1,135)	1:A:66:GLU:H	1:A:65:GLU:HB3	2	0.14	0.03	0.14
(1,1168)	1:A:66:GLU:H	1:A:65:GLU:HB2	2	0.14	0.03	0.14
(1,1168)	1:A:66:GLU:H	1:A:65:GLU:HB3	2	0.14	0.03	0.14
(3,61)	1:A:116:MET:N	1:A:123:ALA:O	2	0.14	0.01	0.14
(1,553)	1:A:83:LYS:H	1:A:83:LYS:HG2	2	0.12	0.01	0.12
(1,553)	1:A:83:LYS:H	1:A:83:LYS:HG3	2	0.12	0.01	0.12
(1,722)	1:A:5:ALA:H	1:A:3:GLN:HG2	2	0.12	0.01	0.12
(1,722)	1:A:5:ALA:H	1:A:3:GLN:HG3	2	0.12	0.01	0.12

¹Number of violated models, ²Standard deviation

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

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

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



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

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

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1982)	1:A:37:GLY:HA3	1:A:31:LYS:HG2	4	9.49
(1,1982)	1:A:37:GLY:HA3	1:A:31:LYS:HG2	5	8.7
(1,1982)	1:A:37:GLY:HA3	1:A:31:LYS:HG2	7	8.66
(1,1982)	1:A:37:GLY:HA3	1:A:31:LYS:HG2	8	7.92
(1,1982)	1:A:37:GLY:HA3	1:A:31:LYS:HG2	9	7.78
(1,1982)	1:A:37:GLY:HA3	1:A:31:LYS:HG2	10	7.71
(1,1982)	1:A:37:GLY:HA3	1:A:31:LYS:HG2	2	7.52
(1,1982)	1:A:37:GLY:HA3	1:A:31:LYS:HG2	6	7.43
(1,1982)	1:A:37:GLY:HA3	1:A:31:LYS:HG2	3	7.41
(1,1982)	1:A:37:GLY:HA3	1:A:31:LYS:HG2	1	7.22
(1,1960)	1:A:125:ARG:HB2	1:A:10:LEU:HB3	8	4.88
(1,1979)	1:A:75:ASN:HB3	1:A:29:SER:HB3	4	4.57
(1,1979)	1:A:75:ASN:HB3	1:A:29:SER:HB3	3	4.44
(1,1979)	1:A:75:ASN:HB3	1:A:29:SER:HB3	7	4.16
(1,1960)	1:A:125:ARG:HB2	1:A:10:LEU:HB3	9	4.05
(1,1979)	1:A:75:ASN:HB3	1:A:29:SER:HB3	5	4.03

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,746)	1:A:75:ASN:HB2	1:A:29:SER:HB3	4	3.78
(1,1979)	1:A:75:ASN:HB3	1:A:29:SER:HB3	8	3.72
(1,1979)	1:A:75:ASN:HB3	1:A:29:SER:HB3	10	3.71
(1,746)	1:A:75:ASN:HB2	1:A:29:SER:HB3	3	3.64
(1,746)	1:A:75:ASN:HB2	1:A:29:SER:HB3	7	3.48
(1,1979)	1:A:75:ASN:HB3	1:A:29:SER:HB3	2	3.47
(1,1960)	1:A:125:ARG:HB2	1:A:10:LEU:HB3	2	3.38
(1,393)	1:A:77:ASN:HB2	1:A:96:PRO:HG3	4	3.37
(1,393)	1:A:77:ASN:HB3	1:A:96:PRO:HG3	4	3.37
(1,379)	1:A:48:LYS:HG3	1:A:2:VAL:HG11	8	3.35
(1,379)	1:A:48:LYS:HG3	1:A:2:VAL:HG12	8	3.35
(1,379)	1:A:48:LYS:HG3	1:A:2:VAL:HG13	8	3.35
(1,746)	1:A:75:ASN:HB2	1:A:29:SER:HB3	5	3.29
(1,1960)	1:A:125:ARG:HB2	1:A:10:LEU:HB3	4	3.27
(1,393)	1:A:77:ASN:HB2	1:A:96:PRO:HG3	5	3.26
(1,393)	1:A:77:ASN:HB3	1:A:96:PRO:HG3	5	3.26
(1,1960)	1:A:125:ARG:HB2	1:A:10:LEU:HB3	10	3.24
(1,388)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:63:VAL:HB	1	3.23
(1,1904)	1:A:34:ASN:HB3	1:A:30:ILE:HB	3	3.14
(1,388)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:63:VAL:HB	6	3.09
(1,1960)	1:A:125:ARG:HB2	1:A:10:LEU:HB3	3	3.06
(1,393)	1:A:77:ASN:HB2	1:A:96:PRO:HG3	1	3.05
(1,393)	1:A:77:ASN:HB3	1:A:96:PRO:HG3	1	3.05
(1,1979)	1:A:75:ASN:HB3	1:A:29:SER:HB3	9	3.04
(1,388)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:63:VAL:HB	8	3.03
(1,393)	1:A:77:ASN:HB2	1:A:96:PRO:HG3	8	3.02
(1,393)	1:A:77:ASN:HB3	1:A:96:PRO:HG3	8	3.02
(1,393)	1:A:77:ASN:HB2	1:A:96:PRO:HG3	10	2.98
(1,393)	1:A:77:ASN:HB3	1:A:96:PRO:HG3	10	2.98
(1,388)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:63:VAL:HB	10	2.97
(1,388)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:63:VAL:HB	9	2.96
(1,388)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:63:VAL:HB	3	2.94
(1,746)	1:A:75:ASN:HB2	1:A:29:SER:HB3	9	2.93
(1,1904)	1:A:34:ASN:HB3	1:A:30:ILE:HB	8	2.89
(1,746)	1:A:75:ASN:HB2	1:A:29:SER:HB3	8	2.88
(1,746)	1:A:75:ASN:HB2	1:A:29:SER:HB3	10	2.87
(1,388)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:63:VAL:HB	7	2.87
(1,1904)	1:A:34:ASN:HB3	1:A:30:ILE:HB	5	2.87
(1,393)	1:A:77:ASN:HB2	1:A:96:PRO:HG3	7	2.81
(1,393)	1:A:77:ASN:HB3	1:A:96:PRO:HG3	7	2.81
(1,379)	1:A:48:LYS:HG3	1:A:2:VAL:HG11	3	2.79
(1,379)	1:A:48:LYS:HG3	1:A:2:VAL:HG12	3	2.79

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,379)	1:A:48:LYS:HG3	1:A:2:VAL:HG13	3	2.79
(1,1960)	1:A:125:ARG:HB2	1:A:10:LEU:HB3	6	2.79
(1,746)	1:A:75:ASN:HB2	1:A:29:SER:HB3	2	2.75
(1,1904)	1:A:34:ASN:HB3	1:A:30:ILE:HB	10	2.69
(1,2050)	1:A:12:LYS:HD3	1:A:126:TYR:HD1	6	2.68
(1,2027)	1:A:77:ASN:HA	1:A:96:PRO:HG3	4	2.63
(1,1904)	1:A:34:ASN:HB3	1:A:30:ILE:HB	4	2.63
(1,2050)	1:A:12:LYS:HD3	1:A:126:TYR:HD1	9	2.62
(1,379)	1:A:48:LYS:HG3	1:A:2:VAL:HG11	2	2.6
(1,379)	1:A:48:LYS:HG3	1:A:2:VAL:HG12	2	2.6
(1,379)	1:A:48:LYS:HG3	1:A:2:VAL:HG13	2	2.6
(1,379)	1:A:48:LYS:HG3	1:A:2:VAL:HG11	4	2.59
(1,379)	1:A:48:LYS:HG3	1:A:2:VAL:HG12	4	2.59
(1,379)	1:A:48:LYS:HG3	1:A:2:VAL:HG13	4	2.59
(1,2050)	1:A:12:LYS:HD3	1:A:126:TYR:HD1	8	2.58
(1,1968)	1:A:124:LYS:HB3	1:A:14:GLU:HB3	9	2.57
(1,2050)	1:A:12:LYS:HD3	1:A:126:TYR:HD1	4	2.56
(1,379)	1:A:48:LYS:HG3	1:A:2:VAL:HG11	9	2.55
(1,379)	1:A:48:LYS:HG3	1:A:2:VAL:HG12	9	2.55
(1,379)	1:A:48:LYS:HG3	1:A:2:VAL:HG13	9	2.55
(1,393)	1:A:77:ASN:HB2	1:A:96:PRO:HG3	6	2.52
(1,393)	1:A:77:ASN:HB3	1:A:96:PRO:HG3	6	2.52
(1,393)	1:A:77:ASN:HB2	1:A:96:PRO:HG3	9	2.52
(1,393)	1:A:77:ASN:HB3	1:A:96:PRO:HG3	9	2.52
(1,2050)	1:A:12:LYS:HD3	1:A:126:TYR:HD1	2	2.52
(1,1904)	1:A:34:ASN:HB3	1:A:30:ILE:HB	6	2.51
(1,388)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:63:VAL:HB	5	2.5
(1,1960)	1:A:125:ARG:HB2	1:A:10:LEU:HB3	5	2.43
(1,1904)	1:A:34:ASN:HB3	1:A:30:ILE:HB	1	2.41
(1,2063)	1:A:111:GLY:HA3	1:A:129:ARG:HG2	8	2.38
(1,2063)	1:A:111:GLY:HA3	1:A:129:ARG:HG3	8	2.38
(1,379)	1:A:48:LYS:HG3	1:A:2:VAL:HG11	1	2.37
(1,379)	1:A:48:LYS:HG3	1:A:2:VAL:HG12	1	2.37
(1,379)	1:A:48:LYS:HG3	1:A:2:VAL:HG13	1	2.37
(1,1968)	1:A:124:LYS:HB3	1:A:14:GLU:HB3	8	2.37
(1,2027)	1:A:77:ASN:HA	1:A:96:PRO:HG3	5	2.36
(1,1979)	1:A:75:ASN:HB3	1:A:29:SER:HB3	6	2.36
(1,1969)	1:A:124:LYS:HE2	1:A:14:GLU:HB3	4	2.36
(1,1969)	1:A:124:LYS:HE3	1:A:14:GLU:HB3	4	2.36
(1,1924)	1:A:65:GLU:HB3	1:A:67:VAL:HG21	2	2.34
(1,1924)	1:A:65:GLU:HB3	1:A:67:VAL:HG22	2	2.34
(1,1924)	1:A:65:GLU:HB3	1:A:67:VAL:HG23	2	2.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,388)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:63:VAL:HB	4	2.32
(1,2027)	1:A:77:ASN:HA	1:A:96:PRO:HG3	8	2.32
(1,388)	1:A:49:PHE:HB3	1:A:63:VAL:HB	2	2.3
(1,393)	1:A:77:ASN:HB2	1:A:96:PRO:HG3	3	2.28
(1,393)	1:A:77:ASN:HB3	1:A:96:PRO:HG3	3	2.28
(1,393)	1:A:77:ASN:HB2	1:A:96:PRO:HG3	2	2.25
(1,393)	1:A:77:ASN:HB3	1:A:96:PRO:HG3	2	2.25
(1,2027)	1:A:77:ASN:HA	1:A:96:PRO:HG3	6	2.21
(1,1969)	1:A:124:LYS:HE2	1:A:14:GLU:HB3	2	2.2
(1,1969)	1:A:124:LYS:HE3	1:A:14:GLU:HB3	2	2.2
(1,1968)	1:A:124:LYS:HB3	1:A:14:GLU:HB3	1	2.2
(1,2050)	1:A:12:LYS:HD3	1:A:126:TYR:HD1	3	2.19
(1,1968)	1:A:124:LYS:HB3	1:A:14:GLU:HB3	7	2.19
(1,2027)	1:A:77:ASN:HA	1:A:96:PRO:HG3	1	2.18
(1,2027)	1:A:77:ASN:HA	1:A:96:PRO:HG3	7	2.18
(1,2027)	1:A:77:ASN:HA	1:A:96:PRO:HG3	10	2.16
(1,1968)	1:A:124:LYS:HB3	1:A:14:GLU:HB3	5	2.16
(1,1924)	1:A:65:GLU:HB3	1:A:67:VAL:HG21	5	2.15
(1,1924)	1:A:65:GLU:HB3	1:A:67:VAL:HG22	5	2.15
(1,1924)	1:A:65:GLU:HB3	1:A:67:VAL:HG23	5	2.15
(1,2063)	1:A:111:GLY:HA3	1:A:129:ARG:HG2	3	2.13
(1,2063)	1:A:111:GLY:HA3	1:A:129:ARG:HG3	3	2.13
(1,2062)	1:A:111:GLY:HA3	1:A:129:ARG:HB2	8	2.12
(1,2062)	1:A:111:GLY:HA3	1:A:129:ARG:HB3	8	2.12
(1,1968)	1:A:124:LYS:HB3	1:A:14:GLU:HB3	4	2.12
(1,1904)	1:A:34:ASN:HB3	1:A:30:ILE:HB	7	2.12
(1,2050)	1:A:12:LYS:HD3	1:A:126:TYR:HD1	1	2.11
(1,1904)	1:A:34:ASN:HB3	1:A:30:ILE:HB	9	2.1
(1,2062)	1:A:111:GLY:HA3	1:A:129:ARG:HB2	2	2.08
(1,2062)	1:A:111:GLY:HA3	1:A:129:ARG:HB3	2	2.08
(1,1969)	1:A:124:LYS:HE2	1:A:14:GLU:HB3	9	2.07
(1,1969)	1:A:124:LYS:HE3	1:A:14:GLU:HB3	9	2.07
(1,209)	1:A:112:PHE:H	1:A:113:VAL:HA	9	2.06
(1,2027)	1:A:77:ASN:HA	1:A:96:PRO:HG3	2	2.06
(1,2027)	1:A:77:ASN:HA	1:A:96:PRO:HG3	9	2.06
(1,1969)	1:A:124:LYS:HE2	1:A:14:GLU:HB3	3	2.06
(1,1969)	1:A:124:LYS:HE3	1:A:14:GLU:HB3	3	2.06
(1,2063)	1:A:111:GLY:HA3	1:A:129:ARG:HG2	4	2.05
(1,2063)	1:A:111:GLY:HA3	1:A:129:ARG:HG3	4	2.05
(1,2062)	1:A:111:GLY:HA3	1:A:129:ARG:HB2	9	2.03
(1,2062)	1:A:111:GLY:HA3	1:A:129:ARG:HB3	9	2.03
(1,2063)	1:A:111:GLY:HA3	1:A:129:ARG:HG2	5	2.02

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2063)	1:A:111:GLY:HA3	1:A:129:ARG:HG3	5	2.02
(1,1924)	1:A:65:GLU:HB3	1:A:67:VAL:HG21	8	2.01
(1,1924)	1:A:65:GLU:HB3	1:A:67:VAL:HG22	8	2.01
(1,1924)	1:A:65:GLU:HB3	1:A:67:VAL:HG23	8	2.01
(1,209)	1:A:112:PHE:H	1:A:113:VAL:HA	1	1.99
(1,791)	1:A:129:ARG:H	1:A:7:THR:HA	1	1.97
(1,379)	1:A:48:LYS:HG3	1:A:2:VAL:HG11	5	1.97
(1,379)	1:A:48:LYS:HG3	1:A:2:VAL:HG12	5	1.97
(1,379)	1:A:48:LYS:HG3	1:A:2:VAL:HG13	5	1.97
(1,2050)	1:A:12:LYS:HD3	1:A:126:TYR:HD1	5	1.97
(1,2027)	1:A:77:ASN:HA	1:A:96:PRO:HG3	3	1.96
(1,1210)	1:A:72:GLY:H	1:A:74:VAL:HB	10	1.96
(1,379)	1:A:48:LYS:HG3	1:A:2:VAL:HG11	10	1.93
(1,379)	1:A:48:LYS:HG3	1:A:2:VAL:HG12	10	1.93
(1,379)	1:A:48:LYS:HG3	1:A:2:VAL:HG13	10	1.93
(1,1969)	1:A:124:LYS:HE2	1:A:14:GLU:HB3	5	1.91
(1,1969)	1:A:124:LYS:HE3	1:A:14:GLU:HB3	5	1.91
(1,1960)	1:A:125:ARG:HB2	1:A:10:LEU:HB3	7	1.91
(1,1969)	1:A:124:LYS:HE2	1:A:14:GLU:HB3	8	1.9
(1,1969)	1:A:124:LYS:HE3	1:A:14:GLU:HB3	8	1.9
(1,759)	1:A:78:ILE:HB	1:A:93:SER:HB3	2	1.87
(1,1993)	1:A:82:THR:HB	1:A:61:LEU:HB3	5	1.87
(1,1966)	1:A:123:ALA:HA	1:A:14:GLU:HB3	4	1.87
(1,1960)	1:A:125:ARG:HB2	1:A:10:LEU:HB3	1	1.87
(1,759)	1:A:78:ILE:HB	1:A:93:SER:HB3	8	1.85
(1,2062)	1:A:111:GLY:HA3	1:A:129:ARG:HB2	5	1.85
(1,2062)	1:A:111:GLY:HA3	1:A:129:ARG:HB3	5	1.85
(1,1968)	1:A:124:LYS:HB3	1:A:14:GLU:HB3	10	1.82
(1,2062)	1:A:111:GLY:HA3	1:A:129:ARG:HB2	7	1.8
(1,2062)	1:A:111:GLY:HA3	1:A:129:ARG:HB3	7	1.8
(1,1993)	1:A:82:THR:HB	1:A:61:LEU:HB3	1	1.79
(1,1993)	1:A:82:THR:HB	1:A:61:LEU:HB3	4	1.79
(1,791)	1:A:129:ARG:H	1:A:7:THR:HA	3	1.78
(1,74)	1:A:34:ASN:H	1:A:32:LYS:H	6	1.77
(1,1973)	1:A:121:MET:HB2	1:A:18:GLU:HG3	1	1.77
(1,209)	1:A:112:PHE:H	1:A:113:VAL:HA	2	1.76
(1,2063)	1:A:111:GLY:HA3	1:A:129:ARG:HG2	6	1.76
(1,2063)	1:A:111:GLY:HA3	1:A:129:ARG:HG3	6	1.76
(1,1904)	1:A:34:ASN:HB3	1:A:30:ILE:HB	2	1.76
(1,1942)	1:A:124:LYS:HB3	1:A:126:TYR:HE1	8	1.73
(1,791)	1:A:129:ARG:H	1:A:7:THR:HA	10	1.71
(1,742)	1:A:114:LEU:HG	1:A:13:ASN:HD22	1	1.71

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2046)	1:A:14:GLU:HB3	1:A:123:ALA:HB1	4	1.71
(1,2046)	1:A:14:GLU:HB3	1:A:123:ALA:HB2	4	1.71
(1,2046)	1:A:14:GLU:HB3	1:A:123:ALA:HB3	4	1.71
(1,1778)	1:A:15:ASN:H	1:A:18:GLU:HB3	3	1.71
(1,62)	1:A:32:LYS:H	1:A:30:ILE:HG21	6	1.7
(1,62)	1:A:32:LYS:H	1:A:30:ILE:HG22	6	1.7
(1,62)	1:A:32:LYS:H	1:A:30:ILE:HG23	6	1.7
(1,2046)	1:A:14:GLU:HB3	1:A:123:ALA:HB1	1	1.7
(1,2046)	1:A:14:GLU:HB3	1:A:123:ALA:HB2	1	1.7
(1,2046)	1:A:14:GLU:HB3	1:A:123:ALA:HB3	1	1.7
(1,1993)	1:A:82:THR:HB	1:A:61:LEU:HB3	6	1.7
(1,1966)	1:A:123:ALA:HA	1:A:14:GLU:HB3	2	1.7
(1,791)	1:A:129:ARG:H	1:A:7:THR:HA	8	1.69
(1,1993)	1:A:82:THR:HB	1:A:61:LEU:HB3	10	1.69
(1,1966)	1:A:123:ALA:HA	1:A:14:GLU:HB3	10	1.66
(1,209)	1:A:112:PHE:H	1:A:113:VAL:HA	6	1.64
(1,791)	1:A:129:ARG:H	1:A:7:THR:HA	6	1.62
(1,47)	1:A:19:TYR:H	1:A:19:TYR:HE1	1	1.62
(1,1969)	1:A:124:LYS:HE2	1:A:14:GLU:HB3	10	1.62
(1,1969)	1:A:124:LYS:HE3	1:A:14:GLU:HB3	10	1.62
(1,350)	1:A:124:LYS:H	1:A:15:ASN:HA	7	1.61
(1,1978)	1:A:74:VAL:HG21	1:A:29:SER:HB3	9	1.61
(1,1978)	1:A:74:VAL:HG22	1:A:29:SER:HB3	9	1.61
(1,1978)	1:A:74:VAL:HG23	1:A:29:SER:HB3	9	1.61
(1,1966)	1:A:123:ALA:HA	1:A:14:GLU:HB3	5	1.61
(1,350)	1:A:124:LYS:H	1:A:15:ASN:HA	6	1.6
(1,759)	1:A:78:ILE:HB	1:A:93:SER:HB3	6	1.59
(1,2062)	1:A:111:GLY:HA3	1:A:129:ARG:HB2	6	1.59
(1,2062)	1:A:111:GLY:HA3	1:A:129:ARG:HB3	6	1.59
(1,1966)	1:A:123:ALA:HA	1:A:14:GLU:HB3	9	1.59
(1,1921)	1:A:48:LYS:HD2	1:A:45:ASN:HB3	7	1.58
(1,1921)	1:A:48:LYS:HD3	1:A:45:ASN:HB3	7	1.58
(1,350)	1:A:124:LYS:H	1:A:15:ASN:HA	8	1.57
(1,350)	1:A:124:LYS:H	1:A:15:ASN:HA	10	1.57
(1,2023)	1:A:78:ILE:HG13	1:A:93:SER:HB3	8	1.57
(1,1993)	1:A:82:THR:HB	1:A:61:LEU:HB3	9	1.57
(1,1973)	1:A:121:MET:HB2	1:A:18:GLU:HG3	9	1.57
(1,746)	1:A:75:ASN:HB2	1:A:29:SER:HB3	6	1.56
(1,2062)	1:A:111:GLY:HA3	1:A:129:ARG:HB2	4	1.55
(1,2062)	1:A:111:GLY:HA3	1:A:129:ARG:HB3	4	1.55
(1,2046)	1:A:14:GLU:HB3	1:A:123:ALA:HB1	5	1.55
(1,2046)	1:A:14:GLU:HB3	1:A:123:ALA:HB2	5	1.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2046)	1:A:14:GLU:HB3	1:A:123:ALA:HB3	5	1.55
(1,791)	1:A:129:ARG:H	1:A:7:THR:HA	5	1.54
(1,2026)	1:A:78:ILE:HG13	1:A:96:PRO:HD2	4	1.54
(1,1210)	1:A:72:GLY:H	1:A:74:VAL:HB	4	1.54
(1,743)	1:A:121:MET:HB3	1:A:18:GLU:HG3	1	1.52
(1,742)	1:A:114:LEU:HG	1:A:13:ASN:HD22	8	1.52
(1,373)	1:A:76:MET:H	1:A:71:LEU:HD11	8	1.52
(1,373)	1:A:76:MET:H	1:A:71:LEU:HD12	8	1.52
(1,373)	1:A:76:MET:H	1:A:71:LEU:HD13	8	1.52
(1,2062)	1:A:111:GLY:HA3	1:A:129:ARG:HB2	1	1.52
(1,2062)	1:A:111:GLY:HA3	1:A:129:ARG:HB3	1	1.52
(1,47)	1:A:19:TYR:H	1:A:19:TYR:HE1	3	1.51
(1,2002)	1:A:34:ASN:HB3	1:A:74:VAL:HG11	3	1.51
(1,2002)	1:A:34:ASN:HB3	1:A:74:VAL:HG12	3	1.51
(1,2002)	1:A:34:ASN:HB3	1:A:74:VAL:HG13	3	1.51
(1,1957)	1:A:114:LEU:HD21	1:A:10:LEU:HA	6	1.51
(1,1957)	1:A:114:LEU:HD22	1:A:10:LEU:HA	6	1.51
(1,1957)	1:A:114:LEU:HD23	1:A:10:LEU:HA	6	1.51
(1,791)	1:A:129:ARG:H	1:A:7:THR:HA	2	1.5
(1,1805)	1:A:128:ILE:H	1:A:10:LEU:HD21	7	1.5
(1,1805)	1:A:128:ILE:H	1:A:10:LEU:HD22	7	1.5
(1,1805)	1:A:128:ILE:H	1:A:10:LEU:HD23	7	1.5
(1,1210)	1:A:72:GLY:H	1:A:74:VAL:HB	5	1.5
(1,22)	1:A:11:GLU:H	1:A:10:LEU:HG	3	1.49
(1,1993)	1:A:82:THR:HB	1:A:61:LEU:HB3	8	1.49
(1,1968)	1:A:124:LYS:HB3	1:A:14:GLU:HB3	6	1.49
(1,1942)	1:A:124:LYS:HB3	1:A:126:TYR:HE1	7	1.49
(1,2046)	1:A:14:GLU:HB3	1:A:123:ALA:HB1	10	1.48
(1,2046)	1:A:14:GLU:HB3	1:A:123:ALA:HB2	10	1.48
(1,2046)	1:A:14:GLU:HB3	1:A:123:ALA:HB3	10	1.48
(1,791)	1:A:129:ARG:H	1:A:7:THR:HA	4	1.47
(1,1966)	1:A:123:ALA:HA	1:A:14:GLU:HB3	1	1.47
(1,791)	1:A:129:ARG:H	1:A:7:THR:HA	9	1.46
(1,379)	1:A:48:LYS:HG3	1:A:2:VAL:HG11	6	1.46
(1,379)	1:A:48:LYS:HG3	1:A:2:VAL:HG12	6	1.46
(1,379)	1:A:48:LYS:HG3	1:A:2:VAL:HG13	6	1.46
(1,74)	1:A:34:ASN:H	1:A:32:LYS:H	5	1.45
(1,1210)	1:A:72:GLY:H	1:A:74:VAL:HB	7	1.45
(1,209)	1:A:112:PHE:H	1:A:113:VAL:HA	8	1.44
(1,742)	1:A:114:LEU:HG	1:A:13:ASN:HD22	10	1.43
(1,350)	1:A:124:LYS:H	1:A:15:ASN:HA	9	1.43
(1,1968)	1:A:124:LYS:HB3	1:A:14:GLU:HB3	3	1.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,350)	1:A:124:LYS:H	1:A:15:ASN:HA	2	1.41
(1,2046)	1:A:14:GLU:HB3	1:A:123:ALA:HB1	2	1.41
(1,2046)	1:A:14:GLU:HB3	1:A:123:ALA:HB2	2	1.41
(1,2046)	1:A:14:GLU:HB3	1:A:123:ALA:HB3	2	1.41
(1,74)	1:A:34:ASN:H	1:A:32:LYS:H	2	1.4
(1,1979)	1:A:75:ASN:HB3	1:A:29:SER:HB3	1	1.4
(1,791)	1:A:129:ARG:H	1:A:7:THR:HA	7	1.39
(1,73)	1:A:30:ILE:H	1:A:32:LYS:H	6	1.39
(1,350)	1:A:124:LYS:H	1:A:15:ASN:HA	5	1.39
(1,256)	1:A:128:ILE:H	1:A:127:PHE:H	10	1.39
(1,21)	1:A:10:LEU:H	1:A:10:LEU:HG	2	1.39
(1,2062)	1:A:111:GLY:HA3	1:A:129:ARG:HB2	10	1.39
(1,2062)	1:A:111:GLY:HA3	1:A:129:ARG:HB3	10	1.39
(1,2046)	1:A:14:GLU:HB3	1:A:123:ALA:HB1	9	1.39
(1,2046)	1:A:14:GLU:HB3	1:A:123:ALA:HB2	9	1.39
(1,2046)	1:A:14:GLU:HB3	1:A:123:ALA:HB3	9	1.39
(1,1805)	1:A:128:ILE:H	1:A:10:LEU:HD21	1	1.39
(1,1805)	1:A:128:ILE:H	1:A:10:LEU:HD22	1	1.39
(1,1805)	1:A:128:ILE:H	1:A:10:LEU:HD23	1	1.39
(1,261)	1:A:112:PHE:H	1:A:128:ILE:HG12	1	1.38
(1,261)	1:A:112:PHE:H	1:A:128:ILE:HG13	1	1.38
(1,1966)	1:A:123:ALA:HA	1:A:14:GLU:HB3	8	1.37
(1,1892)	1:A:18:GLU:HG3	1:A:22:ALA:HB1	1	1.37
(1,1892)	1:A:18:GLU:HG3	1:A:22:ALA:HB2	1	1.37
(1,1892)	1:A:18:GLU:HG3	1:A:22:ALA:HB3	1	1.37
(1,1886)	1:A:22:ALA:HB1	1:A:18:GLU:HG3	1	1.37
(1,1886)	1:A:22:ALA:HB2	1:A:18:GLU:HG3	1	1.37
(1,1886)	1:A:22:ALA:HB3	1:A:18:GLU:HG3	1	1.37
(1,1778)	1:A:15:ASN:H	1:A:18:GLU:HB3	4	1.37
(1,22)	1:A:11:GLU:H	1:A:10:LEU:HG	8	1.36
(1,1892)	1:A:18:GLU:HG3	1:A:22:ALA:HB1	9	1.36
(1,1892)	1:A:18:GLU:HG3	1:A:22:ALA:HB2	9	1.36
(1,1892)	1:A:18:GLU:HG3	1:A:22:ALA:HB3	9	1.36
(1,1886)	1:A:22:ALA:HB1	1:A:18:GLU:HG3	9	1.36
(1,1886)	1:A:22:ALA:HB2	1:A:18:GLU:HG3	9	1.36
(1,1886)	1:A:22:ALA:HB3	1:A:18:GLU:HG3	9	1.36
(1,1210)	1:A:72:GLY:H	1:A:74:VAL:HB	2	1.36
(1,256)	1:A:128:ILE:H	1:A:127:PHE:H	3	1.35
(1,256)	1:A:128:ILE:H	1:A:127:PHE:H	4	1.35
(1,1788)	1:A:47:ASN:H	1:A:45:ASN:HB3	4	1.35
(1,74)	1:A:34:ASN:H	1:A:32:LYS:H	10	1.33
(1,62)	1:A:32:LYS:H	1:A:30:ILE:HG21	10	1.33

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,62)	1:A:32:LYS:H	1:A:30:ILE:HG22	10	1.33
(1,62)	1:A:32:LYS:H	1:A:30:ILE:HG23	10	1.33
(1,256)	1:A:128:ILE:H	1:A:127:PHE:H	8	1.33
(1,215)	1:A:124:LYS:H	1:A:115:THR:HA	5	1.33
(3,27)	1:A:23:LEU:N	1:A:19:TYR:O	2	1.32
(1,256)	1:A:128:ILE:H	1:A:127:PHE:H	5	1.32
(1,211)	1:A:127:PHE:H	1:A:113:VAL:HG21	3	1.32
(1,211)	1:A:127:PHE:H	1:A:113:VAL:HG22	3	1.32
(1,211)	1:A:127:PHE:H	1:A:113:VAL:HG23	3	1.32
(1,21)	1:A:10:LEU:H	1:A:10:LEU:HG	6	1.32
(1,1967)	1:A:124:LYS:HB2	1:A:14:GLU:HB3	8	1.32
(1,743)	1:A:121:MET:HB3	1:A:18:GLU:HG3	9	1.31
(1,74)	1:A:34:ASN:H	1:A:32:LYS:H	7	1.31
(1,350)	1:A:124:LYS:H	1:A:15:ASN:HA	3	1.31
(1,209)	1:A:112:PHE:H	1:A:113:VAL:HA	7	1.31
(1,2062)	1:A:111:GLY:HA3	1:A:129:ARG:HB2	3	1.31
(1,2062)	1:A:111:GLY:HA3	1:A:129:ARG:HB3	3	1.31
(1,742)	1:A:114:LEU:HG	1:A:13:ASN:HD22	2	1.3
(1,215)	1:A:124:LYS:H	1:A:115:THR:HA	7	1.3
(1,211)	1:A:127:PHE:H	1:A:113:VAL:HG21	10	1.3
(1,211)	1:A:127:PHE:H	1:A:113:VAL:HG22	10	1.3
(1,211)	1:A:127:PHE:H	1:A:113:VAL:HG23	10	1.3
(1,1978)	1:A:74:VAL:HG21	1:A:29:SER:HB3	1	1.3
(1,1978)	1:A:74:VAL:HG22	1:A:29:SER:HB3	1	1.3
(1,1978)	1:A:74:VAL:HG23	1:A:29:SER:HB3	1	1.3
(1,1924)	1:A:65:GLU:HB3	1:A:67:VAL:HG21	10	1.3
(1,1924)	1:A:65:GLU:HB3	1:A:67:VAL:HG22	10	1.3
(1,1924)	1:A:65:GLU:HB3	1:A:67:VAL:HG23	10	1.3
(1,746)	1:A:75:ASN:HB2	1:A:29:SER:HB3	1	1.29
(1,1933)	1:A:97:ASP:HB3	1:A:95:LEU:HD11	7	1.29
(1,1933)	1:A:97:ASP:HB3	1:A:95:LEU:HD12	7	1.29
(1,1933)	1:A:97:ASP:HB3	1:A:95:LEU:HD13	7	1.29
(1,1778)	1:A:15:ASN:H	1:A:18:GLU:HB3	1	1.29
(1,222)	1:A:120:ASP:H	1:A:118:ALA:HA	3	1.28
(1,256)	1:A:128:ILE:H	1:A:127:PHE:H	1	1.27
(1,211)	1:A:127:PHE:H	1:A:113:VAL:HG21	5	1.27
(1,211)	1:A:127:PHE:H	1:A:113:VAL:HG22	5	1.27
(1,211)	1:A:127:PHE:H	1:A:113:VAL:HG23	5	1.27
(1,21)	1:A:10:LEU:H	1:A:10:LEU:HG	8	1.27
(1,209)	1:A:112:PHE:H	1:A:113:VAL:HA	5	1.26
(1,2002)	1:A:34:ASN:HB3	1:A:74:VAL:HG11	8	1.26
(1,2002)	1:A:34:ASN:HB3	1:A:74:VAL:HG12	8	1.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2002)	1:A:34:ASN:HB3	1:A:74:VAL:HG13	8	1.26
(1,1967)	1:A:124:LYS:HB2	1:A:14:GLU:HB3	7	1.26
(1,1966)	1:A:123:ALA:HA	1:A:14:GLU:HB3	6	1.26
(1,1805)	1:A:128:ILE:H	1:A:10:LEU:HD21	10	1.26
(1,1805)	1:A:128:ILE:H	1:A:10:LEU:HD22	10	1.26
(1,1805)	1:A:128:ILE:H	1:A:10:LEU:HD23	10	1.26
(1,1210)	1:A:72:GLY:H	1:A:74:VAL:HB	3	1.26
(1,62)	1:A:32:LYS:H	1:A:30:ILE:HG21	1	1.25
(1,62)	1:A:32:LYS:H	1:A:30:ILE:HG22	1	1.25
(1,62)	1:A:32:LYS:H	1:A:30:ILE:HG23	1	1.25
(1,247)	1:A:124:LYS:H	1:A:125:ARG:H	1	1.25
(1,1965)	1:A:114:LEU:HD21	1:A:13:ASN:HB2	1	1.25
(1,1965)	1:A:114:LEU:HD22	1:A:13:ASN:HB2	1	1.25
(1,1965)	1:A:114:LEU:HD23	1:A:13:ASN:HB2	1	1.25
(1,1788)	1:A:47:ASN:H	1:A:45:ASN:HB3	2	1.25
(1,256)	1:A:128:ILE:H	1:A:127:PHE:H	9	1.24
(1,209)	1:A:112:PHE:H	1:A:113:VAL:HA	10	1.23
(1,2046)	1:A:14:GLU:HB3	1:A:123:ALA:HB1	8	1.23
(1,2046)	1:A:14:GLU:HB3	1:A:123:ALA:HB2	8	1.23
(1,2046)	1:A:14:GLU:HB3	1:A:123:ALA:HB3	8	1.23
(1,2042)	1:A:93:SER:HB3	1:A:116:MET:HG3	1	1.23
(1,2026)	1:A:78:ILE:HG13	1:A:96:PRO:HD2	6	1.23
(1,1788)	1:A:47:ASN:H	1:A:45:ASN:HB3	9	1.23
(1,211)	1:A:127:PHE:H	1:A:113:VAL:HG21	4	1.22
(1,211)	1:A:127:PHE:H	1:A:113:VAL:HG22	4	1.22
(1,211)	1:A:127:PHE:H	1:A:113:VAL:HG23	4	1.22
(1,21)	1:A:10:LEU:H	1:A:10:LEU:HG	3	1.22
(1,1892)	1:A:18:GLU:HG3	1:A:22:ALA:HB1	10	1.22
(1,1892)	1:A:18:GLU:HG3	1:A:22:ALA:HB2	10	1.22
(1,1892)	1:A:18:GLU:HG3	1:A:22:ALA:HB3	10	1.22
(1,1886)	1:A:22:ALA:HB1	1:A:18:GLU:HG3	10	1.22
(1,1886)	1:A:22:ALA:HB2	1:A:18:GLU:HG3	10	1.22
(1,1886)	1:A:22:ALA:HB3	1:A:18:GLU:HG3	10	1.22
(1,1789)	1:A:48:LYS:H	1:A:45:ASN:HD21	1	1.22
(3,63)	1:A:129:ARG:N	1:A:109:ASP:O	10	1.21
(2,6)	1:A:39:VAL:H	1:A:54:SER:H	1	1.21
(1,97)	1:A:45:ASN:H	1:A:46:GLY:HA2	2	1.21
(1,97)	1:A:45:ASN:H	1:A:46:GLY:HA3	2	1.21
(1,88)	1:A:54:SER:H	1:A:39:VAL:H	1	1.21
(1,62)	1:A:32:LYS:H	1:A:30:ILE:HG21	3	1.21
(1,62)	1:A:32:LYS:H	1:A:30:ILE:HG22	3	1.21
(1,62)	1:A:32:LYS:H	1:A:30:ILE:HG23	3	1.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,374)	1:A:80:SER:H	1:A:94:GLU:HG2	8	1.21
(1,374)	1:A:80:SER:H	1:A:94:GLU:HG3	8	1.21
(1,256)	1:A:128:ILE:H	1:A:127:PHE:H	7	1.21
(1,211)	1:A:127:PHE:H	1:A:113:VAL:HG21	1	1.21
(1,211)	1:A:127:PHE:H	1:A:113:VAL:HG22	1	1.21
(1,211)	1:A:127:PHE:H	1:A:113:VAL:HG23	1	1.21
(1,1967)	1:A:124:LYS:HB2	1:A:14:GLU:HB3	9	1.21
(1,97)	1:A:45:ASN:H	1:A:46:GLY:HA2	9	1.2
(1,97)	1:A:45:ASN:H	1:A:46:GLY:HA3	9	1.2
(1,56)	1:A:22:ALA:H	1:A:23:LEU:HG	4	1.2
(1,371)	1:A:32:LYS:H	1:A:33:ALA:HB1	4	1.2
(1,371)	1:A:32:LYS:H	1:A:33:ALA:HB2	4	1.2
(1,371)	1:A:32:LYS:H	1:A:33:ALA:HB3	4	1.2
(1,21)	1:A:10:LEU:H	1:A:10:LEU:HG	1	1.2
(1,2063)	1:A:111:GLY:HA3	1:A:129:ARG:HG2	10	1.2
(1,2063)	1:A:111:GLY:HA3	1:A:129:ARG:HG3	10	1.2
(1,2054)	1:A:12:LYS:HD3	1:A:126:TYR:HE1	6	1.2
(1,1993)	1:A:82:THR:HB	1:A:61:LEU:HB3	3	1.2
(1,1788)	1:A:47:ASN:H	1:A:45:ASN:HB3	3	1.2
(1,1761)	1:A:75:ASN:H	1:A:76:MET:HB3	2	1.2
(1,97)	1:A:45:ASN:H	1:A:46:GLY:HA2	4	1.19
(1,97)	1:A:45:ASN:H	1:A:46:GLY:HA3	4	1.19
(1,654)	1:A:89:LEU:HA	1:A:84:LEU:HG	8	1.19
(1,62)	1:A:32:LYS:H	1:A:30:ILE:HG21	2	1.19
(1,62)	1:A:32:LYS:H	1:A:30:ILE:HG22	2	1.19
(1,62)	1:A:32:LYS:H	1:A:30:ILE:HG23	2	1.19
(1,56)	1:A:22:ALA:H	1:A:23:LEU:HG	5	1.19
(1,222)	1:A:120:ASP:H	1:A:118:ALA:HA	5	1.19
(1,1969)	1:A:124:LYS:HE2	1:A:14:GLU:HB3	1	1.19
(1,1969)	1:A:124:LYS:HE3	1:A:14:GLU:HB3	1	1.19
(1,1966)	1:A:123:ALA:HA	1:A:14:GLU:HB3	3	1.19
(1,1210)	1:A:72:GLY:H	1:A:74:VAL:HB	8	1.19
(1,759)	1:A:78:ILE:HB	1:A:93:SER:HB3	1	1.18
(1,62)	1:A:32:LYS:H	1:A:30:ILE:HG21	5	1.18
(1,62)	1:A:32:LYS:H	1:A:30:ILE:HG22	5	1.18
(1,62)	1:A:32:LYS:H	1:A:30:ILE:HG23	5	1.18
(1,62)	1:A:32:LYS:H	1:A:30:ILE:HG21	7	1.18
(1,62)	1:A:32:LYS:H	1:A:30:ILE:HG22	7	1.18
(1,62)	1:A:32:LYS:H	1:A:30:ILE:HG23	7	1.18
(1,56)	1:A:22:ALA:H	1:A:23:LEU:HG	1	1.18
(1,45)	1:A:23:LEU:H	1:A:19:TYR:HA	9	1.18
(1,395)	1:A:115:THR:HB	1:A:124:LYS:HD2	3	1.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,395)	1:A:115:THR:HB	1:A:124:LYS:HD3	3	1.18
(1,374)	1:A:80:SER:H	1:A:94:GLU:HG2	4	1.18
(1,374)	1:A:80:SER:H	1:A:94:GLU:HG3	4	1.18
(1,1968)	1:A:124:LYS:HB3	1:A:14:GLU:HB3	2	1.18
(1,1957)	1:A:114:LEU:HD21	1:A:10:LEU:HA	3	1.18
(1,1957)	1:A:114:LEU:HD22	1:A:10:LEU:HA	3	1.18
(1,1957)	1:A:114:LEU:HD23	1:A:10:LEU:HA	3	1.18
(1,22)	1:A:11:GLU:H	1:A:10:LEU:HG	2	1.17
(1,21)	1:A:10:LEU:H	1:A:10:LEU:HG	4	1.17
(1,1901)	1:A:32:LYS:HE2	1:A:29:SER:HB2	8	1.17
(1,1901)	1:A:32:LYS:HE3	1:A:29:SER:HB2	8	1.17
(1,1888)	1:A:23:LEU:HD11	1:A:20:LEU:HB3	2	1.17
(1,1888)	1:A:23:LEU:HD12	1:A:20:LEU:HB3	2	1.17
(1,1888)	1:A:23:LEU:HD13	1:A:20:LEU:HB3	2	1.17
(1,1768)	1:A:12:LYS:H	1:A:10:LEU:HB3	6	1.17
(1,1761)	1:A:75:ASN:H	1:A:76:MET:HB3	6	1.17
(1,97)	1:A:45:ASN:H	1:A:46:GLY:HA2	5	1.16
(1,97)	1:A:45:ASN:H	1:A:46:GLY:HA3	5	1.16
(1,97)	1:A:45:ASN:H	1:A:46:GLY:HA2	10	1.16
(1,97)	1:A:45:ASN:H	1:A:46:GLY:HA3	10	1.16
(1,62)	1:A:32:LYS:H	1:A:30:ILE:HG21	8	1.16
(1,62)	1:A:32:LYS:H	1:A:30:ILE:HG22	8	1.16
(1,62)	1:A:32:LYS:H	1:A:30:ILE:HG23	8	1.16
(1,382)	1:A:36:PRO:HB2	1:A:10:LEU:HG	3	1.16
(1,256)	1:A:128:ILE:H	1:A:127:PHE:H	6	1.16
(1,247)	1:A:124:LYS:H	1:A:125:ARG:H	7	1.16
(1,74)	1:A:34:ASN:H	1:A:32:LYS:H	9	1.15
(1,66)	1:A:29:SER:H	1:A:31:LYS:H	3	1.15
(1,395)	1:A:115:THR:HB	1:A:124:LYS:HD2	8	1.15
(1,395)	1:A:115:THR:HB	1:A:124:LYS:HD3	8	1.15
(1,374)	1:A:80:SER:H	1:A:94:GLU:HG2	5	1.15
(1,374)	1:A:80:SER:H	1:A:94:GLU:HG3	5	1.15
(1,1892)	1:A:18:GLU:HG3	1:A:22:ALA:HB1	4	1.15
(1,1892)	1:A:18:GLU:HG3	1:A:22:ALA:HB2	4	1.15
(1,1892)	1:A:18:GLU:HG3	1:A:22:ALA:HB3	4	1.15
(1,1886)	1:A:22:ALA:HB1	1:A:18:GLU:HG3	4	1.15
(1,1886)	1:A:22:ALA:HB2	1:A:18:GLU:HG3	4	1.15
(1,1886)	1:A:22:ALA:HB3	1:A:18:GLU:HG3	4	1.15
(1,74)	1:A:34:ASN:H	1:A:32:LYS:H	3	1.14
(1,73)	1:A:30:ILE:H	1:A:32:LYS:H	9	1.14
(1,56)	1:A:22:ALA:H	1:A:23:LEU:HG	9	1.14
(1,47)	1:A:19:TYR:H	1:A:19:TYR:HE1	8	1.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,382)	1:A:36:PRO:HB2	1:A:10:LEU:HG	9	1.14
(1,2054)	1:A:12:LYS:HD3	1:A:126:TYR:HE1	9	1.14
(1,2046)	1:A:14:GLU:HB3	1:A:123:ALA:HB1	6	1.14
(1,2046)	1:A:14:GLU:HB3	1:A:123:ALA:HB2	6	1.14
(1,2046)	1:A:14:GLU:HB3	1:A:123:ALA:HB3	6	1.14
(1,2022)	1:A:78:ILE:HG13	1:A:93:SER:HB2	5	1.14
(1,1942)	1:A:124:LYS:HB3	1:A:126:TYR:HE1	10	1.14
(1,1652)	1:A:65:GLU:HA	1:A:83:LYS:HA	3	1.14
(1,350)	1:A:124:LYS:H	1:A:15:ASN:HA	1	1.13
(1,256)	1:A:128:ILE:H	1:A:127:PHE:H	2	1.13
(1,1805)	1:A:128:ILE:H	1:A:10:LEU:HD21	5	1.13
(1,1805)	1:A:128:ILE:H	1:A:10:LEU:HD22	5	1.13
(1,1805)	1:A:128:ILE:H	1:A:10:LEU:HD23	5	1.13
(1,97)	1:A:45:ASN:H	1:A:46:GLY:HA2	6	1.12
(1,97)	1:A:45:ASN:H	1:A:46:GLY:HA3	6	1.12
(1,45)	1:A:23:LEU:H	1:A:19:TYR:HA	8	1.12
(1,1808)	1:A:33:ALA:H	1:A:20:LEU:HD11	2	1.12
(1,1808)	1:A:33:ALA:H	1:A:20:LEU:HD12	2	1.12
(1,1808)	1:A:33:ALA:H	1:A:20:LEU:HD13	2	1.12
(3,10)	1:A:10:LEU:H	1:A:40:TYR:O	5	1.11
(1,742)	1:A:114:LEU:HG	1:A:13:ASN:HD22	4	1.11
(1,47)	1:A:19:TYR:H	1:A:19:TYR:HE1	10	1.11
(1,215)	1:A:124:LYS:H	1:A:115:THR:HA	1	1.11
(1,2022)	1:A:78:ILE:HG13	1:A:93:SER:HB2	9	1.11
(1,1943)	1:A:45:ASN:HB3	1:A:2:VAL:HA	4	1.11
(1,1807)	1:A:122:VAL:H	1:A:15:ASN:HD21	8	1.11
(1,1761)	1:A:75:ASN:H	1:A:76:MET:HB3	9	1.11
(1,97)	1:A:45:ASN:H	1:A:46:GLY:HA2	1	1.1
(1,97)	1:A:45:ASN:H	1:A:46:GLY:HA3	1	1.1
(1,97)	1:A:45:ASN:H	1:A:46:GLY:HA2	8	1.1
(1,97)	1:A:45:ASN:H	1:A:46:GLY:HA3	8	1.1
(1,382)	1:A:36:PRO:HB2	1:A:10:LEU:HG	4	1.1
(1,257)	1:A:112:PHE:H	1:A:128:ILE:HA	4	1.1
(1,2046)	1:A:14:GLU:HB3	1:A:123:ALA:HB1	3	1.1
(1,2046)	1:A:14:GLU:HB3	1:A:123:ALA:HB2	3	1.1
(1,2046)	1:A:14:GLU:HB3	1:A:123:ALA:HB3	3	1.1
(2,6)	1:A:39:VAL:H	1:A:54:SER:H	2	1.09
(1,88)	1:A:54:SER:H	1:A:39:VAL:H	2	1.09
(1,56)	1:A:22:ALA:H	1:A:23:LEU:HG	2	1.09
(1,21)	1:A:10:LEU:H	1:A:10:LEU:HG	7	1.09
(1,2063)	1:A:111:GLY:HA3	1:A:129:ARG:HG2	2	1.09
(1,2063)	1:A:111:GLY:HA3	1:A:129:ARG:HG3	2	1.09

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2063)	1:A:111:GLY:HA3	1:A:129:ARG:HG2	9	1.09
(1,2063)	1:A:111:GLY:HA3	1:A:129:ARG:HG3	9	1.09
(1,2044)	1:A:122:VAL:HG21	1:A:117:CYS:HB2	4	1.09
(1,2044)	1:A:122:VAL:HG22	1:A:117:CYS:HB2	4	1.09
(1,2044)	1:A:122:VAL:HG23	1:A:117:CYS:HB2	4	1.09
(1,1902)	1:A:32:LYS:HE2	1:A:29:SER:HB3	1	1.09
(1,1902)	1:A:32:LYS:HE3	1:A:29:SER:HB3	1	1.09
(1,97)	1:A:45:ASN:H	1:A:46:GLY:HA2	3	1.08
(1,97)	1:A:45:ASN:H	1:A:46:GLY:HA3	3	1.08
(1,373)	1:A:76:MET:H	1:A:71:LEU:HD11	6	1.08
(1,373)	1:A:76:MET:H	1:A:71:LEU:HD12	6	1.08
(1,373)	1:A:76:MET:H	1:A:71:LEU:HD13	6	1.08
(1,395)	1:A:115:THR:HB	1:A:124:LYS:HD2	4	1.07
(1,395)	1:A:115:THR:HB	1:A:124:LYS:HD3	4	1.07
(1,2002)	1:A:34:ASN:HB3	1:A:74:VAL:HG11	5	1.07
(1,2002)	1:A:34:ASN:HB3	1:A:74:VAL:HG12	5	1.07
(1,2002)	1:A:34:ASN:HB3	1:A:74:VAL:HG13	5	1.07
(1,1828)	1:A:35:SER:H	1:A:74:VAL:HG11	1	1.07
(1,1828)	1:A:35:SER:H	1:A:74:VAL:HG12	1	1.07
(1,1828)	1:A:35:SER:H	1:A:74:VAL:HG13	1	1.07
(1,1828)	1:A:35:SER:H	1:A:74:VAL:HG11	4	1.07
(1,1828)	1:A:35:SER:H	1:A:74:VAL:HG12	4	1.07
(1,1828)	1:A:35:SER:H	1:A:74:VAL:HG13	4	1.07
(1,1789)	1:A:48:LYS:H	1:A:45:ASN:HD21	10	1.07
(1,47)	1:A:19:TYR:H	1:A:19:TYR:HE1	4	1.06
(1,381)	1:A:39:VAL:HG11	1:A:9:LYS:HG2	8	1.06
(1,381)	1:A:39:VAL:HG12	1:A:9:LYS:HG2	8	1.06
(1,381)	1:A:39:VAL:HG13	1:A:9:LYS:HG2	8	1.06
(1,22)	1:A:11:GLU:H	1:A:10:LEU:HG	6	1.06
(1,215)	1:A:124:LYS:H	1:A:115:THR:HA	2	1.06
(1,2023)	1:A:78:ILE:HG13	1:A:93:SER:HB3	1	1.06
(1,1652)	1:A:65:GLU:HA	1:A:83:LYS:HA	4	1.06
(1,759)	1:A:78:ILE:HB	1:A:93:SER:HB3	5	1.05
(1,491)	1:A:41:GLU:H	1:A:51:PHE:HA	9	1.05
(1,374)	1:A:80:SER:H	1:A:94:GLU:HG2	3	1.05
(1,374)	1:A:80:SER:H	1:A:94:GLU:HG3	3	1.05
(1,1992)	1:A:80:SER:HB2	1:A:61:LEU:HB3	4	1.05
(1,1992)	1:A:80:SER:HB3	1:A:61:LEU:HB3	4	1.05
(1,1969)	1:A:124:LYS:HE2	1:A:14:GLU:HB3	7	1.05
(1,1969)	1:A:124:LYS:HE3	1:A:14:GLU:HB3	7	1.05
(1,1965)	1:A:114:LEU:HD21	1:A:13:ASN:HB2	5	1.05
(1,1965)	1:A:114:LEU:HD22	1:A:13:ASN:HB2	5	1.05

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1965)	1:A:114:LEU:HD23	1:A:13:ASN:HB2	5	1.05
(1,1942)	1:A:124:LYS:HB3	1:A:126:TYR:HE1	9	1.05
(2,6)	1:A:39:VAL:H	1:A:54:SER:H	6	1.04
(1,88)	1:A:54:SER:H	1:A:39:VAL:H	6	1.04
(1,66)	1:A:29:SER:H	1:A:31:LYS:H	5	1.04
(1,56)	1:A:22:ALA:H	1:A:23:LEU:HG	7	1.04
(1,47)	1:A:19:TYR:H	1:A:19:TYR:HE1	9	1.04
(1,2054)	1:A:12:LYS:HD3	1:A:126:TYR:HE1	8	1.04
(1,2023)	1:A:78:ILE:HG13	1:A:93:SER:HB3	5	1.04
(1,1992)	1:A:80:SER:HB2	1:A:61:LEU:HB3	10	1.04
(1,1992)	1:A:80:SER:HB3	1:A:61:LEU:HB3	10	1.04
(1,1965)	1:A:114:LEU:HD21	1:A:13:ASN:HB2	3	1.04
(1,1965)	1:A:114:LEU:HD22	1:A:13:ASN:HB2	3	1.04
(1,1965)	1:A:114:LEU:HD23	1:A:13:ASN:HB2	3	1.04
(1,1942)	1:A:124:LYS:HB3	1:A:126:TYR:HE1	5	1.04
(1,1761)	1:A:75:ASN:H	1:A:76:MET:HB3	7	1.04
(1,97)	1:A:45:ASN:H	1:A:46:GLY:HA2	7	1.03
(1,97)	1:A:45:ASN:H	1:A:46:GLY:HA3	7	1.03
(1,759)	1:A:78:ILE:HB	1:A:93:SER:HB3	7	1.03
(1,742)	1:A:114:LEU:HG	1:A:13:ASN:HD22	3	1.03
(1,73)	1:A:30:ILE:H	1:A:32:LYS:H	1	1.03
(1,66)	1:A:29:SER:H	1:A:31:LYS:H	1	1.03
(1,378)	1:A:48:LYS:HB2	1:A:2:VAL:HG11	3	1.03
(1,378)	1:A:48:LYS:HB2	1:A:2:VAL:HG12	3	1.03
(1,378)	1:A:48:LYS:HB2	1:A:2:VAL:HG13	3	1.03
(1,374)	1:A:80:SER:H	1:A:94:GLU:HG2	1	1.03
(1,374)	1:A:80:SER:H	1:A:94:GLU:HG3	1	1.03
(1,350)	1:A:124:LYS:H	1:A:15:ASN:HA	4	1.03
(1,2054)	1:A:12:LYS:HD3	1:A:126:TYR:HE1	4	1.03
(1,1791)	1:A:45:ASN:HD21	1:A:48:LYS:HG2	3	1.03
(3,17)	1:A:124:LYS:N	1:A:14:GLU:O	2	1.02
(1,727)	1:A:85:GLU:H	1:A:89:LEU:HG	4	1.02
(1,691)	1:A:34:ASN:H	1:A:32:LYS:HA	2	1.02
(1,45)	1:A:23:LEU:H	1:A:19:TYR:HA	1	1.02
(1,382)	1:A:36:PRO:HB2	1:A:10:LEU:HG	2	1.02
(1,21)	1:A:10:LEU:H	1:A:10:LEU:HG	5	1.02
(1,2022)	1:A:78:ILE:HG13	1:A:93:SER:HB2	1	1.02
(1,1951)	1:A:87:SER:HB3	1:A:4:LEU:HD21	5	1.02
(1,1951)	1:A:87:SER:HB3	1:A:4:LEU:HD22	5	1.02
(1,1951)	1:A:87:SER:HB3	1:A:4:LEU:HD23	5	1.02
(1,1910)	1:A:27:GLN:HG2	1:A:31:LYS:HG2	6	1.02
(1,1910)	1:A:27:GLN:HG3	1:A:31:LYS:HG2	6	1.02

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1898)	1:A:31:LYS:HG2	1:A:27:GLN:HG2	6	1.02
(1,1898)	1:A:31:LYS:HG2	1:A:27:GLN:HG3	6	1.02
(3,19)	1:A:19:TYR:N	1:A:15:ASN:O	4	1.01
(1,64)	1:A:33:ALA:H	1:A:31:LYS:HA	1	1.01
(1,253)	1:A:112:PHE:H	1:A:127:PHE:HB2	4	1.01
(1,253)	1:A:112:PHE:H	1:A:127:PHE:HB3	4	1.01
(1,213)	1:A:125:ARG:H	1:A:114:LEU:HB2	1	1.01
(1,213)	1:A:125:ARG:H	1:A:114:LEU:HB3	1	1.01
(1,212)	1:A:125:ARG:H	1:A:114:LEU:HB2	1	1.01
(1,212)	1:A:125:ARG:H	1:A:114:LEU:HB3	1	1.01
(1,211)	1:A:127:PHE:H	1:A:113:VAL:HG21	6	1.01
(1,211)	1:A:127:PHE:H	1:A:113:VAL:HG22	6	1.01
(1,211)	1:A:127:PHE:H	1:A:113:VAL:HG23	6	1.01
(1,1816)	1:A:39:VAL:H	1:A:54:SER:HA	1	1.01
(1,1778)	1:A:15:ASN:H	1:A:18:GLU:HB3	8	1.01
(1,745)	1:A:20:LEU:HB3	1:A:25:VAL:HG11	2	1.0
(1,745)	1:A:20:LEU:HB3	1:A:25:VAL:HG12	2	1.0
(1,745)	1:A:20:LEU:HB3	1:A:25:VAL:HG13	2	1.0
(1,56)	1:A:22:ALA:H	1:A:23:LEU:HG	3	1.0
(1,395)	1:A:115:THR:HB	1:A:124:LYS:HD2	2	1.0
(1,395)	1:A:115:THR:HB	1:A:124:LYS:HD3	2	1.0
(1,2042)	1:A:93:SER:HB3	1:A:116:MET:HG3	7	1.0
(1,136)	1:A:66:GLU:H	1:A:65:GLU:HG2	4	1.0
(1,136)	1:A:66:GLU:H	1:A:65:GLU:HG3	4	1.0
(3,19)	1:A:19:TYR:N	1:A:15:ASN:O	3	0.99
(3,17)	1:A:124:LYS:N	1:A:14:GLU:O	8	0.99
(1,373)	1:A:76:MET:H	1:A:71:LEU:HD11	1	0.99
(1,373)	1:A:76:MET:H	1:A:71:LEU:HD12	1	0.99
(1,373)	1:A:76:MET:H	1:A:71:LEU:HD13	1	0.99
(1,222)	1:A:120:ASP:H	1:A:118:ALA:HA	10	0.99
(1,21)	1:A:10:LEU:H	1:A:10:LEU:HG	10	0.99
(1,1969)	1:A:124:LYS:HE2	1:A:14:GLU:HB3	6	0.99
(1,1969)	1:A:124:LYS:HE3	1:A:14:GLU:HB3	6	0.99
(1,74)	1:A:34:ASN:H	1:A:32:LYS:H	1	0.98
(1,64)	1:A:33:ALA:H	1:A:31:LYS:HA	9	0.98
(1,62)	1:A:32:LYS:H	1:A:30:ILE:HG21	9	0.98
(1,62)	1:A:32:LYS:H	1:A:30:ILE:HG22	9	0.98
(1,62)	1:A:32:LYS:H	1:A:30:ILE:HG23	9	0.98
(1,45)	1:A:23:LEU:H	1:A:19:TYR:HA	10	0.98
(1,371)	1:A:32:LYS:H	1:A:33:ALA:HB1	10	0.98
(1,371)	1:A:32:LYS:H	1:A:33:ALA:HB2	10	0.98
(1,371)	1:A:32:LYS:H	1:A:33:ALA:HB3	10	0.98

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,211)	1:A:127:PHE:H	1:A:113:VAL:HG21	9	0.98
(1,211)	1:A:127:PHE:H	1:A:113:VAL:HG22	9	0.98
(1,211)	1:A:127:PHE:H	1:A:113:VAL:HG23	9	0.98
(1,2026)	1:A:78:ILE:HG13	1:A:96:PRO:HD2	3	0.98
(1,1816)	1:A:39:VAL:H	1:A:54:SER:HA	2	0.98
(1,1801)	1:A:45:ASN:HD22	1:A:2:VAL:HG11	3	0.98
(1,1801)	1:A:45:ASN:HD22	1:A:2:VAL:HG12	3	0.98
(1,1801)	1:A:45:ASN:HD22	1:A:2:VAL:HG13	3	0.98
(1,1789)	1:A:48:LYS:H	1:A:45:ASN:HD21	5	0.98
(1,1770)	1:A:13:ASN:HD21	1:A:10:LEU:HG	8	0.98
(1,171)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:H	6	0.98
(1,1652)	1:A:65:GLU:HA	1:A:83:LYS:HA	8	0.98
(1,64)	1:A:33:ALA:H	1:A:31:LYS:HA	4	0.97
(1,56)	1:A:22:ALA:H	1:A:23:LEU:HG	10	0.97
(1,45)	1:A:23:LEU:H	1:A:19:TYR:HA	6	0.97
(1,371)	1:A:32:LYS:H	1:A:33:ALA:HB1	6	0.97
(1,371)	1:A:32:LYS:H	1:A:33:ALA:HB2	6	0.97
(1,371)	1:A:32:LYS:H	1:A:33:ALA:HB3	6	0.97
(1,247)	1:A:124:LYS:H	1:A:125:ARG:H	5	0.97
(1,222)	1:A:120:ASP:H	1:A:118:ALA:HA	8	0.97
(1,215)	1:A:124:LYS:H	1:A:115:THR:HA	9	0.97
(1,2023)	1:A:78:ILE:HG13	1:A:93:SER:HB3	3	0.97
(1,1976)	1:A:75:ASN:HB2	1:A:25:VAL:HG11	5	0.97
(1,1976)	1:A:75:ASN:HB2	1:A:25:VAL:HG12	5	0.97
(1,1976)	1:A:75:ASN:HB2	1:A:25:VAL:HG13	5	0.97
(1,1933)	1:A:97:ASP:HB3	1:A:95:LEU:HD11	5	0.97
(1,1933)	1:A:97:ASP:HB3	1:A:95:LEU:HD12	5	0.97
(1,1933)	1:A:97:ASP:HB3	1:A:95:LEU:HD13	5	0.97
(1,1914)	1:A:30:ILE:HG13	1:A:34:ASN:HB2	8	0.97
(1,1907)	1:A:34:ASN:HB2	1:A:30:ILE:HG13	8	0.97
(1,164)	1:A:81:PHE:H	1:A:91:VAL:HA	4	0.97
(1,110)	1:A:41:GLU:H	1:A:53:SER:HA	6	0.97
(1,727)	1:A:85:GLU:H	1:A:89:LEU:HG	6	0.96
(1,240)	1:A:124:LYS:H	1:A:124:LYS:HD2	1	0.96
(1,240)	1:A:124:LYS:H	1:A:124:LYS:HD3	1	0.96
(1,2046)	1:A:14:GLU:HB3	1:A:123:ALA:HB1	7	0.96
(1,2046)	1:A:14:GLU:HB3	1:A:123:ALA:HB2	7	0.96
(1,2046)	1:A:14:GLU:HB3	1:A:123:ALA:HB3	7	0.96
(1,1942)	1:A:124:LYS:HB3	1:A:126:TYR:HE1	4	0.96
(1,1791)	1:A:45:ASN:HD21	1:A:48:LYS:HG2	9	0.96
(1,1778)	1:A:15:ASN:H	1:A:18:GLU:HB3	6	0.96
(1,1652)	1:A:65:GLU:HA	1:A:83:LYS:HA	1	0.96

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,164)	1:A:81:PHE:H	1:A:91:VAL:HA	1	0.96
(3,28)	1:A:23:LEU:H	1:A:19:TYR:O	2	0.95
(1,972)	1:A:35:SER:H	1:A:31:LYS:HB2	3	0.95
(1,972)	1:A:35:SER:H	1:A:31:LYS:HB3	3	0.95
(1,66)	1:A:29:SER:H	1:A:31:LYS:H	8	0.95
(1,384)	1:A:25:VAL:HG11	1:A:20:LEU:HD11	8	0.95
(1,384)	1:A:25:VAL:HG11	1:A:20:LEU:HD12	8	0.95
(1,384)	1:A:25:VAL:HG11	1:A:20:LEU:HD13	8	0.95
(1,384)	1:A:25:VAL:HG12	1:A:20:LEU:HD11	8	0.95
(1,384)	1:A:25:VAL:HG12	1:A:20:LEU:HD12	8	0.95
(1,384)	1:A:25:VAL:HG12	1:A:20:LEU:HD13	8	0.95
(1,384)	1:A:25:VAL:HG13	1:A:20:LEU:HD11	8	0.95
(1,384)	1:A:25:VAL:HG13	1:A:20:LEU:HD12	8	0.95
(1,384)	1:A:25:VAL:HG13	1:A:20:LEU:HD13	8	0.95
(1,247)	1:A:124:LYS:H	1:A:125:ARG:H	2	0.95
(1,22)	1:A:11:GLU:H	1:A:10:LEU:HG	10	0.95
(1,2036)	1:A:125:ARG:HB3	1:A:114:LEU:HD11	3	0.95
(1,2036)	1:A:125:ARG:HB3	1:A:114:LEU:HD12	3	0.95
(1,2036)	1:A:125:ARG:HB3	1:A:114:LEU:HD13	3	0.95
(1,1816)	1:A:39:VAL:H	1:A:54:SER:HA	3	0.95
(1,1768)	1:A:12:LYS:H	1:A:10:LEU:HB3	8	0.95
(1,750)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:44:VAL:HG11	1	0.94
(1,750)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:44:VAL:HG12	1	0.94
(1,750)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:44:VAL:HG13	1	0.94
(1,750)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:44:VAL:HG11	1	0.94
(1,750)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:44:VAL:HG12	1	0.94
(1,750)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:44:VAL:HG13	1	0.94
(1,750)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:44:VAL:HG11	1	0.94
(1,750)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:44:VAL:HG12	1	0.94
(1,750)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:44:VAL:HG13	1	0.94
(1,74)	1:A:34:ASN:H	1:A:32:LYS:H	4	0.94
(1,654)	1:A:89:LEU:HA	1:A:84:LEU:HG	9	0.94
(1,56)	1:A:22:ALA:H	1:A:23:LEU:HG	8	0.94
(1,371)	1:A:32:LYS:H	1:A:33:ALA:HB1	5	0.94
(1,371)	1:A:32:LYS:H	1:A:33:ALA:HB2	5	0.94
(1,371)	1:A:32:LYS:H	1:A:33:ALA:HB3	5	0.94
(1,371)	1:A:32:LYS:H	1:A:33:ALA:HB1	7	0.94
(1,371)	1:A:32:LYS:H	1:A:33:ALA:HB2	7	0.94
(1,371)	1:A:32:LYS:H	1:A:33:ALA:HB3	7	0.94
(1,257)	1:A:112:PHE:H	1:A:128:ILE:HA	3	0.94
(1,1946)	1:A:48:LYS:HA	1:A:2:VAL:HG11	8	0.94
(1,1946)	1:A:48:LYS:HA	1:A:2:VAL:HG12	8	0.94

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1946)	1:A:48:LYS:HA	1:A:2:VAL:HG13	8	0.94
(1,1942)	1:A:124:LYS:HB3	1:A:126:TYR:HE1	1	0.94
(1,1905)	1:A:27:GLN:HA	1:A:30:ILE:HG12	10	0.94
(1,1862)	1:A:32:LYS:HA	1:A:31:LYS:HG3	7	0.94
(3,63)	1:A:129:ARG:N	1:A:109:ASP:O	6	0.93
(1,381)	1:A:39:VAL:HG11	1:A:9:LYS:HG2	4	0.93
(1,381)	1:A:39:VAL:HG12	1:A:9:LYS:HG2	4	0.93
(1,381)	1:A:39:VAL:HG13	1:A:9:LYS:HG2	4	0.93
(1,1953)	1:A:111:GLY:HA3	1:A:8:TYR:HD1	1	0.93
(1,1953)	1:A:111:GLY:HA3	1:A:8:TYR:HD2	1	0.93
(1,1807)	1:A:122:VAL:H	1:A:15:ASN:HD21	5	0.93
(1,1652)	1:A:65:GLU:HA	1:A:83:LYS:HA	2	0.93
(1,1652)	1:A:65:GLU:HA	1:A:83:LYS:HA	5	0.93
(1,1652)	1:A:65:GLU:HA	1:A:83:LYS:HA	6	0.93
(1,754)	1:A:79:LYS:HG3	1:A:68:GLU:HA	6	0.92
(1,47)	1:A:19:TYR:H	1:A:19:TYR:HE1	5	0.92
(1,385)	1:A:33:ALA:HB1	1:A:25:VAL:HG11	2	0.92
(1,385)	1:A:33:ALA:HB1	1:A:25:VAL:HG12	2	0.92
(1,385)	1:A:33:ALA:HB1	1:A:25:VAL:HG13	2	0.92
(1,385)	1:A:33:ALA:HB2	1:A:25:VAL:HG11	2	0.92
(1,385)	1:A:33:ALA:HB2	1:A:25:VAL:HG12	2	0.92
(1,385)	1:A:33:ALA:HB2	1:A:25:VAL:HG13	2	0.92
(1,385)	1:A:33:ALA:HB3	1:A:25:VAL:HG11	2	0.92
(1,385)	1:A:33:ALA:HB3	1:A:25:VAL:HG12	2	0.92
(1,385)	1:A:33:ALA:HB3	1:A:25:VAL:HG13	2	0.92
(1,215)	1:A:124:LYS:H	1:A:115:THR:HA	3	0.92
(1,1783)	1:A:22:ALA:H	1:A:25:VAL:HG21	2	0.92
(1,1783)	1:A:22:ALA:H	1:A:25:VAL:HG22	2	0.92
(1,1783)	1:A:22:ALA:H	1:A:25:VAL:HG23	2	0.92
(1,171)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:H	7	0.92
(1,1527)	1:A:47:ASN:HA	1:A:2:VAL:HB	4	0.92
(1,45)	1:A:23:LEU:H	1:A:19:TYR:HA	5	0.91
(1,384)	1:A:25:VAL:HG11	1:A:20:LEU:HD11	7	0.91
(1,384)	1:A:25:VAL:HG11	1:A:20:LEU:HD12	7	0.91
(1,384)	1:A:25:VAL:HG11	1:A:20:LEU:HD13	7	0.91
(1,384)	1:A:25:VAL:HG12	1:A:20:LEU:HD11	7	0.91
(1,384)	1:A:25:VAL:HG12	1:A:20:LEU:HD12	7	0.91
(1,384)	1:A:25:VAL:HG12	1:A:20:LEU:HD13	7	0.91
(1,384)	1:A:25:VAL:HG13	1:A:20:LEU:HD11	7	0.91
(1,384)	1:A:25:VAL:HG13	1:A:20:LEU:HD12	7	0.91
(1,384)	1:A:25:VAL:HG13	1:A:20:LEU:HD13	7	0.91
(1,381)	1:A:39:VAL:HG11	1:A:9:LYS:HG2	6	0.91

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,381)	1:A:39:VAL:HG12	1:A:9:LYS:HG2	6	0.91
(1,381)	1:A:39:VAL:HG13	1:A:9:LYS:HG2	6	0.91
(1,1989)	1:A:39:VAL:HG21	1:A:54:SER:HA	1	0.91
(1,1989)	1:A:39:VAL:HG22	1:A:54:SER:HA	1	0.91
(1,1989)	1:A:39:VAL:HG23	1:A:54:SER:HA	1	0.91
(1,1783)	1:A:22:ALA:H	1:A:25:VAL:HG21	8	0.91
(1,1783)	1:A:22:ALA:H	1:A:25:VAL:HG22	8	0.91
(1,1783)	1:A:22:ALA:H	1:A:25:VAL:HG23	8	0.91
(1,1652)	1:A:65:GLU:HA	1:A:83:LYS:HA	10	0.91
(1,159)	1:A:88:LYS:H	1:A:88:LYS:HE2	6	0.91
(1,159)	1:A:88:LYS:H	1:A:88:LYS:HE3	6	0.91
(1,382)	1:A:36:PRO:HB2	1:A:10:LEU:HG	8	0.9
(1,2002)	1:A:34:ASN:HB3	1:A:74:VAL:HG11	4	0.9
(1,2002)	1:A:34:ASN:HB3	1:A:74:VAL:HG12	4	0.9
(1,2002)	1:A:34:ASN:HB3	1:A:74:VAL:HG13	4	0.9
(1,1816)	1:A:39:VAL:H	1:A:54:SER:HA	6	0.9
(1,1791)	1:A:45:ASN:HD21	1:A:48:LYS:HG2	10	0.9
(1,1784)	1:A:27:GLN:HE21	1:A:29:SER:H	5	0.9
(1,1778)	1:A:15:ASN:H	1:A:18:GLU:HB3	10	0.9
(1,164)	1:A:81:PHE:H	1:A:91:VAL:HA	5	0.9
(1,1286)	1:A:88:LYS:H	1:A:84:LEU:HG	1	0.9
(1,66)	1:A:29:SER:H	1:A:31:LYS:H	6	0.89
(1,572)	1:A:84:LEU:H	1:A:89:LEU:HG	4	0.89
(1,45)	1:A:23:LEU:H	1:A:19:TYR:HA	3	0.89
(1,45)	1:A:23:LEU:H	1:A:19:TYR:HA	4	0.89
(1,374)	1:A:80:SER:H	1:A:94:GLU:HG2	2	0.89
(1,374)	1:A:80:SER:H	1:A:94:GLU:HG3	2	0.89
(1,247)	1:A:124:LYS:H	1:A:125:ARG:H	3	0.89
(1,2054)	1:A:12:LYS:HD3	1:A:126:TYR:HE1	2	0.89
(1,2022)	1:A:78:ILE:HG13	1:A:93:SER:HB2	3	0.89
(1,1992)	1:A:80:SER:HB2	1:A:61:LEU:HB3	2	0.89
(1,1992)	1:A:80:SER:HB3	1:A:61:LEU:HB3	2	0.89
(1,1946)	1:A:48:LYS:HA	1:A:2:VAL:HG11	1	0.89
(1,1946)	1:A:48:LYS:HA	1:A:2:VAL:HG12	1	0.89
(1,1946)	1:A:48:LYS:HA	1:A:2:VAL:HG13	1	0.89
(1,1946)	1:A:48:LYS:HA	1:A:2:VAL:HG11	3	0.89
(1,1946)	1:A:48:LYS:HA	1:A:2:VAL:HG12	3	0.89
(1,1946)	1:A:48:LYS:HA	1:A:2:VAL:HG13	3	0.89
(1,1933)	1:A:97:ASP:HB3	1:A:95:LEU:HD11	2	0.89
(1,1933)	1:A:97:ASP:HB3	1:A:95:LEU:HD12	2	0.89
(1,1933)	1:A:97:ASP:HB3	1:A:95:LEU:HD13	2	0.89
(1,1828)	1:A:35:SER:H	1:A:74:VAL:HG11	9	0.89

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1828)	1:A:35:SER:H	1:A:74:VAL:HG12	9	0.89
(1,1828)	1:A:35:SER:H	1:A:74:VAL:HG13	9	0.89
(1,1813)	1:A:3:GLN:HE22	1:A:45:ASN:HA	5	0.89
(1,1651)	1:A:65:GLU:H	1:A:84:LEU:HD11	3	0.89
(1,1651)	1:A:65:GLU:H	1:A:84:LEU:HD12	3	0.89
(1,1651)	1:A:65:GLU:H	1:A:84:LEU:HD13	3	0.89
(1,1651)	1:A:65:GLU:H	1:A:84:LEU:HD21	3	0.89
(1,1651)	1:A:65:GLU:H	1:A:84:LEU:HD22	3	0.89
(1,1651)	1:A:65:GLU:H	1:A:84:LEU:HD23	3	0.89
(1,1207)	1:A:76:MET:H	1:A:72:GLY:HA2	4	0.89
(1,1207)	1:A:76:MET:H	1:A:72:GLY:HA3	4	0.89
(1,45)	1:A:23:LEU:H	1:A:19:TYR:HA	7	0.88
(1,38)	1:A:15:ASN:H	1:A:15:ASN:HD21	2	0.88
(1,38)	1:A:15:ASN:H	1:A:15:ASN:HD22	2	0.88
(1,38)	1:A:15:ASN:H	1:A:15:ASN:HD21	9	0.88
(1,38)	1:A:15:ASN:H	1:A:15:ASN:HD22	9	0.88
(1,378)	1:A:48:LYS:HB2	1:A:2:VAL:HG11	8	0.88
(1,378)	1:A:48:LYS:HB2	1:A:2:VAL:HG12	8	0.88
(1,378)	1:A:48:LYS:HB2	1:A:2:VAL:HG13	8	0.88
(1,209)	1:A:112:PHE:H	1:A:113:VAL:HA	3	0.88
(1,2047)	1:A:113:VAL:HG21	1:A:124:LYS:HB2	2	0.88
(1,2047)	1:A:113:VAL:HG22	1:A:124:LYS:HB2	2	0.88
(1,2047)	1:A:113:VAL:HG23	1:A:124:LYS:HB2	2	0.88
(1,1973)	1:A:121:MET:HB2	1:A:18:GLU:HG3	4	0.88
(1,1967)	1:A:124:LYS:HB2	1:A:14:GLU:HB3	5	0.88
(1,1938)	1:A:118:ALA:HB1	1:A:122:VAL:HB	1	0.88
(1,1938)	1:A:118:ALA:HB2	1:A:122:VAL:HB	1	0.88
(1,1938)	1:A:118:ALA:HB3	1:A:122:VAL:HB	1	0.88
(1,1933)	1:A:97:ASP:HB3	1:A:95:LEU:HD11	4	0.88
(1,1933)	1:A:97:ASP:HB3	1:A:95:LEU:HD12	4	0.88
(1,1933)	1:A:97:ASP:HB3	1:A:95:LEU:HD13	4	0.88
(1,1906)	1:A:27:GLN:HA	1:A:30:ILE:HG13	2	0.88
(1,1877)	1:A:3:GLN:HB3	1:A:6:GLY:HA2	7	0.88
(1,168)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:HB	10	0.88
(1,491)	1:A:41:GLU:H	1:A:51:PHE:HA	10	0.87
(1,47)	1:A:19:TYR:H	1:A:19:TYR:HE1	6	0.87
(1,22)	1:A:11:GLU:H	1:A:10:LEU:HG	9	0.87
(1,211)	1:A:127:PHE:H	1:A:113:VAL:HG21	8	0.87
(1,211)	1:A:127:PHE:H	1:A:113:VAL:HG22	8	0.87
(1,211)	1:A:127:PHE:H	1:A:113:VAL:HG23	8	0.87
(1,2026)	1:A:78:ILE:HG13	1:A:96:PRO:HD2	5	0.87
(1,1817)	1:A:81:PHE:H	1:A:61:LEU:HD21	4	0.87

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1817)	1:A:81:PHE:H	1:A:61:LEU:HD22	4	0.87
(1,1817)	1:A:81:PHE:H	1:A:61:LEU:HD23	4	0.87
(1,1783)	1:A:22:ALA:H	1:A:25:VAL:HG21	4	0.87
(1,1783)	1:A:22:ALA:H	1:A:25:VAL:HG22	4	0.87
(1,1783)	1:A:22:ALA:H	1:A:25:VAL:HG23	4	0.87
(1,1783)	1:A:22:ALA:H	1:A:25:VAL:HG21	5	0.87
(1,1783)	1:A:22:ALA:H	1:A:25:VAL:HG22	5	0.87
(1,1783)	1:A:22:ALA:H	1:A:25:VAL:HG23	5	0.87
(3,64)	1:A:129:ARG:H	1:A:109:ASP:O	10	0.86
(3,63)	1:A:129:ARG:N	1:A:109:ASP:O	5	0.86
(1,429)	1:A:22:ALA:H	1:A:20:LEU:HA	2	0.86
(1,39)	1:A:17:GLU:H	1:A:15:ASN:H	6	0.86
(1,371)	1:A:32:LYS:H	1:A:33:ALA:HB1	2	0.86
(1,371)	1:A:32:LYS:H	1:A:33:ALA:HB2	2	0.86
(1,371)	1:A:32:LYS:H	1:A:33:ALA:HB3	2	0.86
(1,222)	1:A:120:ASP:H	1:A:118:ALA:HA	4	0.86
(1,1951)	1:A:87:SER:HB3	1:A:4:LEU:HD21	3	0.86
(1,1951)	1:A:87:SER:HB3	1:A:4:LEU:HD22	3	0.86
(1,1951)	1:A:87:SER:HB3	1:A:4:LEU:HD23	3	0.86
(1,1951)	1:A:87:SER:HB3	1:A:4:LEU:HD21	6	0.86
(1,1951)	1:A:87:SER:HB3	1:A:4:LEU:HD22	6	0.86
(1,1951)	1:A:87:SER:HB3	1:A:4:LEU:HD23	6	0.86
(1,1902)	1:A:32:LYS:HE2	1:A:29:SER:HB3	8	0.86
(1,1902)	1:A:32:LYS:HE3	1:A:29:SER:HB3	8	0.86
(1,1813)	1:A:3:GLN:HE22	1:A:45:ASN:HA	8	0.86
(1,73)	1:A:30:ILE:H	1:A:32:LYS:H	2	0.85
(1,691)	1:A:34:ASN:H	1:A:32:LYS:HA	6	0.85
(1,68)	1:A:33:ALA:H	1:A:31:LYS:H	10	0.85
(1,64)	1:A:33:ALA:H	1:A:31:LYS:HA	3	0.85
(1,634)	1:A:112:PHE:H	1:A:128:ILE:HD11	9	0.85
(1,634)	1:A:112:PHE:H	1:A:128:ILE:HD12	9	0.85
(1,634)	1:A:112:PHE:H	1:A:128:ILE:HD13	9	0.85
(1,56)	1:A:22:ALA:H	1:A:23:LEU:HG	6	0.85
(1,382)	1:A:36:PRO:HB2	1:A:10:LEU:HG	6	0.85
(1,374)	1:A:80:SER:H	1:A:94:GLU:HG2	6	0.85
(1,374)	1:A:80:SER:H	1:A:94:GLU:HG3	6	0.85
(1,374)	1:A:80:SER:H	1:A:94:GLU:HG2	7	0.85
(1,374)	1:A:80:SER:H	1:A:94:GLU:HG3	7	0.85
(1,374)	1:A:80:SER:H	1:A:94:GLU:HG2	9	0.85
(1,374)	1:A:80:SER:H	1:A:94:GLU:HG3	9	0.85
(1,2002)	1:A:34:ASN:HB3	1:A:74:VAL:HG11	2	0.85
(1,2002)	1:A:34:ASN:HB3	1:A:74:VAL:HG12	2	0.85

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2002)	1:A:34:ASN:HB3	1:A:74:VAL:HG13	2	0.85
(1,1783)	1:A:22:ALA:H	1:A:25:VAL:HG21	1	0.85
(1,1783)	1:A:22:ALA:H	1:A:25:VAL:HG22	1	0.85
(1,1783)	1:A:22:ALA:H	1:A:25:VAL:HG23	1	0.85
(1,1652)	1:A:65:GLU:HA	1:A:83:LYS:HA	7	0.85
(1,1458)	1:A:115:THR:H	1:A:114:LEU:HG	8	0.85
(1,750)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:44:VAL:HG11	6	0.84
(1,750)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:44:VAL:HG12	6	0.84
(1,750)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:44:VAL:HG13	6	0.84
(1,750)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:44:VAL:HG11	6	0.84
(1,750)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:44:VAL:HG12	6	0.84
(1,750)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:44:VAL:HG13	6	0.84
(1,750)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:44:VAL:HG11	6	0.84
(1,750)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:44:VAL:HG12	6	0.84
(1,750)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:44:VAL:HG13	6	0.84
(1,68)	1:A:33:ALA:H	1:A:31:LYS:H	4	0.84
(1,634)	1:A:112:PHE:H	1:A:128:ILE:HD11	2	0.84
(1,634)	1:A:112:PHE:H	1:A:128:ILE:HD12	2	0.84
(1,634)	1:A:112:PHE:H	1:A:128:ILE:HD13	2	0.84
(1,281)	1:A:84:LEU:HA	1:A:89:LEU:HB2	4	0.84
(1,281)	1:A:84:LEU:HA	1:A:89:LEU:HB3	4	0.84
(1,215)	1:A:124:LYS:H	1:A:115:THR:HA	4	0.84
(1,211)	1:A:127:PHE:H	1:A:113:VAL:HG21	7	0.84
(1,211)	1:A:127:PHE:H	1:A:113:VAL:HG22	7	0.84
(1,211)	1:A:127:PHE:H	1:A:113:VAL:HG23	7	0.84
(1,2054)	1:A:12:LYS:HD3	1:A:126:TYR:HE1	5	0.84
(1,1976)	1:A:75:ASN:HB2	1:A:25:VAL:HG11	3	0.84
(1,1976)	1:A:75:ASN:HB2	1:A:25:VAL:HG12	3	0.84
(1,1976)	1:A:75:ASN:HB2	1:A:25:VAL:HG13	3	0.84
(1,1967)	1:A:124:LYS:HB2	1:A:14:GLU:HB3	1	0.84
(1,1892)	1:A:18:GLU:HG3	1:A:22:ALA:HB1	6	0.84
(1,1892)	1:A:18:GLU:HG3	1:A:22:ALA:HB2	6	0.84
(1,1892)	1:A:18:GLU:HG3	1:A:22:ALA:HB3	6	0.84
(1,1892)	1:A:18:GLU:HG3	1:A:22:ALA:HB1	8	0.84
(1,1892)	1:A:18:GLU:HG3	1:A:22:ALA:HB2	8	0.84
(1,1892)	1:A:18:GLU:HG3	1:A:22:ALA:HB3	8	0.84
(1,1886)	1:A:22:ALA:HB1	1:A:18:GLU:HG3	6	0.84
(1,1886)	1:A:22:ALA:HB2	1:A:18:GLU:HG3	6	0.84
(1,1886)	1:A:22:ALA:HB3	1:A:18:GLU:HG3	6	0.84
(1,1886)	1:A:22:ALA:HB1	1:A:18:GLU:HG3	8	0.84
(1,1886)	1:A:22:ALA:HB2	1:A:18:GLU:HG3	8	0.84
(1,1886)	1:A:22:ALA:HB3	1:A:18:GLU:HG3	8	0.84

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1828)	1:A:35:SER:H	1:A:74:VAL:HG11	5	0.84
(1,1828)	1:A:35:SER:H	1:A:74:VAL:HG12	5	0.84
(1,1828)	1:A:35:SER:H	1:A:74:VAL:HG13	5	0.84
(1,1816)	1:A:39:VAL:H	1:A:54:SER:HA	10	0.84
(1,1783)	1:A:22:ALA:H	1:A:25:VAL:HG21	9	0.84
(1,1783)	1:A:22:ALA:H	1:A:25:VAL:HG22	9	0.84
(1,1783)	1:A:22:ALA:H	1:A:25:VAL:HG23	9	0.84
(1,1768)	1:A:12:LYS:H	1:A:10:LEU:HB3	3	0.84
(1,171)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:H	1	0.84
(1,171)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:H	4	0.84
(1,164)	1:A:81:PHE:H	1:A:91:VAL:HA	3	0.84
(2,6)	1:A:39:VAL:H	1:A:54:SER:H	10	0.83
(1,88)	1:A:54:SER:H	1:A:39:VAL:H	10	0.83
(1,68)	1:A:33:ALA:H	1:A:31:LYS:H	9	0.83
(1,49)	1:A:23:LEU:H	1:A:21:ALA:HA	1	0.83
(1,205)	1:A:129:ARG:H	1:A:111:GLY:HA2	8	0.83
(1,205)	1:A:129:ARG:H	1:A:111:GLY:HA3	8	0.83
(1,1778)	1:A:15:ASN:H	1:A:18:GLU:HB3	9	0.83
(1,171)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:H	8	0.83
(3,23)	1:A:21:ALA:N	1:A:17:GLU:O	2	0.82
(1,78)	1:A:35:SER:H	1:A:33:ALA:H	3	0.82
(1,742)	1:A:114:LEU:HG	1:A:13:ASN:HD22	5	0.82
(1,729)	1:A:125:ARG:H	1:A:13:ASN:HA	3	0.82
(1,62)	1:A:32:LYS:H	1:A:30:ILE:HG21	4	0.82
(1,62)	1:A:32:LYS:H	1:A:30:ILE:HG22	4	0.82
(1,62)	1:A:32:LYS:H	1:A:30:ILE:HG23	4	0.82
(1,215)	1:A:124:LYS:H	1:A:115:THR:HA	6	0.82
(1,209)	1:A:112:PHE:H	1:A:113:VAL:HA	4	0.82
(1,2022)	1:A:78:ILE:HG13	1:A:93:SER:HB2	8	0.82
(1,2019)	1:A:63:VAL:HG21	1:A:89:LEU:HB2	4	0.82
(1,2019)	1:A:63:VAL:HG22	1:A:89:LEU:HB2	4	0.82
(1,2019)	1:A:63:VAL:HG23	1:A:89:LEU:HB2	4	0.82
(1,1993)	1:A:82:THR:HB	1:A:61:LEU:HB3	2	0.82
(1,1976)	1:A:75:ASN:HB2	1:A:25:VAL:HG11	4	0.82
(1,1976)	1:A:75:ASN:HB2	1:A:25:VAL:HG12	4	0.82
(1,1976)	1:A:75:ASN:HB2	1:A:25:VAL:HG13	4	0.82
(1,1946)	1:A:48:LYS:HA	1:A:2:VAL:HG11	5	0.82
(1,1946)	1:A:48:LYS:HA	1:A:2:VAL:HG12	5	0.82
(1,1946)	1:A:48:LYS:HA	1:A:2:VAL:HG13	5	0.82
(1,1828)	1:A:35:SER:H	1:A:74:VAL:HG11	6	0.82
(1,1828)	1:A:35:SER:H	1:A:74:VAL:HG12	6	0.82
(1,1828)	1:A:35:SER:H	1:A:74:VAL:HG13	6	0.82

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1768)	1:A:12:LYS:H	1:A:10:LEU:HB3	7	0.82
(1,1651)	1:A:65:GLU:H	1:A:84:LEU:HD11	8	0.82
(1,1651)	1:A:65:GLU:H	1:A:84:LEU:HD12	8	0.82
(1,1651)	1:A:65:GLU:H	1:A:84:LEU:HD13	8	0.82
(1,1651)	1:A:65:GLU:H	1:A:84:LEU:HD21	8	0.82
(1,1651)	1:A:65:GLU:H	1:A:84:LEU:HD22	8	0.82
(1,1651)	1:A:65:GLU:H	1:A:84:LEU:HD23	8	0.82
(3,63)	1:A:129:ARG:N	1:A:109:ASP:O	3	0.81
(2,6)	1:A:39:VAL:H	1:A:54:SER:H	3	0.81
(1,88)	1:A:54:SER:H	1:A:39:VAL:H	3	0.81
(1,66)	1:A:29:SER:H	1:A:31:LYS:H	7	0.81
(1,371)	1:A:32:LYS:H	1:A:33:ALA:HB1	9	0.81
(1,371)	1:A:32:LYS:H	1:A:33:ALA:HB2	9	0.81
(1,371)	1:A:32:LYS:H	1:A:33:ALA:HB3	9	0.81
(1,34)	1:A:124:LYS:H	1:A:14:GLU:HB2	10	0.81
(1,34)	1:A:124:LYS:H	1:A:14:GLU:HB3	10	0.81
(1,2045)	1:A:19:TYR:HA	1:A:121:MET:HB2	2	0.81
(1,2026)	1:A:78:ILE:HG13	1:A:96:PRO:HD2	7	0.81
(1,2022)	1:A:78:ILE:HG13	1:A:93:SER:HB2	4	0.81
(1,1992)	1:A:80:SER:HB2	1:A:61:LEU:HB3	8	0.81
(1,1992)	1:A:80:SER:HB3	1:A:61:LEU:HB3	8	0.81
(1,1974)	1:A:121:MET:HB2	1:A:19:TYR:HA	2	0.81
(1,1910)	1:A:27:GLN:HG2	1:A:31:LYS:HG2	2	0.81
(1,1910)	1:A:27:GLN:HG3	1:A:31:LYS:HG2	2	0.81
(1,1898)	1:A:31:LYS:HG2	1:A:27:GLN:HG2	2	0.81
(1,1898)	1:A:31:LYS:HG2	1:A:27:GLN:HG3	2	0.81
(1,171)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:H	3	0.81
(1,110)	1:A:41:GLU:H	1:A:53:SER:HA	3	0.81
(1,73)	1:A:30:ILE:H	1:A:32:LYS:H	10	0.8
(1,49)	1:A:23:LEU:H	1:A:21:ALA:HA	4	0.8
(1,110)	1:A:41:GLU:H	1:A:53:SER:HA	8	0.8
(1,654)	1:A:89:LEU:HA	1:A:84:LEU:HG	1	0.79
(1,428)	1:A:17:GLU:H	1:A:19:TYR:H	7	0.79
(1,247)	1:A:124:LYS:H	1:A:125:ARG:H	9	0.79
(1,2019)	1:A:63:VAL:HG21	1:A:89:LEU:HB2	8	0.79
(1,2019)	1:A:63:VAL:HG22	1:A:89:LEU:HB2	8	0.79
(1,2019)	1:A:63:VAL:HG23	1:A:89:LEU:HB2	8	0.79
(1,1902)	1:A:32:LYS:HE2	1:A:29:SER:HB3	3	0.79
(1,1902)	1:A:32:LYS:HE3	1:A:29:SER:HB3	3	0.79
(1,1792)	1:A:72:GLY:H	1:A:75:ASN:HA	3	0.79
(2,6)	1:A:39:VAL:H	1:A:54:SER:H	7	0.78
(1,88)	1:A:54:SER:H	1:A:39:VAL:H	7	0.78

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,729)	1:A:125:ARG:H	1:A:13:ASN:HA	1	0.78
(1,491)	1:A:41:GLU:H	1:A:51:PHE:HA	5	0.78
(1,49)	1:A:23:LEU:H	1:A:21:ALA:HA	3	0.78
(1,39)	1:A:17:GLU:H	1:A:15:ASN:H	7	0.78
(1,385)	1:A:33:ALA:HB1	1:A:25:VAL:HG11	10	0.78
(1,385)	1:A:33:ALA:HB1	1:A:25:VAL:HG12	10	0.78
(1,385)	1:A:33:ALA:HB1	1:A:25:VAL:HG13	10	0.78
(1,385)	1:A:33:ALA:HB2	1:A:25:VAL:HG11	10	0.78
(1,385)	1:A:33:ALA:HB2	1:A:25:VAL:HG12	10	0.78
(1,385)	1:A:33:ALA:HB2	1:A:25:VAL:HG13	10	0.78
(1,385)	1:A:33:ALA:HB3	1:A:25:VAL:HG11	10	0.78
(1,385)	1:A:33:ALA:HB3	1:A:25:VAL:HG12	10	0.78
(1,385)	1:A:33:ALA:HB3	1:A:25:VAL:HG13	10	0.78
(1,205)	1:A:129:ARG:H	1:A:111:GLY:HA2	2	0.78
(1,205)	1:A:129:ARG:H	1:A:111:GLY:HA3	2	0.78
(1,2036)	1:A:125:ARG:HB3	1:A:114:LEU:HD11	10	0.78
(1,2036)	1:A:125:ARG:HB3	1:A:114:LEU:HD12	10	0.78
(1,2036)	1:A:125:ARG:HB3	1:A:114:LEU:HD13	10	0.78
(1,1972)	1:A:27:GLN:HA	1:A:17:GLU:HA	9	0.78
(1,1966)	1:A:123:ALA:HA	1:A:14:GLU:HB3	7	0.78
(1,1953)	1:A:111:GLY:HA3	1:A:8:TYR:HD1	8	0.78
(1,1953)	1:A:111:GLY:HA3	1:A:8:TYR:HD2	8	0.78
(1,1862)	1:A:32:LYS:HA	1:A:31:LYS:HG3	9	0.78
(1,1783)	1:A:22:ALA:H	1:A:25:VAL:HG21	6	0.78
(1,1783)	1:A:22:ALA:H	1:A:25:VAL:HG22	6	0.78
(1,1783)	1:A:22:ALA:H	1:A:25:VAL:HG23	6	0.78
(1,168)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:HB	9	0.78
(1,156)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD11	8	0.78
(1,156)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD12	8	0.78
(1,156)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD13	8	0.78
(1,156)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD21	8	0.78
(1,156)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD22	8	0.78
(1,156)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD23	8	0.78
(1,155)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD11	8	0.78
(1,155)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD12	8	0.78
(1,155)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD13	8	0.78
(1,155)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD21	8	0.78
(1,155)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD22	8	0.78
(1,155)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD23	8	0.78
(3,9)	1:A:10:LEU:N	1:A:40:TYR:O	6	0.77
(2,6)	1:A:39:VAL:H	1:A:54:SER:H	5	0.77
(1,88)	1:A:54:SER:H	1:A:39:VAL:H	5	0.77

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,724)	1:A:17:GLU:H	1:A:20:LEU:HB2	3	0.77
(1,418)	1:A:19:TYR:H	1:A:17:GLU:HA	2	0.77
(1,395)	1:A:115:THR:HB	1:A:124:LYS:HD2	10	0.77
(1,395)	1:A:115:THR:HB	1:A:124:LYS:HD3	10	0.77
(1,2054)	1:A:12:LYS:HD3	1:A:126:TYR:HE1	3	0.77
(1,1950)	1:A:87:SER:HB2	1:A:4:LEU:HD21	5	0.77
(1,1950)	1:A:87:SER:HB2	1:A:4:LEU:HD22	5	0.77
(1,1950)	1:A:87:SER:HB2	1:A:4:LEU:HD23	5	0.77
(1,1885)	1:A:22:ALA:HB1	1:A:18:GLU:HB2	5	0.77
(1,1885)	1:A:22:ALA:HB2	1:A:18:GLU:HB2	5	0.77
(1,1885)	1:A:22:ALA:HB3	1:A:18:GLU:HB2	5	0.77
(1,1803)	1:A:47:ASN:HD21	1:A:2:VAL:HG21	4	0.77
(1,1803)	1:A:47:ASN:HD21	1:A:2:VAL:HG22	4	0.77
(1,1803)	1:A:47:ASN:HD21	1:A:2:VAL:HG23	4	0.77
(1,171)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:H	2	0.77
(1,110)	1:A:41:GLU:H	1:A:53:SER:HA	1	0.77
(1,742)	1:A:114:LEU:HG	1:A:13:ASN:HD22	6	0.76
(1,729)	1:A:125:ARG:H	1:A:13:ASN:HA	2	0.76
(1,727)	1:A:85:GLU:H	1:A:89:LEU:HG	3	0.76
(1,691)	1:A:34:ASN:H	1:A:32:LYS:HA	1	0.76
(1,396)	1:A:11:GLU:HG2	1:A:128:ILE:HG12	6	0.76
(1,396)	1:A:11:GLU:HG3	1:A:128:ILE:HG12	6	0.76
(1,38)	1:A:15:ASN:H	1:A:15:ASN:HD21	1	0.76
(1,38)	1:A:15:ASN:H	1:A:15:ASN:HD22	1	0.76
(1,38)	1:A:15:ASN:H	1:A:15:ASN:HD21	3	0.76
(1,38)	1:A:15:ASN:H	1:A:15:ASN:HD22	3	0.76
(1,378)	1:A:48:LYS:HB2	1:A:2:VAL:HG11	9	0.76
(1,378)	1:A:48:LYS:HB2	1:A:2:VAL:HG12	9	0.76
(1,378)	1:A:48:LYS:HB2	1:A:2:VAL:HG13	9	0.76
(1,222)	1:A:120:ASP:H	1:A:118:ALA:HA	1	0.76
(1,1992)	1:A:80:SER:HB2	1:A:61:LEU:HB3	1	0.76
(1,1992)	1:A:80:SER:HB3	1:A:61:LEU:HB3	1	0.76
(1,1946)	1:A:48:LYS:HA	1:A:2:VAL:HG11	10	0.76
(1,1946)	1:A:48:LYS:HA	1:A:2:VAL:HG12	10	0.76
(1,1946)	1:A:48:LYS:HA	1:A:2:VAL:HG13	10	0.76
(1,1801)	1:A:45:ASN:HD22	1:A:2:VAL:HG11	1	0.76
(1,1801)	1:A:45:ASN:HD22	1:A:2:VAL:HG12	1	0.76
(1,1801)	1:A:45:ASN:HD22	1:A:2:VAL:HG13	1	0.76
(1,1784)	1:A:27:GLN:HE21	1:A:29:SER:H	7	0.76
(1,1647)	1:A:14:GLU:H	1:A:124:LYS:HG2	4	0.76
(1,1647)	1:A:14:GLU:H	1:A:124:LYS:HG3	4	0.76
(1,1442)	1:A:108:CYS:H	1:A:112:PHE:HB2	3	0.76

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1442)	1:A:108:CYS:H	1:A:112:PHE:HB3	3	0.76
(1,1441)	1:A:108:CYS:H	1:A:112:PHE:HB2	3	0.76
(1,1441)	1:A:108:CYS:H	1:A:112:PHE:HB3	3	0.76
(1,1244)	1:A:94:GLU:H	1:A:78:ILE:HD11	6	0.76
(1,1244)	1:A:94:GLU:H	1:A:78:ILE:HD12	6	0.76
(1,1244)	1:A:94:GLU:H	1:A:78:ILE:HD13	6	0.76
(1,74)	1:A:34:ASN:H	1:A:32:LYS:H	8	0.75
(1,691)	1:A:34:ASN:H	1:A:32:LYS:HA	3	0.75
(1,65)	1:A:34:ASN:H	1:A:31:LYS:HA	6	0.75
(1,491)	1:A:41:GLU:H	1:A:51:PHE:HA	3	0.75
(1,389)	1:A:33:ALA:HB1	1:A:71:LEU:HD21	1	0.75
(1,389)	1:A:33:ALA:HB1	1:A:71:LEU:HD22	1	0.75
(1,389)	1:A:33:ALA:HB1	1:A:71:LEU:HD23	1	0.75
(1,389)	1:A:33:ALA:HB2	1:A:71:LEU:HD21	1	0.75
(1,389)	1:A:33:ALA:HB2	1:A:71:LEU:HD22	1	0.75
(1,389)	1:A:33:ALA:HB2	1:A:71:LEU:HD23	1	0.75
(1,389)	1:A:33:ALA:HB3	1:A:71:LEU:HD21	1	0.75
(1,389)	1:A:33:ALA:HB3	1:A:71:LEU:HD22	1	0.75
(1,389)	1:A:33:ALA:HB3	1:A:71:LEU:HD23	1	0.75
(1,378)	1:A:48:LYS:HB2	1:A:2:VAL:HG11	1	0.75
(1,378)	1:A:48:LYS:HB2	1:A:2:VAL:HG12	1	0.75
(1,378)	1:A:48:LYS:HB2	1:A:2:VAL:HG13	1	0.75
(1,1965)	1:A:114:LEU:HD21	1:A:13:ASN:HB2	8	0.75
(1,1965)	1:A:114:LEU:HD22	1:A:13:ASN:HB2	8	0.75
(1,1965)	1:A:114:LEU:HD23	1:A:13:ASN:HB2	8	0.75
(1,1914)	1:A:30:ILE:HG13	1:A:34:ASN:HB2	3	0.75
(1,1907)	1:A:34:ASN:HB2	1:A:30:ILE:HG13	3	0.75
(1,1862)	1:A:32:LYS:HA	1:A:31:LYS:HG3	3	0.75
(1,1828)	1:A:35:SER:H	1:A:74:VAL:HG11	10	0.75
(1,1828)	1:A:35:SER:H	1:A:74:VAL:HG12	10	0.75
(1,1828)	1:A:35:SER:H	1:A:74:VAL:HG13	10	0.75
(1,1651)	1:A:65:GLU:H	1:A:84:LEU:HD11	2	0.75
(1,1651)	1:A:65:GLU:H	1:A:84:LEU:HD12	2	0.75
(1,1651)	1:A:65:GLU:H	1:A:84:LEU:HD13	2	0.75
(1,1651)	1:A:65:GLU:H	1:A:84:LEU:HD21	2	0.75
(1,1651)	1:A:65:GLU:H	1:A:84:LEU:HD22	2	0.75
(1,1651)	1:A:65:GLU:H	1:A:84:LEU:HD23	2	0.75
(1,156)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD11	5	0.75
(1,156)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD12	5	0.75
(1,156)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD13	5	0.75
(1,156)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD21	5	0.75
(1,156)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD22	5	0.75

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,156)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD23	5	0.75
(1,155)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD11	5	0.75
(1,155)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD12	5	0.75
(1,155)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD13	5	0.75
(1,155)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD21	5	0.75
(1,155)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD22	5	0.75
(1,155)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD23	5	0.75
(1,1330)	1:A:82:THR:H	1:A:91:VAL:HB	10	0.75
(1,1286)	1:A:88:LYS:H	1:A:84:LEU:HG	10	0.75
(3,63)	1:A:129:ARG:N	1:A:109:ASP:O	4	0.74
(1,750)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:44:VAL:HG11	4	0.74
(1,750)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:44:VAL:HG12	4	0.74
(1,750)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:44:VAL:HG13	4	0.74
(1,750)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:44:VAL:HG11	4	0.74
(1,750)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:44:VAL:HG12	4	0.74
(1,750)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:44:VAL:HG13	4	0.74
(1,750)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:44:VAL:HG11	4	0.74
(1,750)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:44:VAL:HG12	4	0.74
(1,750)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:44:VAL:HG13	4	0.74
(1,73)	1:A:30:ILE:H	1:A:32:LYS:H	8	0.74
(1,729)	1:A:125:ARG:H	1:A:13:ASN:HA	4	0.74
(1,68)	1:A:33:ALA:H	1:A:31:LYS:H	8	0.74
(1,64)	1:A:33:ALA:H	1:A:31:LYS:HA	6	0.74
(1,491)	1:A:41:GLU:H	1:A:51:PHE:HA	7	0.74
(1,47)	1:A:19:TYR:H	1:A:19:TYR:HE1	2	0.74
(1,428)	1:A:17:GLU:H	1:A:19:TYR:H	2	0.74
(1,418)	1:A:19:TYR:H	1:A:17:GLU:HA	7	0.74
(1,384)	1:A:25:VAL:HG11	1:A:20:LEU:HD11	10	0.74
(1,384)	1:A:25:VAL:HG11	1:A:20:LEU:HD12	10	0.74
(1,384)	1:A:25:VAL:HG11	1:A:20:LEU:HD13	10	0.74
(1,384)	1:A:25:VAL:HG12	1:A:20:LEU:HD11	10	0.74
(1,384)	1:A:25:VAL:HG12	1:A:20:LEU:HD12	10	0.74
(1,384)	1:A:25:VAL:HG12	1:A:20:LEU:HD13	10	0.74
(1,384)	1:A:25:VAL:HG13	1:A:20:LEU:HD11	10	0.74
(1,384)	1:A:25:VAL:HG13	1:A:20:LEU:HD12	10	0.74
(1,384)	1:A:25:VAL:HG13	1:A:20:LEU:HD13	10	0.74
(1,34)	1:A:124:LYS:H	1:A:14:GLU:HB2	4	0.74
(1,34)	1:A:124:LYS:H	1:A:14:GLU:HB3	4	0.74
(1,21)	1:A:10:LEU:H	1:A:10:LEU:HG	9	0.74
(1,1862)	1:A:32:LYS:HA	1:A:31:LYS:HG3	10	0.74
(1,1578)	1:A:73:THR:HG21	1:A:71:LEU:HD11	4	0.74
(1,1578)	1:A:73:THR:HG21	1:A:71:LEU:HD12	4	0.74

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1578)	1:A:73:THR:HG21	1:A:71:LEU:HD13	4	0.74
(1,1578)	1:A:73:THR:HG21	1:A:71:LEU:HD21	4	0.74
(1,1578)	1:A:73:THR:HG21	1:A:71:LEU:HD22	4	0.74
(1,1578)	1:A:73:THR:HG21	1:A:71:LEU:HD23	4	0.74
(1,1578)	1:A:73:THR:HG22	1:A:71:LEU:HD11	4	0.74
(1,1578)	1:A:73:THR:HG22	1:A:71:LEU:HD12	4	0.74
(1,1578)	1:A:73:THR:HG22	1:A:71:LEU:HD13	4	0.74
(1,1578)	1:A:73:THR:HG22	1:A:71:LEU:HD21	4	0.74
(1,1578)	1:A:73:THR:HG22	1:A:71:LEU:HD22	4	0.74
(1,1578)	1:A:73:THR:HG22	1:A:71:LEU:HD23	4	0.74
(1,1578)	1:A:73:THR:HG23	1:A:71:LEU:HD11	4	0.74
(1,1578)	1:A:73:THR:HG23	1:A:71:LEU:HD12	4	0.74
(1,1578)	1:A:73:THR:HG23	1:A:71:LEU:HD13	4	0.74
(1,1578)	1:A:73:THR:HG23	1:A:71:LEU:HD21	4	0.74
(1,1578)	1:A:73:THR:HG23	1:A:71:LEU:HD22	4	0.74
(1,1578)	1:A:73:THR:HG23	1:A:71:LEU:HD23	4	0.74
(3,9)	1:A:10:LEU:N	1:A:40:TYR:O	5	0.73
(3,9)	1:A:10:LEU:N	1:A:40:TYR:O	9	0.73
(1,749)	1:A:54:SER:HA	1:A:39:VAL:HG11	9	0.73
(1,749)	1:A:54:SER:HA	1:A:39:VAL:HG12	9	0.73
(1,749)	1:A:54:SER:HA	1:A:39:VAL:HG13	9	0.73
(1,732)	1:A:33:ALA:H	1:A:74:VAL:HG11	1	0.73
(1,732)	1:A:33:ALA:H	1:A:74:VAL:HG12	1	0.73
(1,732)	1:A:33:ALA:H	1:A:74:VAL:HG13	1	0.73
(1,1933)	1:A:97:ASP:HB3	1:A:95:LEU:HD11	10	0.73
(1,1933)	1:A:97:ASP:HB3	1:A:95:LEU:HD12	10	0.73
(1,1933)	1:A:97:ASP:HB3	1:A:95:LEU:HD13	10	0.73
(1,1828)	1:A:35:SER:H	1:A:74:VAL:HG11	3	0.73
(1,1828)	1:A:35:SER:H	1:A:74:VAL:HG12	3	0.73
(1,1828)	1:A:35:SER:H	1:A:74:VAL:HG13	3	0.73
(1,1801)	1:A:45:ASN:HD22	1:A:2:VAL:HG11	5	0.73
(1,1801)	1:A:45:ASN:HD22	1:A:2:VAL:HG12	5	0.73
(1,1801)	1:A:45:ASN:HD22	1:A:2:VAL:HG13	5	0.73
(1,179)	1:A:97:ASP:H	1:A:95:LEU:HB2	9	0.73
(1,179)	1:A:97:ASP:H	1:A:95:LEU:HB3	9	0.73
(1,1785)	1:A:27:GLN:HE22	1:A:31:LYS:HD2	9	0.73
(1,1785)	1:A:27:GLN:HE22	1:A:31:LYS:HD3	9	0.73
(1,1783)	1:A:22:ALA:H	1:A:25:VAL:HG21	7	0.73
(1,1783)	1:A:22:ALA:H	1:A:25:VAL:HG22	7	0.73
(1,1783)	1:A:22:ALA:H	1:A:25:VAL:HG23	7	0.73
(1,168)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:HB	2	0.73
(1,1578)	1:A:73:THR:HG21	1:A:71:LEU:HD11	3	0.73

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1578)	1:A:73:THR:HG21	1:A:71:LEU:HD12	3	0.73
(1,1578)	1:A:73:THR:HG21	1:A:71:LEU:HD13	3	0.73
(1,1578)	1:A:73:THR:HG21	1:A:71:LEU:HD21	3	0.73
(1,1578)	1:A:73:THR:HG21	1:A:71:LEU:HD22	3	0.73
(1,1578)	1:A:73:THR:HG21	1:A:71:LEU:HD23	3	0.73
(1,1578)	1:A:73:THR:HG22	1:A:71:LEU:HD11	3	0.73
(1,1578)	1:A:73:THR:HG22	1:A:71:LEU:HD12	3	0.73
(1,1578)	1:A:73:THR:HG22	1:A:71:LEU:HD13	3	0.73
(1,1578)	1:A:73:THR:HG22	1:A:71:LEU:HD21	3	0.73
(1,1578)	1:A:73:THR:HG22	1:A:71:LEU:HD22	3	0.73
(1,1578)	1:A:73:THR:HG22	1:A:71:LEU:HD23	3	0.73
(1,1578)	1:A:73:THR:HG23	1:A:71:LEU:HD11	3	0.73
(1,1578)	1:A:73:THR:HG23	1:A:71:LEU:HD12	3	0.73
(1,1578)	1:A:73:THR:HG23	1:A:71:LEU:HD13	3	0.73
(1,1578)	1:A:73:THR:HG23	1:A:71:LEU:HD21	3	0.73
(1,1578)	1:A:73:THR:HG23	1:A:71:LEU:HD22	3	0.73
(1,1578)	1:A:73:THR:HG23	1:A:71:LEU:HD23	3	0.73
(1,1578)	1:A:73:THR:HG21	1:A:71:LEU:HD11	8	0.73
(1,1578)	1:A:73:THR:HG21	1:A:71:LEU:HD12	8	0.73
(1,1578)	1:A:73:THR:HG21	1:A:71:LEU:HD13	8	0.73
(1,1578)	1:A:73:THR:HG21	1:A:71:LEU:HD21	8	0.73
(1,1578)	1:A:73:THR:HG21	1:A:71:LEU:HD22	8	0.73
(1,1578)	1:A:73:THR:HG21	1:A:71:LEU:HD23	8	0.73
(1,1578)	1:A:73:THR:HG22	1:A:71:LEU:HD11	8	0.73
(1,1578)	1:A:73:THR:HG22	1:A:71:LEU:HD12	8	0.73
(1,1578)	1:A:73:THR:HG22	1:A:71:LEU:HD13	8	0.73
(1,1578)	1:A:73:THR:HG22	1:A:71:LEU:HD21	8	0.73
(1,1578)	1:A:73:THR:HG22	1:A:71:LEU:HD22	8	0.73
(1,1578)	1:A:73:THR:HG22	1:A:71:LEU:HD23	8	0.73
(1,1578)	1:A:73:THR:HG23	1:A:71:LEU:HD11	8	0.73
(1,1578)	1:A:73:THR:HG23	1:A:71:LEU:HD12	8	0.73
(1,1578)	1:A:73:THR:HG23	1:A:71:LEU:HD13	8	0.73
(1,1578)	1:A:73:THR:HG23	1:A:71:LEU:HD21	8	0.73
(1,1578)	1:A:73:THR:HG23	1:A:71:LEU:HD22	8	0.73
(1,1578)	1:A:73:THR:HG23	1:A:71:LEU:HD23	8	0.73
(1,972)	1:A:35:SER:H	1:A:31:LYS:HB2	8	0.72
(1,972)	1:A:35:SER:H	1:A:31:LYS:HB3	8	0.72
(1,742)	1:A:114:LEU:HG	1:A:13:ASN:HD22	9	0.72
(1,68)	1:A:33:ALA:H	1:A:31:LYS:H	1	0.72
(1,68)	1:A:33:ALA:H	1:A:31:LYS:H	3	0.72
(1,654)	1:A:89:LEU:HA	1:A:84:LEU:HG	10	0.72
(1,373)	1:A:76:MET:H	1:A:71:LEU:HD11	3	0.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,373)	1:A:76:MET:H	1:A:71:LEU:HD12	3	0.72
(1,373)	1:A:76:MET:H	1:A:71:LEU:HD13	3	0.72
(1,373)	1:A:76:MET:H	1:A:71:LEU:HD11	9	0.72
(1,373)	1:A:76:MET:H	1:A:71:LEU:HD12	9	0.72
(1,373)	1:A:76:MET:H	1:A:71:LEU:HD13	9	0.72
(1,223)	1:A:121:MET:H	1:A:118:ALA:H	3	0.72
(1,220)	1:A:123:ALA:H	1:A:117:CYS:HA	3	0.72
(1,2017)	1:A:63:VAL:HG11	1:A:89:LEU:HA	5	0.72
(1,2017)	1:A:63:VAL:HG12	1:A:89:LEU:HA	5	0.72
(1,2017)	1:A:63:VAL:HG13	1:A:89:LEU:HA	5	0.72
(1,1943)	1:A:45:ASN:HB3	1:A:2:VAL:HA	2	0.72
(1,1938)	1:A:118:ALA:HB1	1:A:122:VAL:HB	3	0.72
(1,1938)	1:A:118:ALA:HB2	1:A:122:VAL:HB	3	0.72
(1,1938)	1:A:118:ALA:HB3	1:A:122:VAL:HB	3	0.72
(1,1921)	1:A:48:LYS:HD2	1:A:45:ASN:HB3	9	0.72
(1,1921)	1:A:48:LYS:HD3	1:A:45:ASN:HB3	9	0.72
(1,1862)	1:A:32:LYS:HA	1:A:31:LYS:HG3	1	0.72
(1,1862)	1:A:32:LYS:HA	1:A:31:LYS:HG3	6	0.72
(1,1760)	1:A:77:ASN:HD21	1:A:76:MET:HB2	9	0.72
(1,171)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:H	5	0.72
(1,1652)	1:A:65:GLU:HA	1:A:83:LYS:HA	9	0.72
(1,1458)	1:A:115:THR:H	1:A:114:LEU:HG	9	0.72
(1,1458)	1:A:115:THR:H	1:A:114:LEU:HG	10	0.72
(1,754)	1:A:79:LYS:HG3	1:A:68:GLU:HA	2	0.71
(1,742)	1:A:114:LEU:HG	1:A:13:ASN:HD22	7	0.71
(1,73)	1:A:30:ILE:H	1:A:32:LYS:H	4	0.71
(1,727)	1:A:85:GLU:H	1:A:89:LEU:HG	9	0.71
(1,49)	1:A:23:LEU:H	1:A:21:ALA:HA	5	0.71
(1,34)	1:A:124:LYS:H	1:A:14:GLU:HB2	1	0.71
(1,34)	1:A:124:LYS:H	1:A:14:GLU:HB3	1	0.71
(1,270)	1:A:73:THR:HG21	1:A:33:ALA:HB1	6	0.71
(1,270)	1:A:73:THR:HG21	1:A:33:ALA:HB2	6	0.71
(1,270)	1:A:73:THR:HG21	1:A:33:ALA:HB3	6	0.71
(1,270)	1:A:73:THR:HG22	1:A:33:ALA:HB1	6	0.71
(1,270)	1:A:73:THR:HG22	1:A:33:ALA:HB2	6	0.71
(1,270)	1:A:73:THR:HG22	1:A:33:ALA:HB3	6	0.71
(1,270)	1:A:73:THR:HG23	1:A:33:ALA:HB1	6	0.71
(1,270)	1:A:73:THR:HG23	1:A:33:ALA:HB2	6	0.71
(1,270)	1:A:73:THR:HG23	1:A:33:ALA:HB3	6	0.71
(1,247)	1:A:124:LYS:H	1:A:125:ARG:H	8	0.71
(1,2041)	1:A:93:SER:HB2	1:A:116:MET:HG3	1	0.71
(1,2026)	1:A:78:ILE:HG13	1:A:96:PRO:HD2	8	0.71

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1923)	1:A:67:VAL:HG21	1:A:65:GLU:HB2	10	0.71
(1,1923)	1:A:67:VAL:HG22	1:A:65:GLU:HB2	10	0.71
(1,1923)	1:A:67:VAL:HG23	1:A:65:GLU:HB2	10	0.71
(1,1862)	1:A:32:LYS:HA	1:A:31:LYS:HG3	4	0.71
(1,1828)	1:A:35:SER:H	1:A:74:VAL:HG11	8	0.71
(1,1828)	1:A:35:SER:H	1:A:74:VAL:HG12	8	0.71
(1,1828)	1:A:35:SER:H	1:A:74:VAL:HG13	8	0.71
(1,131)	1:A:63:VAL:H	1:A:62:ILE:HD11	8	0.71
(1,131)	1:A:63:VAL:H	1:A:62:ILE:HD12	8	0.71
(1,131)	1:A:63:VAL:H	1:A:62:ILE:HD13	8	0.71
(1,729)	1:A:125:ARG:H	1:A:13:ASN:HA	5	0.7
(1,66)	1:A:29:SER:H	1:A:31:LYS:H	4	0.7
(1,286)	1:A:23:LEU:HG	1:A:95:LEU:HG	8	0.7
(1,196)	1:A:106:GLU:H	1:A:105:TYR:HB2	8	0.7
(1,196)	1:A:106:GLU:H	1:A:105:TYR:HB3	8	0.7
(1,1925)	1:A:71:LEU:HD11	1:A:74:VAL:HB	8	0.7
(1,1925)	1:A:71:LEU:HD12	1:A:74:VAL:HB	8	0.7
(1,1925)	1:A:71:LEU:HD13	1:A:74:VAL:HB	8	0.7
(1,1807)	1:A:122:VAL:H	1:A:15:ASN:HD21	6	0.7
(1,152)	1:A:92:ASN:H	1:A:82:THR:HA	9	0.7
(3,25)	1:A:22:ALA:N	1:A:18:GLU:O	3	0.69
(1,744)	1:A:123:ALA:HB1	1:A:19:TYR:HB3	3	0.69
(1,744)	1:A:123:ALA:HB2	1:A:19:TYR:HB3	3	0.69
(1,744)	1:A:123:ALA:HB3	1:A:19:TYR:HB3	3	0.69
(1,724)	1:A:17:GLU:H	1:A:20:LEU:HB2	5	0.69
(1,572)	1:A:84:LEU:H	1:A:89:LEU:HG	1	0.69
(1,493)	1:A:56:GLY:H	1:A:57:MET:HB2	6	0.69
(1,493)	1:A:56:GLY:H	1:A:57:MET:HB3	6	0.69
(1,39)	1:A:17:GLU:H	1:A:15:ASN:H	2	0.69
(1,385)	1:A:33:ALA:HB1	1:A:25:VAL:HG11	4	0.69
(1,385)	1:A:33:ALA:HB1	1:A:25:VAL:HG12	4	0.69
(1,385)	1:A:33:ALA:HB1	1:A:25:VAL:HG13	4	0.69
(1,385)	1:A:33:ALA:HB2	1:A:25:VAL:HG11	4	0.69
(1,385)	1:A:33:ALA:HB2	1:A:25:VAL:HG12	4	0.69
(1,385)	1:A:33:ALA:HB2	1:A:25:VAL:HG13	4	0.69
(1,385)	1:A:33:ALA:HB3	1:A:25:VAL:HG11	4	0.69
(1,385)	1:A:33:ALA:HB3	1:A:25:VAL:HG12	4	0.69
(1,385)	1:A:33:ALA:HB3	1:A:25:VAL:HG13	4	0.69
(1,275)	1:A:77:ASN:HB2	1:A:70:VAL:HA	2	0.69
(1,275)	1:A:77:ASN:HB3	1:A:70:VAL:HA	2	0.69
(1,247)	1:A:124:LYS:H	1:A:125:ARG:H	6	0.69
(1,233)	1:A:19:TYR:H	1:A:123:ALA:HB1	3	0.69

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,233)	1:A:19:TYR:H	1:A:123:ALA:HB2	3	0.69
(1,233)	1:A:19:TYR:H	1:A:123:ALA:HB3	3	0.69
(1,213)	1:A:125:ARG:H	1:A:114:LEU:HB2	4	0.69
(1,213)	1:A:125:ARG:H	1:A:114:LEU:HB3	4	0.69
(1,212)	1:A:125:ARG:H	1:A:114:LEU:HB2	4	0.69
(1,212)	1:A:125:ARG:H	1:A:114:LEU:HB3	4	0.69
(1,205)	1:A:129:ARG:H	1:A:111:GLY:HA2	9	0.69
(1,205)	1:A:129:ARG:H	1:A:111:GLY:HA3	9	0.69
(1,2026)	1:A:78:ILE:HG13	1:A:96:PRO:HD2	10	0.69
(1,1933)	1:A:97:ASP:HB3	1:A:95:LEU:HD11	6	0.69
(1,1933)	1:A:97:ASP:HB3	1:A:95:LEU:HD12	6	0.69
(1,1933)	1:A:97:ASP:HB3	1:A:95:LEU:HD13	6	0.69
(1,1877)	1:A:3:GLN:HB3	1:A:6:GLY:HA2	3	0.69
(1,1877)	1:A:3:GLN:HB3	1:A:6:GLY:HA2	4	0.69
(1,1768)	1:A:12:LYS:H	1:A:10:LEU:HB3	5	0.69
(1,164)	1:A:81:PHE:H	1:A:91:VAL:HA	8	0.69
(1,1578)	1:A:73:THR:HG21	1:A:71:LEU:HD11	6	0.69
(1,1578)	1:A:73:THR:HG21	1:A:71:LEU:HD12	6	0.69
(1,1578)	1:A:73:THR:HG21	1:A:71:LEU:HD13	6	0.69
(1,1578)	1:A:73:THR:HG21	1:A:71:LEU:HD21	6	0.69
(1,1578)	1:A:73:THR:HG21	1:A:71:LEU:HD22	6	0.69
(1,1578)	1:A:73:THR:HG21	1:A:71:LEU:HD23	6	0.69
(1,1578)	1:A:73:THR:HG22	1:A:71:LEU:HD11	6	0.69
(1,1578)	1:A:73:THR:HG22	1:A:71:LEU:HD12	6	0.69
(1,1578)	1:A:73:THR:HG22	1:A:71:LEU:HD13	6	0.69
(1,1578)	1:A:73:THR:HG22	1:A:71:LEU:HD21	6	0.69
(1,1578)	1:A:73:THR:HG22	1:A:71:LEU:HD22	6	0.69
(1,1578)	1:A:73:THR:HG22	1:A:71:LEU:HD23	6	0.69
(1,1578)	1:A:73:THR:HG23	1:A:71:LEU:HD11	6	0.69
(1,1578)	1:A:73:THR:HG23	1:A:71:LEU:HD12	6	0.69
(1,1578)	1:A:73:THR:HG23	1:A:71:LEU:HD13	6	0.69
(1,1578)	1:A:73:THR:HG23	1:A:71:LEU:HD21	6	0.69
(1,1578)	1:A:73:THR:HG23	1:A:71:LEU:HD22	6	0.69
(1,1578)	1:A:73:THR:HG23	1:A:71:LEU:HD23	6	0.69
(1,110)	1:A:41:GLU:H	1:A:53:SER:HA	2	0.69
(3,17)	1:A:124:LYS:N	1:A:14:GLU:O	10	0.68
(2,6)	1:A:39:VAL:H	1:A:54:SER:H	8	0.68
(1,88)	1:A:54:SER:H	1:A:39:VAL:H	8	0.68
(1,374)	1:A:80:SER:H	1:A:94:GLU:HG2	10	0.68
(1,374)	1:A:80:SER:H	1:A:94:GLU:HG3	10	0.68
(1,22)	1:A:11:GLU:H	1:A:10:LEU:HG	4	0.68
(1,1970)	1:A:124:LYS:HG3	1:A:14:GLU:HB3	9	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1946)	1:A:48:LYS:HA	1:A:2:VAL:HG11	9	0.68
(1,1946)	1:A:48:LYS:HA	1:A:2:VAL:HG12	9	0.68
(1,1946)	1:A:48:LYS:HA	1:A:2:VAL:HG13	9	0.68
(1,1905)	1:A:27:GLN:HA	1:A:30:ILE:HG12	2	0.68
(1,1816)	1:A:39:VAL:H	1:A:54:SER:HA	7	0.68
(1,1631)	1:A:113:VAL:HG21	1:A:126:TYR:HE1	8	0.68
(1,1631)	1:A:113:VAL:HG22	1:A:126:TYR:HE1	8	0.68
(1,1631)	1:A:113:VAL:HG23	1:A:126:TYR:HE1	8	0.68
(1,1578)	1:A:73:THR:HG21	1:A:71:LEU:HD11	9	0.68
(1,1578)	1:A:73:THR:HG21	1:A:71:LEU:HD12	9	0.68
(1,1578)	1:A:73:THR:HG21	1:A:71:LEU:HD13	9	0.68
(1,1578)	1:A:73:THR:HG21	1:A:71:LEU:HD21	9	0.68
(1,1578)	1:A:73:THR:HG21	1:A:71:LEU:HD22	9	0.68
(1,1578)	1:A:73:THR:HG21	1:A:71:LEU:HD23	9	0.68
(1,1578)	1:A:73:THR:HG22	1:A:71:LEU:HD11	9	0.68
(1,1578)	1:A:73:THR:HG22	1:A:71:LEU:HD12	9	0.68
(1,1578)	1:A:73:THR:HG22	1:A:71:LEU:HD13	9	0.68
(1,1578)	1:A:73:THR:HG22	1:A:71:LEU:HD21	9	0.68
(1,1578)	1:A:73:THR:HG22	1:A:71:LEU:HD22	9	0.68
(1,1578)	1:A:73:THR:HG22	1:A:71:LEU:HD23	9	0.68
(1,1578)	1:A:73:THR:HG23	1:A:71:LEU:HD11	9	0.68
(1,1578)	1:A:73:THR:HG23	1:A:71:LEU:HD12	9	0.68
(1,1578)	1:A:73:THR:HG23	1:A:71:LEU:HD13	9	0.68
(1,1578)	1:A:73:THR:HG23	1:A:71:LEU:HD21	9	0.68
(1,1578)	1:A:73:THR:HG23	1:A:71:LEU:HD22	9	0.68
(1,1578)	1:A:73:THR:HG23	1:A:71:LEU:HD23	9	0.68
(1,156)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD11	2	0.68
(1,156)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD12	2	0.68
(1,156)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD13	2	0.68
(1,156)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD21	2	0.68
(1,156)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD22	2	0.68
(1,156)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD23	2	0.68
(1,155)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD11	2	0.68
(1,155)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD12	2	0.68
(1,155)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD13	2	0.68
(1,155)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD21	2	0.68
(1,155)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD22	2	0.68
(1,155)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD23	2	0.68
(3,17)	1:A:124:LYS:N	1:A:14:GLU:O	7	0.67
(1,749)	1:A:54:SER:HA	1:A:39:VAL:HG11	5	0.67
(1,749)	1:A:54:SER:HA	1:A:39:VAL:HG12	5	0.67
(1,749)	1:A:54:SER:HA	1:A:39:VAL:HG13	5	0.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,65)	1:A:34:ASN:H	1:A:31:LYS:HA	2	0.67
(1,387)	1:A:10:LEU:HG	1:A:38:VAL:HB	1	0.67
(1,211)	1:A:127:PHE:H	1:A:113:VAL:HG21	2	0.67
(1,211)	1:A:127:PHE:H	1:A:113:VAL:HG22	2	0.67
(1,211)	1:A:127:PHE:H	1:A:113:VAL:HG23	2	0.67
(1,205)	1:A:129:ARG:H	1:A:111:GLY:HA2	5	0.67
(1,205)	1:A:129:ARG:H	1:A:111:GLY:HA3	5	0.67
(1,1989)	1:A:39:VAL:HG21	1:A:54:SER:HA	10	0.67
(1,1989)	1:A:39:VAL:HG22	1:A:54:SER:HA	10	0.67
(1,1989)	1:A:39:VAL:HG23	1:A:54:SER:HA	10	0.67
(1,1951)	1:A:87:SER:HB3	1:A:4:LEU:HD21	10	0.67
(1,1951)	1:A:87:SER:HB3	1:A:4:LEU:HD22	10	0.67
(1,1951)	1:A:87:SER:HB3	1:A:4:LEU:HD23	10	0.67
(1,1914)	1:A:30:ILE:HG13	1:A:34:ASN:HB2	6	0.67
(1,1910)	1:A:27:GLN:HG2	1:A:31:LYS:HG2	10	0.67
(1,1910)	1:A:27:GLN:HG3	1:A:31:LYS:HG2	10	0.67
(1,1907)	1:A:34:ASN:HB2	1:A:30:ILE:HG13	6	0.67
(1,1898)	1:A:31:LYS:HG2	1:A:27:GLN:HG2	10	0.67
(1,1898)	1:A:31:LYS:HG2	1:A:27:GLN:HG3	10	0.67
(1,1862)	1:A:32:LYS:HA	1:A:31:LYS:HG3	2	0.67
(1,181)	1:A:95:LEU:H	1:A:96:PRO:HD2	5	0.67
(1,181)	1:A:95:LEU:H	1:A:96:PRO:HD3	5	0.67
(1,1651)	1:A:65:GLU:H	1:A:84:LEU:HD11	6	0.67
(1,1651)	1:A:65:GLU:H	1:A:84:LEU:HD12	6	0.67
(1,1651)	1:A:65:GLU:H	1:A:84:LEU:HD13	6	0.67
(1,1651)	1:A:65:GLU:H	1:A:84:LEU:HD21	6	0.67
(1,1651)	1:A:65:GLU:H	1:A:84:LEU:HD22	6	0.67
(1,1651)	1:A:65:GLU:H	1:A:84:LEU:HD23	6	0.67
(1,164)	1:A:81:PHE:H	1:A:91:VAL:HA	6	0.67
(1,164)	1:A:81:PHE:H	1:A:91:VAL:HA	7	0.67
(1,139)	1:A:33:ALA:H	1:A:73:THR:HB	8	0.67
(1,1249)	1:A:94:GLU:H	1:A:78:ILE:HG21	6	0.67
(1,1249)	1:A:94:GLU:H	1:A:78:ILE:HG22	6	0.67
(1,1249)	1:A:94:GLU:H	1:A:78:ILE:HG23	6	0.67
(1,110)	1:A:41:GLU:H	1:A:53:SER:HA	7	0.67
(1,728)	1:A:45:ASN:H	1:A:2:VAL:HG11	3	0.66
(1,728)	1:A:45:ASN:H	1:A:2:VAL:HG12	3	0.66
(1,728)	1:A:45:ASN:H	1:A:2:VAL:HG13	3	0.66
(1,390)	1:A:106:GLU:HA	1:A:88:LYS:HB3	4	0.66
(1,378)	1:A:48:LYS:HB2	1:A:2:VAL:HG11	5	0.66
(1,378)	1:A:48:LYS:HB2	1:A:2:VAL:HG12	5	0.66
(1,378)	1:A:48:LYS:HB2	1:A:2:VAL:HG13	5	0.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,371)	1:A:32:LYS:H	1:A:33:ALA:HB1	3	0.66
(1,371)	1:A:32:LYS:H	1:A:33:ALA:HB2	3	0.66
(1,371)	1:A:32:LYS:H	1:A:33:ALA:HB3	3	0.66
(1,347)	1:A:43:ILE:H	1:A:50:THR:HB	7	0.66
(1,222)	1:A:120:ASP:H	1:A:118:ALA:HA	2	0.66
(1,2023)	1:A:78:ILE:HG13	1:A:93:SER:HB3	7	0.66
(1,1801)	1:A:45:ASN:HD22	1:A:2:VAL:HG11	10	0.66
(1,1801)	1:A:45:ASN:HD22	1:A:2:VAL:HG12	10	0.66
(1,1801)	1:A:45:ASN:HD22	1:A:2:VAL:HG13	10	0.66
(1,1789)	1:A:48:LYS:H	1:A:45:ASN:HD21	9	0.66
(1,1784)	1:A:27:GLN:HE21	1:A:29:SER:H	9	0.66
(1,1783)	1:A:22:ALA:H	1:A:25:VAL:HG21	10	0.66
(1,1783)	1:A:22:ALA:H	1:A:25:VAL:HG22	10	0.66
(1,1783)	1:A:22:ALA:H	1:A:25:VAL:HG23	10	0.66
(1,168)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:HB	5	0.66
(1,729)	1:A:125:ARG:H	1:A:13:ASN:HA	8	0.65
(1,689)	1:A:79:LYS:H	1:A:95:LEU:HA	4	0.65
(1,49)	1:A:23:LEU:H	1:A:21:ALA:HA	10	0.65
(1,396)	1:A:11:GLU:HG2	1:A:128:ILE:HG12	4	0.65
(1,396)	1:A:11:GLU:HG3	1:A:128:ILE:HG12	4	0.65
(1,395)	1:A:115:THR:HB	1:A:124:LYS:HD2	9	0.65
(1,395)	1:A:115:THR:HB	1:A:124:LYS:HD3	9	0.65
(1,1972)	1:A:27:GLN:HA	1:A:17:GLU:HA	4	0.65
(1,196)	1:A:106:GLU:H	1:A:105:TYR:HB2	9	0.65
(1,196)	1:A:106:GLU:H	1:A:105:TYR:HB3	9	0.65
(1,1938)	1:A:118:ALA:HB1	1:A:122:VAL:HB	8	0.65
(1,1938)	1:A:118:ALA:HB2	1:A:122:VAL:HB	8	0.65
(1,1938)	1:A:118:ALA:HB3	1:A:122:VAL:HB	8	0.65
(1,1901)	1:A:32:LYS:HE2	1:A:29:SER:HB2	3	0.65
(1,1901)	1:A:32:LYS:HE3	1:A:29:SER:HB2	3	0.65
(1,1862)	1:A:32:LYS:HA	1:A:31:LYS:HG3	8	0.65
(1,181)	1:A:95:LEU:H	1:A:96:PRO:HD2	2	0.65
(1,181)	1:A:95:LEU:H	1:A:96:PRO:HD3	2	0.65
(1,181)	1:A:95:LEU:H	1:A:96:PRO:HD2	6	0.65
(1,181)	1:A:95:LEU:H	1:A:96:PRO:HD3	6	0.65
(1,1808)	1:A:33:ALA:H	1:A:20:LEU:HD11	9	0.65
(1,1808)	1:A:33:ALA:H	1:A:20:LEU:HD12	9	0.65
(1,1808)	1:A:33:ALA:H	1:A:20:LEU:HD13	9	0.65
(1,1800)	1:A:45:ASN:HD21	1:A:2:VAL:HG11	3	0.65
(1,1800)	1:A:45:ASN:HD21	1:A:2:VAL:HG12	3	0.65
(1,1800)	1:A:45:ASN:HD21	1:A:2:VAL:HG13	3	0.65
(1,1779)	1:A:15:ASN:HD22	1:A:18:GLU:HB3	9	0.65

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1760)	1:A:77:ASN:HD21	1:A:76:MET:HB2	6	0.65
(1,139)	1:A:33:ALA:H	1:A:73:THR:HB	2	0.65
(1,12)	1:A:130:THR:H	1:A:8:TYR:HA	6	0.65
(3,37)	1:A:61:LEU:N	1:A:51:PHE:O	8	0.64
(1,759)	1:A:78:ILE:HB	1:A:93:SER:HB3	3	0.64
(1,759)	1:A:78:ILE:HB	1:A:93:SER:HB3	9	0.64
(1,729)	1:A:125:ARG:H	1:A:13:ASN:HA	7	0.64
(1,728)	1:A:45:ASN:H	1:A:2:VAL:HG11	4	0.64
(1,728)	1:A:45:ASN:H	1:A:2:VAL:HG12	4	0.64
(1,728)	1:A:45:ASN:H	1:A:2:VAL:HG13	4	0.64
(1,691)	1:A:34:ASN:H	1:A:32:LYS:HA	5	0.64
(1,68)	1:A:33:ALA:H	1:A:31:LYS:H	2	0.64
(1,66)	1:A:29:SER:H	1:A:31:LYS:H	10	0.64
(1,428)	1:A:17:GLU:H	1:A:19:TYR:H	4	0.64
(1,215)	1:A:124:LYS:H	1:A:115:THR:HA	8	0.64
(1,210)	1:A:127:PHE:H	1:A:113:VAL:HA	4	0.64
(1,2026)	1:A:78:ILE:HG13	1:A:96:PRO:HD2	9	0.64
(1,1992)	1:A:80:SER:HB2	1:A:61:LEU:HB3	9	0.64
(1,1992)	1:A:80:SER:HB3	1:A:61:LEU:HB3	9	0.64
(1,1989)	1:A:39:VAL:HG21	1:A:54:SER:HA	5	0.64
(1,1989)	1:A:39:VAL:HG22	1:A:54:SER:HA	5	0.64
(1,1989)	1:A:39:VAL:HG23	1:A:54:SER:HA	5	0.64
(1,196)	1:A:106:GLU:H	1:A:105:TYR:HB2	6	0.64
(1,196)	1:A:106:GLU:H	1:A:105:TYR:HB3	6	0.64
(1,19)	1:A:128:ILE:H	1:A:10:LEU:HA	3	0.64
(1,1816)	1:A:39:VAL:H	1:A:54:SER:HA	5	0.64
(1,1789)	1:A:48:LYS:H	1:A:45:ASN:HD21	3	0.64
(1,1527)	1:A:47:ASN:HA	1:A:2:VAL:HB	9	0.64
(1,152)	1:A:92:ASN:H	1:A:82:THR:HA	2	0.64
(1,1244)	1:A:94:GLU:H	1:A:78:ILE:HD11	9	0.64
(1,1244)	1:A:94:GLU:H	1:A:78:ILE:HD12	9	0.64
(1,1244)	1:A:94:GLU:H	1:A:78:ILE:HD13	9	0.64
(1,1207)	1:A:76:MET:H	1:A:72:GLY:HA2	3	0.64
(1,1207)	1:A:76:MET:H	1:A:72:GLY:HA3	3	0.64
(1,1207)	1:A:76:MET:H	1:A:72:GLY:HA2	5	0.64
(1,1207)	1:A:76:MET:H	1:A:72:GLY:HA3	5	0.64
(1,110)	1:A:41:GLU:H	1:A:53:SER:HA	5	0.64
(1,373)	1:A:76:MET:H	1:A:71:LEU:HD11	10	0.63
(1,373)	1:A:76:MET:H	1:A:71:LEU:HD12	10	0.63
(1,373)	1:A:76:MET:H	1:A:71:LEU:HD13	10	0.63
(1,351)	1:A:88:LYS:H	1:A:85:GLU:H	1	0.63
(1,29)	1:A:14:GLU:H	1:A:13:ASN:HB2	5	0.63

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,29)	1:A:14:GLU:H	1:A:13:ASN:HB3	5	0.63
(1,222)	1:A:120:ASP:H	1:A:118:ALA:HA	6	0.63
(1,205)	1:A:129:ARG:H	1:A:111:GLY:HA2	6	0.63
(1,205)	1:A:129:ARG:H	1:A:111:GLY:HA3	6	0.63
(1,2036)	1:A:125:ARG:HB3	1:A:114:LEU:HD11	7	0.63
(1,2036)	1:A:125:ARG:HB3	1:A:114:LEU:HD12	7	0.63
(1,2036)	1:A:125:ARG:HB3	1:A:114:LEU:HD13	7	0.63
(1,2001)	1:A:34:ASN:HB2	1:A:74:VAL:HG11	4	0.63
(1,2001)	1:A:34:ASN:HB2	1:A:74:VAL:HG12	4	0.63
(1,2001)	1:A:34:ASN:HB2	1:A:74:VAL:HG13	4	0.63
(1,1877)	1:A:3:GLN:HB3	1:A:6:GLY:HA2	6	0.63
(1,1813)	1:A:3:GLN:HE22	1:A:45:ASN:HA	1	0.63
(1,181)	1:A:95:LEU:H	1:A:96:PRO:HD2	4	0.63
(1,181)	1:A:95:LEU:H	1:A:96:PRO:HD3	4	0.63
(1,1808)	1:A:33:ALA:H	1:A:20:LEU:HD11	7	0.63
(1,1808)	1:A:33:ALA:H	1:A:20:LEU:HD12	7	0.63
(1,1808)	1:A:33:ALA:H	1:A:20:LEU:HD13	7	0.63
(1,1807)	1:A:122:VAL:H	1:A:15:ASN:HD21	7	0.63
(1,136)	1:A:66:GLU:H	1:A:65:GLU:HG2	10	0.63
(1,136)	1:A:66:GLU:H	1:A:65:GLU:HG3	10	0.63
(1,1249)	1:A:94:GLU:H	1:A:78:ILE:HG21	1	0.63
(1,1249)	1:A:94:GLU:H	1:A:78:ILE:HG22	1	0.63
(1,1249)	1:A:94:GLU:H	1:A:78:ILE:HG23	1	0.63
(3,20)	1:A:19:TYR:H	1:A:15:ASN:O	3	0.62
(2,6)	1:A:39:VAL:H	1:A:54:SER:H	9	0.62
(1,88)	1:A:54:SER:H	1:A:39:VAL:H	9	0.62
(1,729)	1:A:125:ARG:H	1:A:13:ASN:HA	10	0.62
(1,727)	1:A:85:GLU:H	1:A:89:LEU:HG	2	0.62
(1,727)	1:A:85:GLU:H	1:A:89:LEU:HG	8	0.62
(1,724)	1:A:17:GLU:H	1:A:20:LEU:HB2	8	0.62
(1,451)	1:A:35:SER:H	1:A:31:LYS:HA	3	0.62
(1,43)	1:A:22:ALA:H	1:A:18:GLU:HA	8	0.62
(1,395)	1:A:115:THR:HB	1:A:124:LYS:HD2	5	0.62
(1,395)	1:A:115:THR:HB	1:A:124:LYS:HD3	5	0.62
(1,394)	1:A:126:TYR:HB2	1:A:113:VAL:HA	6	0.62
(1,378)	1:A:48:LYS:HB2	1:A:2:VAL:HG11	2	0.62
(1,378)	1:A:48:LYS:HB2	1:A:2:VAL:HG12	2	0.62
(1,378)	1:A:48:LYS:HB2	1:A:2:VAL:HG13	2	0.62
(1,286)	1:A:23:LEU:HG	1:A:95:LEU:HG	4	0.62
(1,247)	1:A:124:LYS:H	1:A:125:ARG:H	4	0.62
(1,2004)	1:A:93:SER:HB2	1:A:78:ILE:HG12	9	0.62
(1,1989)	1:A:39:VAL:HG21	1:A:54:SER:HA	8	0.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1989)	1:A:39:VAL:HG22	1:A:54:SER:HA	8	0.62
(1,1989)	1:A:39:VAL:HG23	1:A:54:SER:HA	8	0.62
(1,1784)	1:A:27:GLN:HE21	1:A:29:SER:H	2	0.62
(1,171)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:H	9	0.62
(1,171)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:H	10	0.62
(1,1651)	1:A:65:GLU:H	1:A:84:LEU:HD11	5	0.62
(1,1651)	1:A:65:GLU:H	1:A:84:LEU:HD12	5	0.62
(1,1651)	1:A:65:GLU:H	1:A:84:LEU:HD13	5	0.62
(1,1651)	1:A:65:GLU:H	1:A:84:LEU:HD21	5	0.62
(1,1651)	1:A:65:GLU:H	1:A:84:LEU:HD22	5	0.62
(1,1651)	1:A:65:GLU:H	1:A:84:LEU:HD23	5	0.62
(1,156)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD11	7	0.62
(1,156)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD12	7	0.62
(1,156)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD13	7	0.62
(1,156)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD21	7	0.62
(1,156)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD22	7	0.62
(1,156)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD23	7	0.62
(1,155)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD11	7	0.62
(1,155)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD12	7	0.62
(1,155)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD13	7	0.62
(1,155)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD21	7	0.62
(1,155)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD22	7	0.62
(1,155)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD23	7	0.62
(1,136)	1:A:66:GLU:H	1:A:65:GLU:HG2	7	0.62
(1,136)	1:A:66:GLU:H	1:A:65:GLU:HG3	7	0.62
(3,19)	1:A:19:TYR:N	1:A:15:ASN:O	2	0.61
(1,73)	1:A:30:ILE:H	1:A:32:LYS:H	7	0.61
(1,38)	1:A:15:ASN:H	1:A:15:ASN:HD21	10	0.61
(1,38)	1:A:15:ASN:H	1:A:15:ASN:HD22	10	0.61
(1,286)	1:A:23:LEU:HG	1:A:95:LEU:HG	2	0.61
(1,2026)	1:A:78:ILE:HG13	1:A:96:PRO:HD2	1	0.61
(1,1935)	1:A:94:GLU:HG2	1:A:96:PRO:HB2	6	0.61
(1,1935)	1:A:94:GLU:HG3	1:A:96:PRO:HB2	6	0.61
(1,181)	1:A:95:LEU:H	1:A:96:PRO:HD2	8	0.61
(1,181)	1:A:95:LEU:H	1:A:96:PRO:HD3	8	0.61
(1,1801)	1:A:45:ASN:HD22	1:A:2:VAL:HG11	9	0.61
(1,1801)	1:A:45:ASN:HD22	1:A:2:VAL:HG12	9	0.61
(1,1801)	1:A:45:ASN:HD22	1:A:2:VAL:HG13	9	0.61
(1,1788)	1:A:47:ASN:H	1:A:45:ASN:HB3	7	0.61
(1,64)	1:A:33:ALA:H	1:A:31:LYS:HA	7	0.6
(1,64)	1:A:33:ALA:H	1:A:31:LYS:HA	8	0.6
(1,43)	1:A:22:ALA:H	1:A:18:GLU:HA	5	0.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,396)	1:A:11:GLU:HG2	1:A:128:ILE:HG12	10	0.6
(1,396)	1:A:11:GLU:HG3	1:A:128:ILE:HG12	10	0.6
(1,385)	1:A:33:ALA:HB1	1:A:25:VAL:HG11	7	0.6
(1,385)	1:A:33:ALA:HB1	1:A:25:VAL:HG12	7	0.6
(1,385)	1:A:33:ALA:HB1	1:A:25:VAL:HG13	7	0.6
(1,385)	1:A:33:ALA:HB2	1:A:25:VAL:HG11	7	0.6
(1,385)	1:A:33:ALA:HB2	1:A:25:VAL:HG12	7	0.6
(1,385)	1:A:33:ALA:HB2	1:A:25:VAL:HG13	7	0.6
(1,385)	1:A:33:ALA:HB3	1:A:25:VAL:HG11	7	0.6
(1,385)	1:A:33:ALA:HB3	1:A:25:VAL:HG12	7	0.6
(1,385)	1:A:33:ALA:HB3	1:A:25:VAL:HG13	7	0.6
(1,38)	1:A:15:ASN:H	1:A:15:ASN:HD21	4	0.6
(1,38)	1:A:15:ASN:H	1:A:15:ASN:HD22	4	0.6
(1,2044)	1:A:122:VAL:HG21	1:A:117:CYS:HB2	9	0.6
(1,2044)	1:A:122:VAL:HG22	1:A:117:CYS:HB2	9	0.6
(1,2044)	1:A:122:VAL:HG23	1:A:117:CYS:HB2	9	0.6
(1,2026)	1:A:78:ILE:HG13	1:A:96:PRO:HD2	2	0.6
(1,2019)	1:A:63:VAL:HG21	1:A:89:LEU:HB2	6	0.6
(1,2019)	1:A:63:VAL:HG22	1:A:89:LEU:HB2	6	0.6
(1,2019)	1:A:63:VAL:HG23	1:A:89:LEU:HB2	6	0.6
(1,2002)	1:A:34:ASN:HB3	1:A:74:VAL:HG11	6	0.6
(1,2002)	1:A:34:ASN:HB3	1:A:74:VAL:HG12	6	0.6
(1,2002)	1:A:34:ASN:HB3	1:A:74:VAL:HG13	6	0.6
(1,1965)	1:A:114:LEU:HD21	1:A:13:ASN:HB2	6	0.6
(1,1965)	1:A:114:LEU:HD22	1:A:13:ASN:HB2	6	0.6
(1,1965)	1:A:114:LEU:HD23	1:A:13:ASN:HB2	6	0.6
(1,1963)	1:A:125:ARG:HB2	1:A:10:LEU:HD21	8	0.6
(1,1963)	1:A:125:ARG:HB2	1:A:10:LEU:HD22	8	0.6
(1,1963)	1:A:125:ARG:HB2	1:A:10:LEU:HD23	8	0.6
(1,1938)	1:A:118:ALA:HB1	1:A:122:VAL:HB	5	0.6
(1,1938)	1:A:118:ALA:HB2	1:A:122:VAL:HB	5	0.6
(1,1938)	1:A:118:ALA:HB3	1:A:122:VAL:HB	5	0.6
(1,1828)	1:A:35:SER:H	1:A:74:VAL:HG11	7	0.6
(1,1828)	1:A:35:SER:H	1:A:74:VAL:HG12	7	0.6
(1,1828)	1:A:35:SER:H	1:A:74:VAL:HG13	7	0.6
(1,1808)	1:A:33:ALA:H	1:A:20:LEU:HD11	10	0.6
(1,1808)	1:A:33:ALA:H	1:A:20:LEU:HD12	10	0.6
(1,1808)	1:A:33:ALA:H	1:A:20:LEU:HD13	10	0.6
(1,139)	1:A:33:ALA:H	1:A:73:THR:HB	5	0.6
(1,1244)	1:A:94:GLU:H	1:A:78:ILE:HD11	2	0.6
(1,1244)	1:A:94:GLU:H	1:A:78:ILE:HD12	2	0.6
(1,1244)	1:A:94:GLU:H	1:A:78:ILE:HD13	2	0.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,63)	1:A:129:ARG:N	1:A:109:ASP:O	7	0.59
(3,10)	1:A:10:LEU:H	1:A:40:TYR:O	3	0.59
(1,78)	1:A:35:SER:H	1:A:33:ALA:H	1	0.59
(1,728)	1:A:45:ASN:H	1:A:2:VAL:HG11	1	0.59
(1,728)	1:A:45:ASN:H	1:A:2:VAL:HG12	1	0.59
(1,728)	1:A:45:ASN:H	1:A:2:VAL:HG13	1	0.59
(1,728)	1:A:45:ASN:H	1:A:2:VAL:HG11	10	0.59
(1,728)	1:A:45:ASN:H	1:A:2:VAL:HG12	10	0.59
(1,728)	1:A:45:ASN:H	1:A:2:VAL:HG13	10	0.59
(1,724)	1:A:17:GLU:H	1:A:20:LEU:HB2	4	0.59
(1,65)	1:A:34:ASN:H	1:A:31:LYS:HA	1	0.59
(1,572)	1:A:84:LEU:H	1:A:89:LEU:HG	10	0.59
(1,43)	1:A:22:ALA:H	1:A:18:GLU:HA	4	0.59
(1,378)	1:A:48:LYS:HB2	1:A:2:VAL:HG11	10	0.59
(1,378)	1:A:48:LYS:HB2	1:A:2:VAL:HG12	10	0.59
(1,378)	1:A:48:LYS:HB2	1:A:2:VAL:HG13	10	0.59
(1,373)	1:A:76:MET:H	1:A:71:LEU:HD11	5	0.59
(1,373)	1:A:76:MET:H	1:A:71:LEU:HD12	5	0.59
(1,373)	1:A:76:MET:H	1:A:71:LEU:HD13	5	0.59
(1,2017)	1:A:63:VAL:HG11	1:A:89:LEU:HA	6	0.59
(1,2017)	1:A:63:VAL:HG12	1:A:89:LEU:HA	6	0.59
(1,2017)	1:A:63:VAL:HG13	1:A:89:LEU:HA	6	0.59
(1,1989)	1:A:39:VAL:HG21	1:A:54:SER:HA	9	0.59
(1,1989)	1:A:39:VAL:HG22	1:A:54:SER:HA	9	0.59
(1,1989)	1:A:39:VAL:HG23	1:A:54:SER:HA	9	0.59
(1,1910)	1:A:27:GLN:HG2	1:A:31:LYS:HG2	8	0.59
(1,1910)	1:A:27:GLN:HG3	1:A:31:LYS:HG2	8	0.59
(1,1898)	1:A:31:LYS:HG2	1:A:27:GLN:HG2	8	0.59
(1,1898)	1:A:31:LYS:HG2	1:A:27:GLN:HG3	8	0.59
(1,1862)	1:A:32:LYS:HA	1:A:31:LYS:HG3	5	0.59
(1,1816)	1:A:39:VAL:H	1:A:54:SER:HA	8	0.59
(1,1792)	1:A:72:GLY:H	1:A:75:ASN:HA	9	0.59
(1,1647)	1:A:14:GLU:H	1:A:124:LYS:HG2	2	0.59
(1,1647)	1:A:14:GLU:H	1:A:124:LYS:HG3	2	0.59
(1,136)	1:A:66:GLU:H	1:A:65:GLU:HG2	1	0.59
(1,136)	1:A:66:GLU:H	1:A:65:GLU:HG3	1	0.59
(3,17)	1:A:124:LYS:N	1:A:14:GLU:O	9	0.58
(1,760)	1:A:78:ILE:HB	1:A:96:PRO:HD2	4	0.58
(1,73)	1:A:30:ILE:H	1:A:32:LYS:H	3	0.58
(1,729)	1:A:125:ARG:H	1:A:13:ASN:HA	9	0.58
(1,710)	1:A:51:PHE:HB2	1:A:61:LEU:HB2	1	0.58
(1,710)	1:A:51:PHE:HB2	1:A:61:LEU:HB3	1	0.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,710)	1:A:51:PHE:HB3	1:A:61:LEU:HB2	1	0.58
(1,710)	1:A:51:PHE:HB3	1:A:61:LEU:HB3	1	0.58
(1,389)	1:A:33:ALA:HB1	1:A:71:LEU:HD21	6	0.58
(1,389)	1:A:33:ALA:HB1	1:A:71:LEU:HD22	6	0.58
(1,389)	1:A:33:ALA:HB1	1:A:71:LEU:HD23	6	0.58
(1,389)	1:A:33:ALA:HB2	1:A:71:LEU:HD21	6	0.58
(1,389)	1:A:33:ALA:HB2	1:A:71:LEU:HD22	6	0.58
(1,389)	1:A:33:ALA:HB2	1:A:71:LEU:HD23	6	0.58
(1,389)	1:A:33:ALA:HB3	1:A:71:LEU:HD21	6	0.58
(1,389)	1:A:33:ALA:HB3	1:A:71:LEU:HD22	6	0.58
(1,389)	1:A:33:ALA:HB3	1:A:71:LEU:HD23	6	0.58
(1,387)	1:A:10:LEU:HG	1:A:38:VAL:HB	4	0.58
(1,34)	1:A:124:LYS:H	1:A:14:GLU:HB2	8	0.58
(1,34)	1:A:124:LYS:H	1:A:14:GLU:HB3	8	0.58
(1,285)	1:A:23:LEU:HB2	1:A:95:LEU:HB2	5	0.58
(1,285)	1:A:23:LEU:HB2	1:A:95:LEU:HB3	5	0.58
(1,285)	1:A:23:LEU:HB3	1:A:95:LEU:HB2	5	0.58
(1,285)	1:A:23:LEU:HB3	1:A:95:LEU:HB3	5	0.58
(1,284)	1:A:23:LEU:HB2	1:A:95:LEU:HB2	5	0.58
(1,284)	1:A:23:LEU:HB2	1:A:95:LEU:HB3	5	0.58
(1,284)	1:A:23:LEU:HB3	1:A:95:LEU:HB2	5	0.58
(1,284)	1:A:23:LEU:HB3	1:A:95:LEU:HB3	5	0.58
(1,217)	1:A:116:MET:H	1:A:115:THR:HG21	1	0.58
(1,217)	1:A:116:MET:H	1:A:115:THR:HG22	1	0.58
(1,217)	1:A:116:MET:H	1:A:115:THR:HG23	1	0.58
(1,1953)	1:A:111:GLY:HA3	1:A:8:TYR:HD1	7	0.58
(1,1953)	1:A:111:GLY:HA3	1:A:8:TYR:HD2	7	0.58
(1,1928)	1:A:84:LEU:HD21	1:A:88:LYS:HG2	9	0.58
(1,1928)	1:A:84:LEU:HD21	1:A:88:LYS:HG3	9	0.58
(1,1928)	1:A:84:LEU:HD22	1:A:88:LYS:HG2	9	0.58
(1,1928)	1:A:84:LEU:HD22	1:A:88:LYS:HG3	9	0.58
(1,1928)	1:A:84:LEU:HD23	1:A:88:LYS:HG2	9	0.58
(1,1928)	1:A:84:LEU:HD23	1:A:88:LYS:HG3	9	0.58
(1,1927)	1:A:88:LYS:HG2	1:A:84:LEU:HD21	9	0.58
(1,1927)	1:A:88:LYS:HG2	1:A:84:LEU:HD22	9	0.58
(1,1927)	1:A:88:LYS:HG2	1:A:84:LEU:HD23	9	0.58
(1,1927)	1:A:88:LYS:HG3	1:A:84:LEU:HD21	9	0.58
(1,1927)	1:A:88:LYS:HG3	1:A:84:LEU:HD22	9	0.58
(1,1927)	1:A:88:LYS:HG3	1:A:84:LEU:HD23	9	0.58
(1,1906)	1:A:27:GLN:HA	1:A:30:ILE:HG13	4	0.58
(1,181)	1:A:95:LEU:H	1:A:96:PRO:HD2	9	0.58
(1,181)	1:A:95:LEU:H	1:A:96:PRO:HD3	9	0.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1801)	1:A:45:ASN:HD22	1:A:2:VAL:HG11	6	0.58
(1,1801)	1:A:45:ASN:HD22	1:A:2:VAL:HG12	6	0.58
(1,1801)	1:A:45:ASN:HD22	1:A:2:VAL:HG13	6	0.58
(1,1799)	1:A:47:ASN:HD21	1:A:2:VAL:HB	2	0.58
(1,1793)	1:A:87:SER:H	1:A:85:GLU:HG2	3	0.58
(1,1793)	1:A:87:SER:H	1:A:85:GLU:HG3	3	0.58
(1,164)	1:A:81:PHE:H	1:A:91:VAL:HA	10	0.58
(1,1527)	1:A:47:ASN:HA	1:A:2:VAL:HB	3	0.58
(1,152)	1:A:92:ASN:H	1:A:82:THR:HA	5	0.58
(1,152)	1:A:92:ASN:H	1:A:82:THR:HA	6	0.58
(1,136)	1:A:66:GLU:H	1:A:65:GLU:HG2	3	0.58
(1,136)	1:A:66:GLU:H	1:A:65:GLU:HG3	3	0.58
(1,1244)	1:A:94:GLU:H	1:A:78:ILE:HD11	10	0.58
(1,1244)	1:A:94:GLU:H	1:A:78:ILE:HD12	10	0.58
(1,1244)	1:A:94:GLU:H	1:A:78:ILE:HD13	10	0.58
(1,124)	1:A:53:SER:H	1:A:59:SER:H	8	0.58
(1,113)	1:A:59:SER:H	1:A:53:SER:H	8	0.58
(1,743)	1:A:121:MET:HB3	1:A:18:GLU:HG3	4	0.57
(1,727)	1:A:85:GLU:H	1:A:89:LEU:HG	10	0.57
(1,691)	1:A:34:ASN:H	1:A:32:LYS:HA	9	0.57
(1,390)	1:A:106:GLU:HA	1:A:88:LYS:HB3	3	0.57
(1,387)	1:A:10:LEU:HG	1:A:38:VAL:HB	9	0.57
(1,219)	1:A:104:THR:H	1:A:116:MET:HA	2	0.57
(1,2022)	1:A:78:ILE:HG13	1:A:93:SER:HB2	10	0.57
(1,2017)	1:A:63:VAL:HG11	1:A:89:LEU:HA	1	0.57
(1,2017)	1:A:63:VAL:HG12	1:A:89:LEU:HA	1	0.57
(1,2017)	1:A:63:VAL:HG13	1:A:89:LEU:HA	1	0.57
(1,2002)	1:A:34:ASN:HB3	1:A:74:VAL:HG11	9	0.57
(1,2002)	1:A:34:ASN:HB3	1:A:74:VAL:HG12	9	0.57
(1,2002)	1:A:34:ASN:HB3	1:A:74:VAL:HG13	9	0.57
(1,2001)	1:A:34:ASN:HB2	1:A:74:VAL:HG11	3	0.57
(1,2001)	1:A:34:ASN:HB2	1:A:74:VAL:HG12	3	0.57
(1,2001)	1:A:34:ASN:HB2	1:A:74:VAL:HG13	3	0.57
(1,1991)	1:A:82:THR:HB	1:A:61:LEU:HB2	10	0.57
(1,1985)	1:A:10:LEU:HB2	1:A:38:VAL:HG21	1	0.57
(1,1985)	1:A:10:LEU:HB2	1:A:38:VAL:HG22	1	0.57
(1,1985)	1:A:10:LEU:HB2	1:A:38:VAL:HG23	1	0.57
(1,1938)	1:A:118:ALA:HB1	1:A:122:VAL:HB	4	0.57
(1,1938)	1:A:118:ALA:HB2	1:A:122:VAL:HB	4	0.57
(1,1938)	1:A:118:ALA:HB3	1:A:122:VAL:HB	4	0.57
(1,1909)	1:A:27:GLN:HG2	1:A:31:LYS:HE2	4	0.57
(1,1909)	1:A:27:GLN:HG2	1:A:31:LYS:HE3	4	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1909)	1:A:27:GLN:HG3	1:A:31:LYS:HE2	4	0.57
(1,1909)	1:A:27:GLN:HG3	1:A:31:LYS:HE3	4	0.57
(1,1897)	1:A:31:LYS:HE2	1:A:27:GLN:HG2	4	0.57
(1,1897)	1:A:31:LYS:HE2	1:A:27:GLN:HG3	4	0.57
(1,1897)	1:A:31:LYS:HE3	1:A:27:GLN:HG2	4	0.57
(1,1897)	1:A:31:LYS:HE3	1:A:27:GLN:HG3	4	0.57
(1,1877)	1:A:3:GLN:HB3	1:A:6:GLY:HA2	10	0.57
(1,181)	1:A:95:LEU:H	1:A:96:PRO:HD2	1	0.57
(1,181)	1:A:95:LEU:H	1:A:96:PRO:HD3	1	0.57
(1,1768)	1:A:12:LYS:H	1:A:10:LEU:HB3	2	0.57
(1,1631)	1:A:113:VAL:HG21	1:A:126:TYR:HE1	9	0.57
(1,1631)	1:A:113:VAL:HG22	1:A:126:TYR:HE1	9	0.57
(1,1631)	1:A:113:VAL:HG23	1:A:126:TYR:HE1	9	0.57
(1,1578)	1:A:73:THR:HG21	1:A:71:LEU:HD11	10	0.57
(1,1578)	1:A:73:THR:HG21	1:A:71:LEU:HD12	10	0.57
(1,1578)	1:A:73:THR:HG21	1:A:71:LEU:HD13	10	0.57
(1,1578)	1:A:73:THR:HG21	1:A:71:LEU:HD21	10	0.57
(1,1578)	1:A:73:THR:HG21	1:A:71:LEU:HD22	10	0.57
(1,1578)	1:A:73:THR:HG21	1:A:71:LEU:HD23	10	0.57
(1,1578)	1:A:73:THR:HG22	1:A:71:LEU:HD11	10	0.57
(1,1578)	1:A:73:THR:HG22	1:A:71:LEU:HD12	10	0.57
(1,1578)	1:A:73:THR:HG22	1:A:71:LEU:HD13	10	0.57
(1,1578)	1:A:73:THR:HG22	1:A:71:LEU:HD21	10	0.57
(1,1578)	1:A:73:THR:HG22	1:A:71:LEU:HD22	10	0.57
(1,1578)	1:A:73:THR:HG22	1:A:71:LEU:HD23	10	0.57
(1,1578)	1:A:73:THR:HG23	1:A:71:LEU:HD11	10	0.57
(1,1578)	1:A:73:THR:HG23	1:A:71:LEU:HD12	10	0.57
(1,1578)	1:A:73:THR:HG23	1:A:71:LEU:HD13	10	0.57
(1,1578)	1:A:73:THR:HG23	1:A:71:LEU:HD21	10	0.57
(1,1578)	1:A:73:THR:HG23	1:A:71:LEU:HD22	10	0.57
(1,1578)	1:A:73:THR:HG23	1:A:71:LEU:HD23	10	0.57
(1,156)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD11	1	0.57
(1,156)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD12	1	0.57
(1,156)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD13	1	0.57
(1,156)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD21	1	0.57
(1,156)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD22	1	0.57
(1,156)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD23	1	0.57
(1,155)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD11	1	0.57
(1,155)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD12	1	0.57
(1,155)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD13	1	0.57
(1,155)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD21	1	0.57
(1,155)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD22	1	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,155)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD23	1	0.57
(1,1527)	1:A:47:ASN:HA	1:A:2:VAL:HB	6	0.57
(1,152)	1:A:92:ASN:H	1:A:82:THR:HA	8	0.57
(1,136)	1:A:66:GLU:H	1:A:65:GLU:HG2	9	0.57
(1,136)	1:A:66:GLU:H	1:A:65:GLU:HG3	9	0.57
(3,63)	1:A:129:ARG:N	1:A:109:ASP:O	8	0.56
(1,749)	1:A:54:SER:HA	1:A:39:VAL:HG11	4	0.56
(1,749)	1:A:54:SER:HA	1:A:39:VAL:HG12	4	0.56
(1,749)	1:A:54:SER:HA	1:A:39:VAL:HG13	4	0.56
(1,732)	1:A:33:ALA:H	1:A:74:VAL:HG11	3	0.56
(1,732)	1:A:33:ALA:H	1:A:74:VAL:HG12	3	0.56
(1,732)	1:A:33:ALA:H	1:A:74:VAL:HG13	3	0.56
(1,732)	1:A:33:ALA:H	1:A:74:VAL:HG11	5	0.56
(1,732)	1:A:33:ALA:H	1:A:74:VAL:HG12	5	0.56
(1,732)	1:A:33:ALA:H	1:A:74:VAL:HG13	5	0.56
(1,728)	1:A:45:ASN:H	1:A:2:VAL:HG11	8	0.56
(1,728)	1:A:45:ASN:H	1:A:2:VAL:HG12	8	0.56
(1,728)	1:A:45:ASN:H	1:A:2:VAL:HG13	8	0.56
(1,728)	1:A:45:ASN:H	1:A:2:VAL:HG11	9	0.56
(1,728)	1:A:45:ASN:H	1:A:2:VAL:HG12	9	0.56
(1,728)	1:A:45:ASN:H	1:A:2:VAL:HG13	9	0.56
(1,493)	1:A:56:GLY:H	1:A:57:MET:HB2	4	0.56
(1,493)	1:A:56:GLY:H	1:A:57:MET:HB3	4	0.56
(1,396)	1:A:11:GLU:HG2	1:A:128:ILE:HG12	3	0.56
(1,396)	1:A:11:GLU:HG3	1:A:128:ILE:HG12	3	0.56
(1,253)	1:A:112:PHE:H	1:A:127:PHE:HB2	3	0.56
(1,253)	1:A:112:PHE:H	1:A:127:PHE:HB3	3	0.56
(1,22)	1:A:11:GLU:H	1:A:10:LEU:HG	5	0.56
(1,2064)	1:A:9:LYS:HB2	1:A:130:THR:HB	9	0.56
(1,2064)	1:A:9:LYS:HB3	1:A:130:THR:HB	9	0.56
(1,2054)	1:A:12:LYS:HD3	1:A:126:TYR:HE1	1	0.56
(1,2017)	1:A:63:VAL:HG11	1:A:89:LEU:HA	7	0.56
(1,2017)	1:A:63:VAL:HG12	1:A:89:LEU:HA	7	0.56
(1,2017)	1:A:63:VAL:HG13	1:A:89:LEU:HA	7	0.56
(1,1989)	1:A:39:VAL:HG21	1:A:54:SER:HA	6	0.56
(1,1989)	1:A:39:VAL:HG22	1:A:54:SER:HA	6	0.56
(1,1989)	1:A:39:VAL:HG23	1:A:54:SER:HA	6	0.56
(1,1976)	1:A:75:ASN:HB2	1:A:25:VAL:HG11	2	0.56
(1,1976)	1:A:75:ASN:HB2	1:A:25:VAL:HG12	2	0.56
(1,1976)	1:A:75:ASN:HB2	1:A:25:VAL:HG13	2	0.56
(1,1965)	1:A:114:LEU:HD21	1:A:13:ASN:HB2	4	0.56
(1,1965)	1:A:114:LEU:HD22	1:A:13:ASN:HB2	4	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1965)	1:A:114:LEU:HD23	1:A:13:ASN:HB2	4	0.56
(1,1965)	1:A:114:LEU:HD21	1:A:13:ASN:HB2	10	0.56
(1,1965)	1:A:114:LEU:HD22	1:A:13:ASN:HB2	10	0.56
(1,1965)	1:A:114:LEU:HD23	1:A:13:ASN:HB2	10	0.56
(1,1956)	1:A:130:THR:HB	1:A:9:LYS:HB2	9	0.56
(1,1956)	1:A:130:THR:HB	1:A:9:LYS:HB3	9	0.56
(1,1950)	1:A:87:SER:HB2	1:A:4:LEU:HD21	7	0.56
(1,1950)	1:A:87:SER:HB2	1:A:4:LEU:HD22	7	0.56
(1,1950)	1:A:87:SER:HB2	1:A:4:LEU:HD23	7	0.56
(1,1910)	1:A:27:GLN:HG2	1:A:31:LYS:HG2	1	0.56
(1,1910)	1:A:27:GLN:HG3	1:A:31:LYS:HG2	1	0.56
(1,1898)	1:A:31:LYS:HG2	1:A:27:GLN:HG2	1	0.56
(1,1898)	1:A:31:LYS:HG2	1:A:27:GLN:HG3	1	0.56
(1,1770)	1:A:13:ASN:HD21	1:A:10:LEU:HG	2	0.56
(3,9)	1:A:10:LEU:N	1:A:40:TYR:O	1	0.55
(3,15)	1:A:14:GLU:N	1:A:124:LYS:O	4	0.55
(1,971)	1:A:28:ASP:H	1:A:31:LYS:HB2	5	0.55
(1,971)	1:A:28:ASP:H	1:A:31:LYS:HB3	5	0.55
(1,793)	1:A:130:THR:H	1:A:7:THR:HB	1	0.55
(1,749)	1:A:54:SER:HA	1:A:39:VAL:HG11	2	0.55
(1,749)	1:A:54:SER:HA	1:A:39:VAL:HG12	2	0.55
(1,749)	1:A:54:SER:HA	1:A:39:VAL:HG13	2	0.55
(1,723)	1:A:16:PHE:H	1:A:14:GLU:HB2	9	0.55
(1,710)	1:A:51:PHE:HB2	1:A:61:LEU:HB2	6	0.55
(1,710)	1:A:51:PHE:HB2	1:A:61:LEU:HB3	6	0.55
(1,710)	1:A:51:PHE:HB3	1:A:61:LEU:HB2	6	0.55
(1,710)	1:A:51:PHE:HB3	1:A:61:LEU:HB3	6	0.55
(1,493)	1:A:56:GLY:H	1:A:57:MET:HB2	10	0.55
(1,493)	1:A:56:GLY:H	1:A:57:MET:HB3	10	0.55
(1,430)	1:A:24:GLY:H	1:A:20:LEU:HA	8	0.55
(1,418)	1:A:19:TYR:H	1:A:17:GLU:HA	8	0.55
(1,377)	1:A:74:VAL:HG11	1:A:71:LEU:HB2	1	0.55
(1,377)	1:A:74:VAL:HG12	1:A:71:LEU:HB2	1	0.55
(1,377)	1:A:74:VAL:HG13	1:A:71:LEU:HB2	1	0.55
(1,286)	1:A:23:LEU:HG	1:A:95:LEU:HG	10	0.55
(1,1976)	1:A:75:ASN:HB2	1:A:25:VAL:HG11	8	0.55
(1,1976)	1:A:75:ASN:HB2	1:A:25:VAL:HG12	8	0.55
(1,1976)	1:A:75:ASN:HB2	1:A:25:VAL:HG13	8	0.55
(1,1957)	1:A:114:LEU:HD21	1:A:10:LEU:HA	2	0.55
(1,1957)	1:A:114:LEU:HD22	1:A:10:LEU:HA	2	0.55
(1,1957)	1:A:114:LEU:HD23	1:A:10:LEU:HA	2	0.55
(1,1921)	1:A:48:LYS:HD2	1:A:45:ASN:HB3	10	0.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1921)	1:A:48:LYS:HD3	1:A:45:ASN:HB3	10	0.55
(1,19)	1:A:128:ILE:H	1:A:10:LEU:HA	8	0.55
(1,181)	1:A:95:LEU:H	1:A:96:PRO:HD2	7	0.55
(1,181)	1:A:95:LEU:H	1:A:96:PRO:HD3	7	0.55
(1,1799)	1:A:47:ASN:HD21	1:A:2:VAL:HB	1	0.55
(1,1770)	1:A:13:ASN:HD21	1:A:10:LEU:HG	1	0.55
(1,1654)	1:A:16:PHE:HB2	1:A:33:ALA:HB1	10	0.55
(1,1654)	1:A:16:PHE:HB2	1:A:33:ALA:HB2	10	0.55
(1,1654)	1:A:16:PHE:HB2	1:A:33:ALA:HB3	10	0.55
(1,1654)	1:A:16:PHE:HB3	1:A:33:ALA:HB1	10	0.55
(1,1654)	1:A:16:PHE:HB3	1:A:33:ALA:HB2	10	0.55
(1,1654)	1:A:16:PHE:HB3	1:A:33:ALA:HB3	10	0.55
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD11	9	0.55
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD12	9	0.55
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD13	9	0.55
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD21	9	0.55
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD22	9	0.55
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD23	9	0.55
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD11	9	0.55
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD12	9	0.55
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD13	9	0.55
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD21	9	0.55
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD22	9	0.55
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD23	9	0.55
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD11	9	0.55
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD12	9	0.55
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD13	9	0.55
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD21	9	0.55
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD22	9	0.55
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD23	9	0.55
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD11	9	0.55
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD12	9	0.55
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD13	9	0.55
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD21	9	0.55
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD22	9	0.55
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD23	9	0.55
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD11	9	0.55
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD12	9	0.55
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD13	9	0.55
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD21	9	0.55
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD22	9	0.55
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD23	9	0.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD11	9	0.55
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD12	9	0.55
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD13	9	0.55
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD21	9	0.55
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD22	9	0.55
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD23	9	0.55
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD11	9	0.55
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD12	9	0.55
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD13	9	0.55
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD21	9	0.55
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD22	9	0.55
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD23	9	0.55
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD11	9	0.55
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD12	9	0.55
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD13	9	0.55
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD21	9	0.55
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD22	9	0.55
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD23	9	0.55
(1,1330)	1:A:82:THR:H	1:A:91:VAL:HB	5	0.55
(3,63)	1:A:129:ARG:N	1:A:109:ASP:O	2	0.54
(3,51)	1:A:106:GLU:N	1:A:113:VAL:O	2	0.54
(1,761)	1:A:78:ILE:HB	1:A:96:PRO:HD3	3	0.54
(1,724)	1:A:17:GLU:H	1:A:20:LEU:HB2	1	0.54
(1,723)	1:A:16:PHE:H	1:A:14:GLU:HB2	10	0.54
(1,713)	1:A:51:PHE:H	1:A:61:LEU:HB2	9	0.54
(1,713)	1:A:51:PHE:H	1:A:61:LEU:HB3	9	0.54
(1,710)	1:A:51:PHE:HB2	1:A:61:LEU:HB2	5	0.54
(1,710)	1:A:51:PHE:HB2	1:A:61:LEU:HB3	5	0.54
(1,710)	1:A:51:PHE:HB3	1:A:61:LEU:HB2	5	0.54
(1,710)	1:A:51:PHE:HB3	1:A:61:LEU:HB3	5	0.54
(1,691)	1:A:34:ASN:H	1:A:32:LYS:HA	7	0.54
(1,65)	1:A:34:ASN:H	1:A:31:LYS:HA	8	0.54
(1,635)	1:A:129:ARG:H	1:A:128:ILE:HD11	9	0.54
(1,635)	1:A:129:ARG:H	1:A:128:ILE:HD12	9	0.54
(1,635)	1:A:129:ARG:H	1:A:128:ILE:HD13	9	0.54
(1,634)	1:A:112:PHE:H	1:A:128:ILE:HD11	5	0.54
(1,634)	1:A:112:PHE:H	1:A:128:ILE:HD12	5	0.54
(1,634)	1:A:112:PHE:H	1:A:128:ILE:HD13	5	0.54
(1,599)	1:A:127:PHE:H	1:A:112:PHE:HA	6	0.54
(1,491)	1:A:41:GLU:H	1:A:51:PHE:HA	4	0.54
(1,418)	1:A:19:TYR:H	1:A:17:GLU:HA	10	0.54
(1,396)	1:A:11:GLU:HG2	1:A:128:ILE:HG12	7	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,396)	1:A:11:GLU:HG3	1:A:128:ILE:HG12	7	0.54
(1,39)	1:A:17:GLU:H	1:A:15:ASN:H	10	0.54
(1,296)	1:A:6:GLY:H	1:A:44:VAL:HG11	5	0.54
(1,296)	1:A:6:GLY:H	1:A:44:VAL:HG12	5	0.54
(1,296)	1:A:6:GLY:H	1:A:44:VAL:HG13	5	0.54
(1,296)	1:A:6:GLY:H	1:A:44:VAL:HG21	5	0.54
(1,296)	1:A:6:GLY:H	1:A:44:VAL:HG22	5	0.54
(1,296)	1:A:6:GLY:H	1:A:44:VAL:HG23	5	0.54
(1,29)	1:A:14:GLU:H	1:A:13:ASN:HB2	6	0.54
(1,29)	1:A:14:GLU:H	1:A:13:ASN:HB3	6	0.54
(1,286)	1:A:23:LEU:HG	1:A:95:LEU:HG	6	0.54
(1,245)	1:A:125:ARG:H	1:A:125:ARG:HD2	8	0.54
(1,245)	1:A:125:ARG:H	1:A:125:ARG:HD3	8	0.54
(1,222)	1:A:120:ASP:H	1:A:118:ALA:HA	9	0.54
(1,219)	1:A:104:THR:H	1:A:116:MET:HA	5	0.54
(1,2056)	1:A:14:GLU:HB3	1:A:126:TYR:HE1	7	0.54
(1,202)	1:A:111:GLY:H	1:A:110:LYS:HB2	3	0.54
(1,202)	1:A:111:GLY:H	1:A:110:LYS:HB3	3	0.54
(1,1970)	1:A:124:LYS:HG3	1:A:14:GLU:HB3	4	0.54
(1,1935)	1:A:94:GLU:HG2	1:A:96:PRO:HB2	2	0.54
(1,1935)	1:A:94:GLU:HG3	1:A:96:PRO:HB2	2	0.54
(1,1877)	1:A:3:GLN:HB3	1:A:6:GLY:HA2	8	0.54
(1,1817)	1:A:81:PHE:H	1:A:61:LEU:HD21	2	0.54
(1,1817)	1:A:81:PHE:H	1:A:61:LEU:HD22	2	0.54
(1,1817)	1:A:81:PHE:H	1:A:61:LEU:HD23	2	0.54
(1,181)	1:A:95:LEU:H	1:A:96:PRO:HD2	10	0.54
(1,181)	1:A:95:LEU:H	1:A:96:PRO:HD3	10	0.54
(1,1807)	1:A:122:VAL:H	1:A:15:ASN:HD21	4	0.54
(1,169)	1:A:81:PHE:H	1:A:91:VAL:HG11	7	0.54
(1,169)	1:A:81:PHE:H	1:A:91:VAL:HG12	7	0.54
(1,169)	1:A:81:PHE:H	1:A:91:VAL:HG13	7	0.54
(1,169)	1:A:81:PHE:H	1:A:91:VAL:HG21	7	0.54
(1,169)	1:A:81:PHE:H	1:A:91:VAL:HG22	7	0.54
(1,169)	1:A:81:PHE:H	1:A:91:VAL:HG23	7	0.54
(1,1527)	1:A:47:ASN:HA	1:A:2:VAL:HB	8	0.54
(1,152)	1:A:92:ASN:H	1:A:82:THR:HA	7	0.54
(1,152)	1:A:92:ASN:H	1:A:82:THR:HA	10	0.54
(1,1249)	1:A:94:GLU:H	1:A:78:ILE:HG21	2	0.54
(1,1249)	1:A:94:GLU:H	1:A:78:ILE:HG22	2	0.54
(1,1249)	1:A:94:GLU:H	1:A:78:ILE:HG23	2	0.54
(3,9)	1:A:10:LEU:N	1:A:40:TYR:O	2	0.53
(3,19)	1:A:19:TYR:N	1:A:15:ASN:O	1	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,10)	1:A:10:LEU:H	1:A:40:TYR:O	4	0.53
(3,10)	1:A:10:LEU:H	1:A:40:TYR:O	10	0.53
(1,451)	1:A:35:SER:H	1:A:31:LYS:HA	8	0.53
(1,43)	1:A:22:ALA:H	1:A:18:GLU:HA	3	0.53
(1,43)	1:A:22:ALA:H	1:A:18:GLU:HA	9	0.53
(1,39)	1:A:17:GLU:H	1:A:15:ASN:H	4	0.53
(1,373)	1:A:76:MET:H	1:A:71:LEU:HD11	4	0.53
(1,373)	1:A:76:MET:H	1:A:71:LEU:HD12	4	0.53
(1,373)	1:A:76:MET:H	1:A:71:LEU:HD13	4	0.53
(1,285)	1:A:23:LEU:HB2	1:A:95:LEU:HB2	10	0.53
(1,285)	1:A:23:LEU:HB2	1:A:95:LEU:HB3	10	0.53
(1,285)	1:A:23:LEU:HB3	1:A:95:LEU:HB2	10	0.53
(1,285)	1:A:23:LEU:HB3	1:A:95:LEU:HB3	10	0.53
(1,284)	1:A:23:LEU:HB2	1:A:95:LEU:HB2	10	0.53
(1,284)	1:A:23:LEU:HB2	1:A:95:LEU:HB3	10	0.53
(1,284)	1:A:23:LEU:HB3	1:A:95:LEU:HB2	10	0.53
(1,284)	1:A:23:LEU:HB3	1:A:95:LEU:HB3	10	0.53
(1,281)	1:A:84:LEU:HA	1:A:89:LEU:HB2	9	0.53
(1,281)	1:A:84:LEU:HA	1:A:89:LEU:HB3	9	0.53
(1,245)	1:A:125:ARG:H	1:A:125:ARG:HD2	1	0.53
(1,245)	1:A:125:ARG:H	1:A:125:ARG:HD3	1	0.53
(1,220)	1:A:123:ALA:H	1:A:117:CYS:HA	1	0.53
(1,220)	1:A:123:ALA:H	1:A:117:CYS:HA	9	0.53
(1,217)	1:A:116:MET:H	1:A:115:THR:HG21	6	0.53
(1,217)	1:A:116:MET:H	1:A:115:THR:HG22	6	0.53
(1,217)	1:A:116:MET:H	1:A:115:THR:HG23	6	0.53
(1,215)	1:A:124:LYS:H	1:A:115:THR:HA	10	0.53
(1,2017)	1:A:63:VAL:HG11	1:A:89:LEU:HA	10	0.53
(1,2017)	1:A:63:VAL:HG12	1:A:89:LEU:HA	10	0.53
(1,2017)	1:A:63:VAL:HG13	1:A:89:LEU:HA	10	0.53
(1,1946)	1:A:48:LYS:HA	1:A:2:VAL:HG11	2	0.53
(1,1946)	1:A:48:LYS:HA	1:A:2:VAL:HG12	2	0.53
(1,1946)	1:A:48:LYS:HA	1:A:2:VAL:HG13	2	0.53
(1,19)	1:A:128:ILE:H	1:A:10:LEU:HA	2	0.53
(1,1828)	1:A:35:SER:H	1:A:74:VAL:HG11	2	0.53
(1,1828)	1:A:35:SER:H	1:A:74:VAL:HG12	2	0.53
(1,1828)	1:A:35:SER:H	1:A:74:VAL:HG13	2	0.53
(1,1808)	1:A:33:ALA:H	1:A:20:LEU:HD11	6	0.53
(1,1808)	1:A:33:ALA:H	1:A:20:LEU:HD12	6	0.53
(1,1808)	1:A:33:ALA:H	1:A:20:LEU:HD13	6	0.53
(1,1789)	1:A:48:LYS:H	1:A:45:ASN:HD21	8	0.53
(1,1651)	1:A:65:GLU:H	1:A:84:LEU:HD11	7	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1651)	1:A:65:GLU:H	1:A:84:LEU:HD12	7	0.53
(1,1651)	1:A:65:GLU:H	1:A:84:LEU:HD13	7	0.53
(1,1651)	1:A:65:GLU:H	1:A:84:LEU:HD21	7	0.53
(1,1651)	1:A:65:GLU:H	1:A:84:LEU:HD22	7	0.53
(1,1651)	1:A:65:GLU:H	1:A:84:LEU:HD23	7	0.53
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD11	10	0.53
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD12	10	0.53
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD13	10	0.53
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD21	10	0.53
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD22	10	0.53
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD23	10	0.53
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD11	10	0.53
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD12	10	0.53
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD13	10	0.53
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD21	10	0.53
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD22	10	0.53
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD23	10	0.53
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD11	10	0.53
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD12	10	0.53
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD13	10	0.53
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD21	10	0.53
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD22	10	0.53
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD23	10	0.53
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD11	10	0.53
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD12	10	0.53
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD13	10	0.53
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD21	10	0.53
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD22	10	0.53
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD23	10	0.53
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD11	10	0.53
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD12	10	0.53
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD13	10	0.53
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD21	10	0.53
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD22	10	0.53
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD23	10	0.53
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD11	10	0.53
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD12	10	0.53
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD13	10	0.53
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD21	10	0.53
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD22	10	0.53
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD23	10	0.53
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD11	10	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD12	10	0.53
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD13	10	0.53
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD21	10	0.53
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD22	10	0.53
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD23	10	0.53
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD11	10	0.53
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD12	10	0.53
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD13	10	0.53
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD21	10	0.53
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD22	10	0.53
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD23	10	0.53
(1,1531)	1:A:130:THR:HB	1:A:7:THR:HB	9	0.53
(1,1330)	1:A:82:THR:H	1:A:91:VAL:HB	9	0.53
(1,1286)	1:A:88:LYS:H	1:A:84:LEU:HG	9	0.53
(1,1249)	1:A:94:GLU:H	1:A:78:ILE:HG21	10	0.53
(1,1249)	1:A:94:GLU:H	1:A:78:ILE:HG22	10	0.53
(1,1249)	1:A:94:GLU:H	1:A:78:ILE:HG23	10	0.53
(3,51)	1:A:106:GLU:N	1:A:113:VAL:O	3	0.52
(3,17)	1:A:124:LYS:N	1:A:14:GLU:O	3	0.52
(1,759)	1:A:78:ILE:HB	1:A:93:SER:HB3	10	0.52
(1,754)	1:A:79:LYS:HG3	1:A:68:GLU:HA	1	0.52
(1,728)	1:A:45:ASN:H	1:A:2:VAL:HG11	5	0.52
(1,728)	1:A:45:ASN:H	1:A:2:VAL:HG12	5	0.52
(1,728)	1:A:45:ASN:H	1:A:2:VAL:HG13	5	0.52
(1,68)	1:A:33:ALA:H	1:A:31:LYS:H	6	0.52
(1,65)	1:A:34:ASN:H	1:A:31:LYS:HA	3	0.52
(1,648)	1:A:50:THR:HB	1:A:43:ILE:HB	7	0.52
(1,594)	1:A:93:SER:H	1:A:101:GLY:H	10	0.52
(1,47)	1:A:19:TYR:H	1:A:19:TYR:HE1	7	0.52
(1,418)	1:A:19:TYR:H	1:A:17:GLU:HA	1	0.52
(1,376)	1:A:106:GLU:H	1:A:113:VAL:HB	10	0.52
(1,371)	1:A:32:LYS:H	1:A:33:ALA:HB1	8	0.52
(1,371)	1:A:32:LYS:H	1:A:33:ALA:HB2	8	0.52
(1,371)	1:A:32:LYS:H	1:A:33:ALA:HB3	8	0.52
(1,285)	1:A:23:LEU:HB2	1:A:95:LEU:HB2	3	0.52
(1,285)	1:A:23:LEU:HB2	1:A:95:LEU:HB3	3	0.52
(1,285)	1:A:23:LEU:HB3	1:A:95:LEU:HB2	3	0.52
(1,285)	1:A:23:LEU:HB3	1:A:95:LEU:HB3	3	0.52
(1,284)	1:A:23:LEU:HB2	1:A:95:LEU:HB2	3	0.52
(1,284)	1:A:23:LEU:HB2	1:A:95:LEU:HB3	3	0.52
(1,284)	1:A:23:LEU:HB3	1:A:95:LEU:HB2	3	0.52
(1,284)	1:A:23:LEU:HB3	1:A:95:LEU:HB3	3	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2064)	1:A:9:LYS:HB2	1:A:130:THR:HB	3	0.52
(1,2064)	1:A:9:LYS:HB3	1:A:130:THR:HB	3	0.52
(1,202)	1:A:111:GLY:H	1:A:110:LYS:HB2	10	0.52
(1,202)	1:A:111:GLY:H	1:A:110:LYS:HB3	10	0.52
(1,2005)	1:A:93:SER:HB3	1:A:78:ILE:HG12	8	0.52
(1,1991)	1:A:82:THR:HB	1:A:61:LEU:HB2	5	0.52
(1,1956)	1:A:130:THR:HB	1:A:9:LYS:HB2	3	0.52
(1,1956)	1:A:130:THR:HB	1:A:9:LYS:HB3	3	0.52
(1,1845)	1:A:17:GLU:H	1:A:123:ALA:HB1	2	0.52
(1,1845)	1:A:17:GLU:H	1:A:123:ALA:HB2	2	0.52
(1,1845)	1:A:17:GLU:H	1:A:123:ALA:HB3	2	0.52
(1,1817)	1:A:81:PHE:H	1:A:61:LEU:HD21	8	0.52
(1,1817)	1:A:81:PHE:H	1:A:61:LEU:HD22	8	0.52
(1,1817)	1:A:81:PHE:H	1:A:61:LEU:HD23	8	0.52
(1,1737)	1:A:43:ILE:HG12	1:A:41:GLU:HB2	1	0.52
(1,1737)	1:A:43:ILE:HG12	1:A:41:GLU:HB3	1	0.52
(1,1737)	1:A:43:ILE:HG13	1:A:41:GLU:HB2	1	0.52
(1,1737)	1:A:43:ILE:HG13	1:A:41:GLU:HB3	1	0.52
(1,141)	1:A:75:ASN:H	1:A:74:VAL:HG11	1	0.52
(1,141)	1:A:75:ASN:H	1:A:74:VAL:HG12	1	0.52
(1,141)	1:A:75:ASN:H	1:A:74:VAL:HG13	1	0.52
(1,141)	1:A:75:ASN:H	1:A:74:VAL:HG21	1	0.52
(1,141)	1:A:75:ASN:H	1:A:74:VAL:HG22	1	0.52
(1,141)	1:A:75:ASN:H	1:A:74:VAL:HG23	1	0.52
(1,125)	1:A:53:SER:H	1:A:60:THR:HA	10	0.52
(1,1207)	1:A:76:MET:H	1:A:72:GLY:HA2	2	0.52
(1,1207)	1:A:76:MET:H	1:A:72:GLY:HA3	2	0.52
(1,1049)	1:A:48:LYS:H	1:A:44:VAL:HG11	1	0.52
(1,1049)	1:A:48:LYS:H	1:A:44:VAL:HG12	1	0.52
(1,1049)	1:A:48:LYS:H	1:A:44:VAL:HG13	1	0.52
(1,1049)	1:A:48:LYS:H	1:A:44:VAL:HG21	1	0.52
(1,1049)	1:A:48:LYS:H	1:A:44:VAL:HG22	1	0.52
(1,1049)	1:A:48:LYS:H	1:A:44:VAL:HG23	1	0.52
(3,17)	1:A:124:LYS:N	1:A:14:GLU:O	1	0.51
(1,99)	1:A:45:ASN:H	1:A:48:LYS:HB2	4	0.51
(1,99)	1:A:45:ASN:H	1:A:48:LYS:HB3	4	0.51
(1,907)	1:A:25:VAL:H	1:A:23:LEU:HG	6	0.51
(1,724)	1:A:17:GLU:H	1:A:20:LEU:HB2	10	0.51
(1,654)	1:A:89:LEU:HA	1:A:84:LEU:HG	4	0.51
(1,42)	1:A:19:TYR:H	1:A:18:GLU:HA	7	0.51
(1,396)	1:A:11:GLU:HG2	1:A:128:ILE:HG12	5	0.51
(1,396)	1:A:11:GLU:HG3	1:A:128:ILE:HG12	5	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,390)	1:A:106:GLU:HA	1:A:88:LYS:HB3	2	0.51
(1,390)	1:A:106:GLU:HA	1:A:88:LYS:HB3	7	0.51
(1,39)	1:A:17:GLU:H	1:A:15:ASN:H	1	0.51
(1,286)	1:A:23:LEU:HG	1:A:95:LEU:HG	1	0.51
(1,286)	1:A:23:LEU:HG	1:A:95:LEU:HG	9	0.51
(1,245)	1:A:125:ARG:H	1:A:125:ARG:HD2	6	0.51
(1,245)	1:A:125:ARG:H	1:A:125:ARG:HD3	6	0.51
(1,226)	1:A:118:ALA:H	1:A:122:VAL:HA	3	0.51
(1,205)	1:A:129:ARG:H	1:A:111:GLY:HA2	10	0.51
(1,205)	1:A:129:ARG:H	1:A:111:GLY:HA3	10	0.51
(1,2032)	1:A:105:TYR:HB2	1:A:112:PHE:HA	6	0.51
(1,2032)	1:A:105:TYR:HB3	1:A:112:PHE:HA	6	0.51
(1,196)	1:A:106:GLU:H	1:A:105:TYR:HB2	2	0.51
(1,196)	1:A:106:GLU:H	1:A:105:TYR:HB3	2	0.51
(1,1938)	1:A:118:ALA:HB1	1:A:122:VAL:HB	9	0.51
(1,1938)	1:A:118:ALA:HB2	1:A:122:VAL:HB	9	0.51
(1,1938)	1:A:118:ALA:HB3	1:A:122:VAL:HB	9	0.51
(1,1791)	1:A:45:ASN:HD21	1:A:48:LYS:HG2	5	0.51
(1,125)	1:A:53:SER:H	1:A:60:THR:HA	9	0.51
(3,19)	1:A:19:TYR:N	1:A:15:ASN:O	10	0.5
(1,750)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:44:VAL:HG11	3	0.5
(1,750)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:44:VAL:HG12	3	0.5
(1,750)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:44:VAL:HG13	3	0.5
(1,750)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:44:VAL:HG11	3	0.5
(1,750)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:44:VAL:HG12	3	0.5
(1,750)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:44:VAL:HG13	3	0.5
(1,750)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:44:VAL:HG11	3	0.5
(1,750)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:44:VAL:HG12	3	0.5
(1,750)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:44:VAL:HG13	3	0.5
(1,710)	1:A:51:PHE:HB2	1:A:61:LEU:HB2	4	0.5
(1,710)	1:A:51:PHE:HB2	1:A:61:LEU:HB3	4	0.5
(1,710)	1:A:51:PHE:HB3	1:A:61:LEU:HB2	4	0.5
(1,710)	1:A:51:PHE:HB3	1:A:61:LEU:HB3	4	0.5
(1,64)	1:A:33:ALA:H	1:A:31:LYS:HA	10	0.5
(1,634)	1:A:112:PHE:H	1:A:128:ILE:HD11	6	0.5
(1,634)	1:A:112:PHE:H	1:A:128:ILE:HD12	6	0.5
(1,634)	1:A:112:PHE:H	1:A:128:ILE:HD13	6	0.5
(1,43)	1:A:22:ALA:H	1:A:18:GLU:HA	7	0.5
(1,42)	1:A:19:TYR:H	1:A:18:GLU:HA	1	0.5
(1,396)	1:A:11:GLU:HG2	1:A:128:ILE:HG12	9	0.5
(1,396)	1:A:11:GLU:HG3	1:A:128:ILE:HG12	9	0.5
(1,395)	1:A:115:THR:HB	1:A:124:LYS:HD2	7	0.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,395)	1:A:115:THR:HB	1:A:124:LYS:HD3	7	0.5
(1,286)	1:A:23:LEU:HG	1:A:95:LEU:HG	3	0.5
(1,281)	1:A:84:LEU:HA	1:A:89:LEU:HB2	1	0.5
(1,281)	1:A:84:LEU:HA	1:A:89:LEU:HB3	1	0.5
(1,281)	1:A:84:LEU:HA	1:A:89:LEU:HB2	10	0.5
(1,281)	1:A:84:LEU:HA	1:A:89:LEU:HB3	10	0.5
(1,275)	1:A:77:ASN:HB2	1:A:70:VAL:HA	3	0.5
(1,275)	1:A:77:ASN:HB3	1:A:70:VAL:HA	3	0.5
(1,253)	1:A:112:PHE:H	1:A:127:PHE:HB2	6	0.5
(1,253)	1:A:112:PHE:H	1:A:127:PHE:HB3	6	0.5
(1,2063)	1:A:111:GLY:HA3	1:A:129:ARG:HG2	1	0.5
(1,2063)	1:A:111:GLY:HA3	1:A:129:ARG:HG3	1	0.5
(1,205)	1:A:129:ARG:H	1:A:111:GLY:HA2	4	0.5
(1,205)	1:A:129:ARG:H	1:A:111:GLY:HA3	4	0.5
(1,2022)	1:A:78:ILE:HG13	1:A:93:SER:HB2	7	0.5
(1,1908)	1:A:27:GLN:HG2	1:A:31:LYS:HD2	4	0.5
(1,1908)	1:A:27:GLN:HG2	1:A:31:LYS:HD3	4	0.5
(1,1908)	1:A:27:GLN:HG3	1:A:31:LYS:HD2	4	0.5
(1,1908)	1:A:27:GLN:HG3	1:A:31:LYS:HD3	4	0.5
(1,1896)	1:A:31:LYS:HD2	1:A:27:GLN:HG2	4	0.5
(1,1896)	1:A:31:LYS:HD2	1:A:27:GLN:HG3	4	0.5
(1,1896)	1:A:31:LYS:HD3	1:A:27:GLN:HG2	4	0.5
(1,1896)	1:A:31:LYS:HD3	1:A:27:GLN:HG3	4	0.5
(1,1824)	1:A:77:ASN:H	1:A:71:LEU:HD11	8	0.5
(1,1824)	1:A:77:ASN:H	1:A:71:LEU:HD12	8	0.5
(1,1824)	1:A:77:ASN:H	1:A:71:LEU:HD13	8	0.5
(1,1801)	1:A:45:ASN:HD22	1:A:2:VAL:HG11	8	0.5
(1,1801)	1:A:45:ASN:HD22	1:A:2:VAL:HG12	8	0.5
(1,1801)	1:A:45:ASN:HD22	1:A:2:VAL:HG13	8	0.5
(1,1800)	1:A:45:ASN:HD21	1:A:2:VAL:HG11	4	0.5
(1,1800)	1:A:45:ASN:HD21	1:A:2:VAL:HG12	4	0.5
(1,1800)	1:A:45:ASN:HD21	1:A:2:VAL:HG13	4	0.5
(1,1792)	1:A:72:GLY:H	1:A:75:ASN:HA	8	0.5
(1,1769)	1:A:13:ASN:H	1:A:10:LEU:HD11	6	0.5
(1,1769)	1:A:13:ASN:H	1:A:10:LEU:HD12	6	0.5
(1,1769)	1:A:13:ASN:H	1:A:10:LEU:HD13	6	0.5
(1,170)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:HG11	7	0.5
(1,170)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:HG12	7	0.5
(1,170)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:HG13	7	0.5
(1,170)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:HG21	7	0.5
(1,170)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:HG22	7	0.5
(1,170)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:HG23	7	0.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1651)	1:A:65:GLU:H	1:A:84:LEU:HD11	1	0.5
(1,1651)	1:A:65:GLU:H	1:A:84:LEU:HD12	1	0.5
(1,1651)	1:A:65:GLU:H	1:A:84:LEU:HD13	1	0.5
(1,1651)	1:A:65:GLU:H	1:A:84:LEU:HD21	1	0.5
(1,1651)	1:A:65:GLU:H	1:A:84:LEU:HD22	1	0.5
(1,1651)	1:A:65:GLU:H	1:A:84:LEU:HD23	1	0.5
(1,152)	1:A:92:ASN:H	1:A:82:THR:HA	1	0.5
(1,1286)	1:A:88:LYS:H	1:A:84:LEU:HG	8	0.5
(1,1)	1:A:2:VAL:H	1:A:1:MET:HB2	4	0.5
(1,1)	1:A:2:VAL:H	1:A:1:MET:HB3	4	0.5
(3,9)	1:A:10:LEU:N	1:A:40:TYR:O	10	0.49
(3,17)	1:A:124:LYS:N	1:A:14:GLU:O	5	0.49
(1,749)	1:A:54:SER:HA	1:A:39:VAL:HG11	1	0.49
(1,749)	1:A:54:SER:HA	1:A:39:VAL:HG12	1	0.49
(1,749)	1:A:54:SER:HA	1:A:39:VAL:HG13	1	0.49
(1,749)	1:A:54:SER:HA	1:A:39:VAL:HG11	10	0.49
(1,749)	1:A:54:SER:HA	1:A:39:VAL:HG12	10	0.49
(1,749)	1:A:54:SER:HA	1:A:39:VAL:HG13	10	0.49
(1,572)	1:A:84:LEU:H	1:A:89:LEU:HG	9	0.49
(1,43)	1:A:22:ALA:H	1:A:18:GLU:HA	6	0.49
(1,42)	1:A:19:TYR:H	1:A:18:GLU:HA	5	0.49
(1,418)	1:A:19:TYR:H	1:A:17:GLU:HA	9	0.49
(1,396)	1:A:11:GLU:HG2	1:A:128:ILE:HG12	2	0.49
(1,396)	1:A:11:GLU:HG3	1:A:128:ILE:HG12	2	0.49
(1,285)	1:A:23:LEU:HB2	1:A:95:LEU:HB2	1	0.49
(1,285)	1:A:23:LEU:HB2	1:A:95:LEU:HB3	1	0.49
(1,285)	1:A:23:LEU:HB3	1:A:95:LEU:HB2	1	0.49
(1,285)	1:A:23:LEU:HB3	1:A:95:LEU:HB3	1	0.49
(1,284)	1:A:23:LEU:HB2	1:A:95:LEU:HB2	1	0.49
(1,284)	1:A:23:LEU:HB2	1:A:95:LEU:HB3	1	0.49
(1,284)	1:A:23:LEU:HB3	1:A:95:LEU:HB2	1	0.49
(1,284)	1:A:23:LEU:HB3	1:A:95:LEU:HB3	1	0.49
(1,1989)	1:A:39:VAL:HG21	1:A:54:SER:HA	3	0.49
(1,1989)	1:A:39:VAL:HG22	1:A:54:SER:HA	3	0.49
(1,1989)	1:A:39:VAL:HG23	1:A:54:SER:HA	3	0.49
(1,1965)	1:A:114:LEU:HD21	1:A:13:ASN:HB2	2	0.49
(1,1965)	1:A:114:LEU:HD22	1:A:13:ASN:HB2	2	0.49
(1,1965)	1:A:114:LEU:HD23	1:A:13:ASN:HB2	2	0.49
(1,1948)	1:A:44:VAL:HB	1:A:4:LEU:HB3	9	0.49
(1,1914)	1:A:30:ILE:HG13	1:A:34:ASN:HB2	4	0.49
(1,1907)	1:A:34:ASN:HB2	1:A:30:ILE:HG13	4	0.49
(1,1877)	1:A:3:GLN:HB3	1:A:6:GLY:HA2	5	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1783)	1:A:22:ALA:H	1:A:25:VAL:HG21	3	0.49
(1,1783)	1:A:22:ALA:H	1:A:25:VAL:HG22	3	0.49
(1,1783)	1:A:22:ALA:H	1:A:25:VAL:HG23	3	0.49
(1,1760)	1:A:77:ASN:HD21	1:A:76:MET:HB2	3	0.49
(1,169)	1:A:81:PHE:H	1:A:91:VAL:HG11	8	0.49
(1,169)	1:A:81:PHE:H	1:A:91:VAL:HG12	8	0.49
(1,169)	1:A:81:PHE:H	1:A:91:VAL:HG13	8	0.49
(1,169)	1:A:81:PHE:H	1:A:91:VAL:HG21	8	0.49
(1,169)	1:A:81:PHE:H	1:A:91:VAL:HG22	8	0.49
(1,169)	1:A:81:PHE:H	1:A:91:VAL:HG23	8	0.49
(1,152)	1:A:92:ASN:H	1:A:82:THR:HA	4	0.49
(1,132)	1:A:63:VAL:H	1:A:62:ILE:HG21	2	0.49
(1,132)	1:A:63:VAL:H	1:A:62:ILE:HG22	2	0.49
(1,132)	1:A:63:VAL:H	1:A:62:ILE:HG23	2	0.49
(1,1210)	1:A:72:GLY:H	1:A:74:VAL:HB	1	0.49
(3,64)	1:A:129:ARG:H	1:A:109:ASP:O	6	0.48
(3,17)	1:A:124:LYS:N	1:A:14:GLU:O	6	0.48
(2,3)	1:A:59:SER:H	1:A:54:SER:HA	2	0.48
(1,78)	1:A:35:SER:H	1:A:33:ALA:H	9	0.48
(1,750)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:44:VAL:HG11	7	0.48
(1,750)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:44:VAL:HG12	7	0.48
(1,750)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:44:VAL:HG13	7	0.48
(1,750)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:44:VAL:HG11	7	0.48
(1,750)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:44:VAL:HG12	7	0.48
(1,750)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:44:VAL:HG13	7	0.48
(1,750)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:44:VAL:HG11	7	0.48
(1,750)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:44:VAL:HG12	7	0.48
(1,750)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:44:VAL:HG13	7	0.48
(1,708)	1:A:43:ILE:HB	1:A:7:THR:HG21	4	0.48
(1,708)	1:A:43:ILE:HB	1:A:7:THR:HG22	4	0.48
(1,708)	1:A:43:ILE:HB	1:A:7:THR:HG23	4	0.48
(1,648)	1:A:50:THR:HB	1:A:43:ILE:HB	5	0.48
(1,42)	1:A:19:TYR:H	1:A:18:GLU:HA	6	0.48
(1,42)	1:A:19:TYR:H	1:A:18:GLU:HA	8	0.48
(1,387)	1:A:10:LEU:HG	1:A:38:VAL:HB	5	0.48
(1,286)	1:A:23:LEU:HG	1:A:95:LEU:HG	5	0.48
(1,285)	1:A:23:LEU:HB2	1:A:95:LEU:HB2	2	0.48
(1,285)	1:A:23:LEU:HB2	1:A:95:LEU:HB3	2	0.48
(1,285)	1:A:23:LEU:HB3	1:A:95:LEU:HB2	2	0.48
(1,285)	1:A:23:LEU:HB3	1:A:95:LEU:HB3	2	0.48
(1,284)	1:A:23:LEU:HB2	1:A:95:LEU:HB2	2	0.48
(1,284)	1:A:23:LEU:HB2	1:A:95:LEU:HB3	2	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,284)	1:A:23:LEU:HB3	1:A:95:LEU:HB2	2	0.48
(1,284)	1:A:23:LEU:HB3	1:A:95:LEU:HB3	2	0.48
(1,257)	1:A:112:PHE:H	1:A:128:ILE:HA	10	0.48
(1,210)	1:A:127:PHE:H	1:A:113:VAL:HA	10	0.48
(1,202)	1:A:111:GLY:H	1:A:110:LYS:HB2	1	0.48
(1,202)	1:A:111:GLY:H	1:A:110:LYS:HB3	1	0.48
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD11	1:A:83:LYS:HE2	6	0.48
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD11	1:A:83:LYS:HE3	6	0.48
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD12	1:A:83:LYS:HE2	6	0.48
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD12	1:A:83:LYS:HE3	6	0.48
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD13	1:A:83:LYS:HE2	6	0.48
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD13	1:A:83:LYS:HE3	6	0.48
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD21	1:A:83:LYS:HE2	6	0.48
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD21	1:A:83:LYS:HE3	6	0.48
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD22	1:A:83:LYS:HE2	6	0.48
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD22	1:A:83:LYS:HE3	6	0.48
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD23	1:A:83:LYS:HE2	6	0.48
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD23	1:A:83:LYS:HE3	6	0.48
(1,1991)	1:A:82:THR:HB	1:A:61:LEU:HB2	1	0.48
(1,1935)	1:A:94:GLU:HG2	1:A:96:PRO:HB2	9	0.48
(1,1935)	1:A:94:GLU:HG3	1:A:96:PRO:HB2	9	0.48
(1,183)	1:A:99:ARG:H	1:A:99:ARG:HD2	9	0.48
(1,183)	1:A:99:ARG:H	1:A:99:ARG:HD3	9	0.48
(1,1817)	1:A:81:PHE:H	1:A:61:LEU:HD21	9	0.48
(1,1817)	1:A:81:PHE:H	1:A:61:LEU:HD22	9	0.48
(1,1817)	1:A:81:PHE:H	1:A:61:LEU:HD23	9	0.48
(1,1768)	1:A:12:LYS:H	1:A:10:LEU:HB3	4	0.48
(1,123)	1:A:60:THR:H	1:A:59:SER:HB2	9	0.48
(1,123)	1:A:60:THR:H	1:A:59:SER:HB3	9	0.48
(3,18)	1:A:124:LYS:H	1:A:14:GLU:O	7	0.47
(3,15)	1:A:14:GLU:N	1:A:124:LYS:O	9	0.47
(2,3)	1:A:59:SER:H	1:A:54:SER:HA	3	0.47
(2,3)	1:A:59:SER:H	1:A:54:SER:HA	5	0.47
(1,971)	1:A:28:ASP:H	1:A:31:LYS:HB2	3	0.47
(1,971)	1:A:28:ASP:H	1:A:31:LYS:HB3	3	0.47
(1,691)	1:A:34:ASN:H	1:A:32:LYS:HA	10	0.47
(1,66)	1:A:29:SER:H	1:A:31:LYS:H	2	0.47
(1,635)	1:A:129:ARG:H	1:A:128:ILE:HD11	2	0.47
(1,635)	1:A:129:ARG:H	1:A:128:ILE:HD12	2	0.47
(1,635)	1:A:129:ARG:H	1:A:128:ILE:HD13	2	0.47
(1,49)	1:A:23:LEU:H	1:A:21:ALA:HA	7	0.47
(1,392)	1:A:79:LYS:HE2	1:A:94:GLU:HG2	5	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,392)	1:A:79:LYS:HE2	1:A:94:GLU:HG3	5	0.47
(1,392)	1:A:79:LYS:HE3	1:A:94:GLU:HG2	5	0.47
(1,392)	1:A:79:LYS:HE3	1:A:94:GLU:HG3	5	0.47
(1,29)	1:A:14:GLU:H	1:A:13:ASN:HB2	7	0.47
(1,29)	1:A:14:GLU:H	1:A:13:ASN:HB3	7	0.47
(1,276)	1:A:25:VAL:HG11	1:A:74:VAL:HB	1	0.47
(1,276)	1:A:25:VAL:HG12	1:A:74:VAL:HB	1	0.47
(1,276)	1:A:25:VAL:HG13	1:A:74:VAL:HB	1	0.47
(1,276)	1:A:25:VAL:HG21	1:A:74:VAL:HB	1	0.47
(1,276)	1:A:25:VAL:HG22	1:A:74:VAL:HB	1	0.47
(1,276)	1:A:25:VAL:HG23	1:A:74:VAL:HB	1	0.47
(1,267)	1:A:74:VAL:HB	1:A:25:VAL:HG11	1	0.47
(1,267)	1:A:74:VAL:HB	1:A:25:VAL:HG12	1	0.47
(1,267)	1:A:74:VAL:HB	1:A:25:VAL:HG13	1	0.47
(1,267)	1:A:74:VAL:HB	1:A:25:VAL:HG21	1	0.47
(1,267)	1:A:74:VAL:HB	1:A:25:VAL:HG22	1	0.47
(1,267)	1:A:74:VAL:HB	1:A:25:VAL:HG23	1	0.47
(1,23)	1:A:12:LYS:H	1:A:11:GLU:HA	5	0.47
(1,22)	1:A:11:GLU:H	1:A:10:LEU:HG	7	0.47
(1,2002)	1:A:34:ASN:HB3	1:A:74:VAL:HG11	7	0.47
(1,2002)	1:A:34:ASN:HB3	1:A:74:VAL:HG12	7	0.47
(1,2002)	1:A:34:ASN:HB3	1:A:74:VAL:HG13	7	0.47
(1,1967)	1:A:124:LYS:HB2	1:A:14:GLU:HB3	4	0.47
(1,1953)	1:A:111:GLY:HA3	1:A:8:TYR:HD1	5	0.47
(1,1953)	1:A:111:GLY:HA3	1:A:8:TYR:HD2	5	0.47
(1,193)	1:A:104:THR:H	1:A:104:THR:HG21	9	0.47
(1,193)	1:A:104:THR:H	1:A:104:THR:HG22	9	0.47
(1,193)	1:A:104:THR:H	1:A:104:THR:HG23	9	0.47
(1,1914)	1:A:30:ILE:HG13	1:A:34:ASN:HB2	5	0.47
(1,1907)	1:A:34:ASN:HB2	1:A:30:ILE:HG13	5	0.47
(1,186)	1:A:102:THR:H	1:A:102:THR:HG21	4	0.47
(1,186)	1:A:102:THR:H	1:A:102:THR:HG22	4	0.47
(1,186)	1:A:102:THR:H	1:A:102:THR:HG23	4	0.47
(1,1651)	1:A:65:GLU:H	1:A:84:LEU:HD11	9	0.47
(1,1651)	1:A:65:GLU:H	1:A:84:LEU:HD12	9	0.47
(1,1651)	1:A:65:GLU:H	1:A:84:LEU:HD13	9	0.47
(1,1651)	1:A:65:GLU:H	1:A:84:LEU:HD21	9	0.47
(1,1651)	1:A:65:GLU:H	1:A:84:LEU:HD22	9	0.47
(1,1651)	1:A:65:GLU:H	1:A:84:LEU:HD23	9	0.47
(1,1631)	1:A:113:VAL:HG21	1:A:126:TYR:HE1	6	0.47
(1,1631)	1:A:113:VAL:HG22	1:A:126:TYR:HE1	6	0.47
(1,1631)	1:A:113:VAL:HG23	1:A:126:TYR:HE1	6	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,156)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD11	9	0.47
(1,156)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD12	9	0.47
(1,156)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD13	9	0.47
(1,156)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD21	9	0.47
(1,156)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD22	9	0.47
(1,156)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD23	9	0.47
(1,155)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD11	9	0.47
(1,155)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD12	9	0.47
(1,155)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD13	9	0.47
(1,155)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD21	9	0.47
(1,155)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD22	9	0.47
(1,155)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD23	9	0.47
(1,1330)	1:A:82:THR:H	1:A:91:VAL:HB	2	0.47
(1,1207)	1:A:76:MET:H	1:A:72:GLY:HA2	7	0.47
(1,1207)	1:A:76:MET:H	1:A:72:GLY:HA3	7	0.47
(3,19)	1:A:19:TYR:N	1:A:15:ASN:O	8	0.46
(3,18)	1:A:124:LYS:H	1:A:14:GLU:O	2	0.46
(2,3)	1:A:59:SER:H	1:A:54:SER:HA	9	0.46
(1,749)	1:A:54:SER:HA	1:A:39:VAL:HG11	8	0.46
(1,749)	1:A:54:SER:HA	1:A:39:VAL:HG12	8	0.46
(1,749)	1:A:54:SER:HA	1:A:39:VAL:HG13	8	0.46
(1,729)	1:A:125:ARG:H	1:A:13:ASN:HA	6	0.46
(1,723)	1:A:16:PHE:H	1:A:14:GLU:HB2	6	0.46
(1,713)	1:A:51:PHE:H	1:A:61:LEU:HB2	5	0.46
(1,713)	1:A:51:PHE:H	1:A:61:LEU:HB3	5	0.46
(1,64)	1:A:33:ALA:H	1:A:31:LYS:HA	2	0.46
(1,627)	1:A:14:GLU:H	1:A:124:LYS:H	1	0.46
(1,493)	1:A:56:GLY:H	1:A:57:MET:HB2	9	0.46
(1,493)	1:A:56:GLY:H	1:A:57:MET:HB3	9	0.46
(1,428)	1:A:17:GLU:H	1:A:19:TYR:H	9	0.46
(1,42)	1:A:19:TYR:H	1:A:18:GLU:HA	10	0.46
(1,409)	1:A:124:LYS:H	1:A:14:GLU:H	1	0.46
(1,396)	1:A:11:GLU:HG2	1:A:128:ILE:HG12	8	0.46
(1,396)	1:A:11:GLU:HG3	1:A:128:ILE:HG12	8	0.46
(1,389)	1:A:33:ALA:HB1	1:A:71:LEU:HD21	8	0.46
(1,389)	1:A:33:ALA:HB1	1:A:71:LEU:HD22	8	0.46
(1,389)	1:A:33:ALA:HB1	1:A:71:LEU:HD23	8	0.46
(1,389)	1:A:33:ALA:HB2	1:A:71:LEU:HD21	8	0.46
(1,389)	1:A:33:ALA:HB2	1:A:71:LEU:HD22	8	0.46
(1,389)	1:A:33:ALA:HB2	1:A:71:LEU:HD23	8	0.46
(1,389)	1:A:33:ALA:HB3	1:A:71:LEU:HD21	8	0.46
(1,389)	1:A:33:ALA:HB3	1:A:71:LEU:HD22	8	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,389)	1:A:33:ALA:HB3	1:A:71:LEU:HD23	8	0.46
(1,378)	1:A:48:LYS:HB2	1:A:2:VAL:HG11	4	0.46
(1,378)	1:A:48:LYS:HB2	1:A:2:VAL:HG12	4	0.46
(1,378)	1:A:48:LYS:HB2	1:A:2:VAL:HG13	4	0.46
(1,34)	1:A:124:LYS:H	1:A:14:GLU:HB2	2	0.46
(1,34)	1:A:124:LYS:H	1:A:14:GLU:HB3	2	0.46
(1,281)	1:A:84:LEU:HA	1:A:89:LEU:HB2	3	0.46
(1,281)	1:A:84:LEU:HA	1:A:89:LEU:HB3	3	0.46
(1,276)	1:A:25:VAL:HG11	1:A:74:VAL:HB	6	0.46
(1,276)	1:A:25:VAL:HG12	1:A:74:VAL:HB	6	0.46
(1,276)	1:A:25:VAL:HG13	1:A:74:VAL:HB	6	0.46
(1,276)	1:A:25:VAL:HG21	1:A:74:VAL:HB	6	0.46
(1,276)	1:A:25:VAL:HG22	1:A:74:VAL:HB	6	0.46
(1,276)	1:A:25:VAL:HG23	1:A:74:VAL:HB	6	0.46
(1,267)	1:A:74:VAL:HB	1:A:25:VAL:HG11	6	0.46
(1,267)	1:A:74:VAL:HB	1:A:25:VAL:HG12	6	0.46
(1,267)	1:A:74:VAL:HB	1:A:25:VAL:HG13	6	0.46
(1,267)	1:A:74:VAL:HB	1:A:25:VAL:HG21	6	0.46
(1,267)	1:A:74:VAL:HB	1:A:25:VAL:HG22	6	0.46
(1,267)	1:A:74:VAL:HB	1:A:25:VAL:HG23	6	0.46
(1,213)	1:A:125:ARG:H	1:A:114:LEU:HB2	6	0.46
(1,213)	1:A:125:ARG:H	1:A:114:LEU:HB3	6	0.46
(1,212)	1:A:125:ARG:H	1:A:114:LEU:HB2	6	0.46
(1,212)	1:A:125:ARG:H	1:A:114:LEU:HB3	6	0.46
(1,2051)	1:A:12:LYS:HE2	1:A:126:TYR:HD1	7	0.46
(1,2051)	1:A:12:LYS:HE3	1:A:126:TYR:HD1	7	0.46
(1,196)	1:A:106:GLU:H	1:A:105:TYR:HB2	1	0.46
(1,196)	1:A:106:GLU:H	1:A:105:TYR:HB3	1	0.46
(1,1957)	1:A:114:LEU:HD21	1:A:10:LEU:HA	1	0.46
(1,1957)	1:A:114:LEU:HD22	1:A:10:LEU:HA	1	0.46
(1,1957)	1:A:114:LEU:HD23	1:A:10:LEU:HA	1	0.46
(1,1948)	1:A:44:VAL:HB	1:A:4:LEU:HB3	10	0.46
(1,1933)	1:A:97:ASP:HB3	1:A:95:LEU:HD11	1	0.46
(1,1933)	1:A:97:ASP:HB3	1:A:95:LEU:HD12	1	0.46
(1,1933)	1:A:97:ASP:HB3	1:A:95:LEU:HD13	1	0.46
(1,1920)	1:A:42:ILE:HG13	1:A:44:VAL:HG11	5	0.46
(1,1920)	1:A:42:ILE:HG13	1:A:44:VAL:HG12	5	0.46
(1,1920)	1:A:42:ILE:HG13	1:A:44:VAL:HG13	5	0.46
(1,1885)	1:A:22:ALA:HB1	1:A:18:GLU:HB2	10	0.46
(1,1885)	1:A:22:ALA:HB2	1:A:18:GLU:HB2	10	0.46
(1,1885)	1:A:22:ALA:HB3	1:A:18:GLU:HB2	10	0.46
(1,1816)	1:A:39:VAL:H	1:A:54:SER:HA	9	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1787)	1:A:29:SER:H	1:A:32:LYS:HE2	8	0.46
(1,1787)	1:A:29:SER:H	1:A:32:LYS:HE3	8	0.46
(1,1286)	1:A:88:LYS:H	1:A:84:LEU:HG	4	0.46
(1,125)	1:A:53:SER:H	1:A:60:THR:HA	1	0.46
(3,9)	1:A:10:LEU:N	1:A:40:TYR:O	3	0.45
(3,64)	1:A:129:ARG:H	1:A:109:ASP:O	3	0.45
(1,732)	1:A:33:ALA:H	1:A:74:VAL:HG11	7	0.45
(1,732)	1:A:33:ALA:H	1:A:74:VAL:HG12	7	0.45
(1,732)	1:A:33:ALA:H	1:A:74:VAL:HG13	7	0.45
(1,703)	1:A:69:GLU:H	1:A:78:ILE:HD11	4	0.45
(1,703)	1:A:69:GLU:H	1:A:78:ILE:HD12	4	0.45
(1,703)	1:A:69:GLU:H	1:A:78:ILE:HD13	4	0.45
(1,68)	1:A:33:ALA:H	1:A:31:LYS:H	5	0.45
(1,68)	1:A:33:ALA:H	1:A:31:LYS:H	7	0.45
(1,635)	1:A:129:ARG:H	1:A:128:ILE:HD11	4	0.45
(1,635)	1:A:129:ARG:H	1:A:128:ILE:HD12	4	0.45
(1,635)	1:A:129:ARG:H	1:A:128:ILE:HD13	4	0.45
(1,635)	1:A:129:ARG:H	1:A:128:ILE:HD11	5	0.45
(1,635)	1:A:129:ARG:H	1:A:128:ILE:HD12	5	0.45
(1,635)	1:A:129:ARG:H	1:A:128:ILE:HD13	5	0.45
(1,48)	1:A:21:ALA:H	1:A:20:LEU:HA	6	0.45
(1,42)	1:A:19:TYR:H	1:A:18:GLU:HA	2	0.45
(1,418)	1:A:19:TYR:H	1:A:17:GLU:HA	6	0.45
(1,383)	1:A:36:PRO:HG2	1:A:12:LYS:HA	8	0.45
(1,383)	1:A:36:PRO:HG3	1:A:12:LYS:HA	8	0.45
(1,270)	1:A:73:THR:HG21	1:A:33:ALA:HB1	9	0.45
(1,270)	1:A:73:THR:HG21	1:A:33:ALA:HB2	9	0.45
(1,270)	1:A:73:THR:HG21	1:A:33:ALA:HB3	9	0.45
(1,270)	1:A:73:THR:HG22	1:A:33:ALA:HB1	9	0.45
(1,270)	1:A:73:THR:HG22	1:A:33:ALA:HB2	9	0.45
(1,270)	1:A:73:THR:HG22	1:A:33:ALA:HB3	9	0.45
(1,270)	1:A:73:THR:HG23	1:A:33:ALA:HB1	9	0.45
(1,270)	1:A:73:THR:HG23	1:A:33:ALA:HB2	9	0.45
(1,270)	1:A:73:THR:HG23	1:A:33:ALA:HB3	9	0.45
(1,23)	1:A:12:LYS:H	1:A:11:GLU:HA	2	0.45
(1,2017)	1:A:63:VAL:HG11	1:A:89:LEU:HA	2	0.45
(1,2017)	1:A:63:VAL:HG12	1:A:89:LEU:HA	2	0.45
(1,2017)	1:A:63:VAL:HG13	1:A:89:LEU:HA	2	0.45
(1,2017)	1:A:63:VAL:HG11	1:A:89:LEU:HA	9	0.45
(1,2017)	1:A:63:VAL:HG12	1:A:89:LEU:HA	9	0.45
(1,2017)	1:A:63:VAL:HG13	1:A:89:LEU:HA	9	0.45
(1,2002)	1:A:34:ASN:HB3	1:A:74:VAL:HG11	10	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2002)	1:A:34:ASN:HB3	1:A:74:VAL:HG12	10	0.45
(1,2002)	1:A:34:ASN:HB3	1:A:74:VAL:HG13	10	0.45
(1,1943)	1:A:45:ASN:HB3	1:A:2:VAL:HA	3	0.45
(1,1924)	1:A:65:GLU:HB3	1:A:67:VAL:HG21	9	0.45
(1,1924)	1:A:65:GLU:HB3	1:A:67:VAL:HG22	9	0.45
(1,1924)	1:A:65:GLU:HB3	1:A:67:VAL:HG23	9	0.45
(1,1906)	1:A:27:GLN:HA	1:A:30:ILE:HG13	9	0.45
(1,1817)	1:A:81:PHE:H	1:A:61:LEU:HD21	5	0.45
(1,1817)	1:A:81:PHE:H	1:A:61:LEU:HD22	5	0.45
(1,1817)	1:A:81:PHE:H	1:A:61:LEU:HD23	5	0.45
(1,1813)	1:A:3:GLN:HE22	1:A:45:ASN:HA	10	0.45
(1,179)	1:A:97:ASP:H	1:A:95:LEU:HB2	4	0.45
(1,179)	1:A:97:ASP:H	1:A:95:LEU:HB3	4	0.45
(1,1647)	1:A:14:GLU:H	1:A:124:LYS:HG2	9	0.45
(1,1647)	1:A:14:GLU:H	1:A:124:LYS:HG3	9	0.45
(1,1631)	1:A:113:VAL:HG21	1:A:126:TYR:HE1	10	0.45
(1,1631)	1:A:113:VAL:HG22	1:A:126:TYR:HE1	10	0.45
(1,1631)	1:A:113:VAL:HG23	1:A:126:TYR:HE1	10	0.45
(1,109)	1:A:53:SER:H	1:A:52:LYS:HG2	2	0.45
(1,109)	1:A:53:SER:H	1:A:52:LYS:HG3	2	0.45
(1,1049)	1:A:48:LYS:H	1:A:44:VAL:HG11	3	0.45
(1,1049)	1:A:48:LYS:H	1:A:44:VAL:HG12	3	0.45
(1,1049)	1:A:48:LYS:H	1:A:44:VAL:HG13	3	0.45
(1,1049)	1:A:48:LYS:H	1:A:44:VAL:HG21	3	0.45
(1,1049)	1:A:48:LYS:H	1:A:44:VAL:HG22	3	0.45
(1,1049)	1:A:48:LYS:H	1:A:44:VAL:HG23	3	0.45
(3,63)	1:A:129:ARG:N	1:A:109:ASP:O	9	0.44
(3,51)	1:A:106:GLU:N	1:A:113:VAL:O	4	0.44
(3,20)	1:A:19:TYR:H	1:A:15:ASN:O	4	0.44
(1,728)	1:A:45:ASN:H	1:A:2:VAL:HG11	6	0.44
(1,728)	1:A:45:ASN:H	1:A:2:VAL:HG12	6	0.44
(1,728)	1:A:45:ASN:H	1:A:2:VAL:HG13	6	0.44
(1,635)	1:A:129:ARG:H	1:A:128:ILE:HD11	6	0.44
(1,635)	1:A:129:ARG:H	1:A:128:ILE:HD12	6	0.44
(1,635)	1:A:129:ARG:H	1:A:128:ILE:HD13	6	0.44
(1,599)	1:A:127:PHE:H	1:A:112:PHE:HA	3	0.44
(1,551)	1:A:83:LYS:H	1:A:83:LYS:HD2	6	0.44
(1,551)	1:A:83:LYS:H	1:A:83:LYS:HD3	6	0.44
(1,49)	1:A:23:LEU:H	1:A:21:ALA:HA	8	0.44
(1,48)	1:A:21:ALA:H	1:A:20:LEU:HA	1	0.44
(1,48)	1:A:21:ALA:H	1:A:20:LEU:HA	10	0.44
(1,430)	1:A:24:GLY:H	1:A:20:LEU:HA	3	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,42)	1:A:19:TYR:H	1:A:18:GLU:HA	4	0.44
(1,42)	1:A:19:TYR:H	1:A:18:GLU:HA	9	0.44
(1,369)	1:A:3:GLN:H	1:A:2:VAL:HG11	7	0.44
(1,369)	1:A:3:GLN:H	1:A:2:VAL:HG12	7	0.44
(1,369)	1:A:3:GLN:H	1:A:2:VAL:HG13	7	0.44
(1,353)	1:A:6:GLY:H	1:A:5:ALA:HA	2	0.44
(1,245)	1:A:125:ARG:H	1:A:125:ARG:HD2	10	0.44
(1,245)	1:A:125:ARG:H	1:A:125:ARG:HD3	10	0.44
(1,2056)	1:A:14:GLU:HB3	1:A:126:TYR:HE1	3	0.44
(1,2052)	1:A:14:GLU:HB2	1:A:126:TYR:HD1	7	0.44
(1,2032)	1:A:105:TYR:HB2	1:A:112:PHE:HA	9	0.44
(1,2032)	1:A:105:TYR:HB3	1:A:112:PHE:HA	9	0.44
(1,202)	1:A:111:GLY:H	1:A:110:LYS:HB2	9	0.44
(1,202)	1:A:111:GLY:H	1:A:110:LYS:HB3	9	0.44
(1,2017)	1:A:63:VAL:HG11	1:A:89:LEU:HA	8	0.44
(1,2017)	1:A:63:VAL:HG12	1:A:89:LEU:HA	8	0.44
(1,2017)	1:A:63:VAL:HG13	1:A:89:LEU:HA	8	0.44
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD11	1:A:83:LYS:HE2	4	0.44
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD11	1:A:83:LYS:HE3	4	0.44
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD12	1:A:83:LYS:HE2	4	0.44
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD12	1:A:83:LYS:HE3	4	0.44
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD13	1:A:83:LYS:HE2	4	0.44
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD13	1:A:83:LYS:HE3	4	0.44
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD21	1:A:83:LYS:HE2	4	0.44
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD21	1:A:83:LYS:HE3	4	0.44
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD22	1:A:83:LYS:HE2	4	0.44
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD22	1:A:83:LYS:HE3	4	0.44
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD23	1:A:83:LYS:HE2	4	0.44
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD23	1:A:83:LYS:HE3	4	0.44
(1,1991)	1:A:82:THR:HB	1:A:61:LEU:HB2	4	0.44
(1,197)	1:A:89:LEU:H	1:A:106:GLU:HA	1	0.44
(1,1958)	1:A:36:PRO:HA	1:A:10:LEU:HB3	4	0.44
(1,1953)	1:A:111:GLY:HA3	1:A:8:TYR:HD1	9	0.44
(1,1953)	1:A:111:GLY:HA3	1:A:8:TYR:HD2	9	0.44
(1,1935)	1:A:94:GLU:HG2	1:A:96:PRO:HB2	8	0.44
(1,1935)	1:A:94:GLU:HG3	1:A:96:PRO:HB2	8	0.44
(1,19)	1:A:128:ILE:H	1:A:10:LEU:HA	9	0.44
(1,1885)	1:A:22:ALA:HB1	1:A:18:GLU:HB2	8	0.44
(1,1885)	1:A:22:ALA:HB2	1:A:18:GLU:HB2	8	0.44
(1,1885)	1:A:22:ALA:HB3	1:A:18:GLU:HB2	8	0.44
(1,1781)	1:A:17:GLU:H	1:A:21:ALA:HB1	2	0.44
(1,1781)	1:A:17:GLU:H	1:A:21:ALA:HB2	2	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1781)	1:A:17:GLU:H	1:A:21:ALA:HB3	2	0.44
(1,1768)	1:A:12:LYS:H	1:A:10:LEU:HB3	10	0.44
(1,170)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:HG11	8	0.44
(1,170)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:HG12	8	0.44
(1,170)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:HG13	8	0.44
(1,170)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:HG21	8	0.44
(1,170)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:HG22	8	0.44
(1,170)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:HG23	8	0.44
(1,145)	1:A:94:GLU:H	1:A:79:LYS:H	4	0.44
(1,10)	1:A:8:TYR:H	1:A:7:THR:HG21	10	0.44
(1,10)	1:A:8:TYR:H	1:A:7:THR:HG22	10	0.44
(1,10)	1:A:8:TYR:H	1:A:7:THR:HG23	10	0.44
(3,17)	1:A:124:LYS:N	1:A:14:GLU:O	4	0.43
(2,3)	1:A:59:SER:H	1:A:54:SER:HA	4	0.43
(1,63)	1:A:32:LYS:H	1:A:31:LYS:HA	6	0.43
(1,493)	1:A:56:GLY:H	1:A:57:MET:HB2	2	0.43
(1,493)	1:A:56:GLY:H	1:A:57:MET:HB3	2	0.43
(1,48)	1:A:21:ALA:H	1:A:20:LEU:HA	3	0.43
(1,430)	1:A:24:GLY:H	1:A:20:LEU:HA	10	0.43
(1,43)	1:A:22:ALA:H	1:A:18:GLU:HA	10	0.43
(1,429)	1:A:22:ALA:H	1:A:20:LEU:HA	5	0.43
(1,418)	1:A:19:TYR:H	1:A:17:GLU:HA	5	0.43
(1,353)	1:A:6:GLY:H	1:A:5:ALA:HA	1	0.43
(1,29)	1:A:14:GLU:H	1:A:13:ASN:HB2	4	0.43
(1,29)	1:A:14:GLU:H	1:A:13:ASN:HB3	4	0.43
(1,285)	1:A:23:LEU:HB2	1:A:95:LEU:HB2	4	0.43
(1,285)	1:A:23:LEU:HB2	1:A:95:LEU:HB3	4	0.43
(1,285)	1:A:23:LEU:HB3	1:A:95:LEU:HB2	4	0.43
(1,285)	1:A:23:LEU:HB3	1:A:95:LEU:HB3	4	0.43
(1,284)	1:A:23:LEU:HB2	1:A:95:LEU:HB2	4	0.43
(1,284)	1:A:23:LEU:HB2	1:A:95:LEU:HB3	4	0.43
(1,284)	1:A:23:LEU:HB3	1:A:95:LEU:HB2	4	0.43
(1,284)	1:A:23:LEU:HB3	1:A:95:LEU:HB3	4	0.43
(1,253)	1:A:112:PHE:H	1:A:127:PHE:HB2	8	0.43
(1,253)	1:A:112:PHE:H	1:A:127:PHE:HB3	8	0.43
(1,247)	1:A:124:LYS:H	1:A:125:ARG:H	10	0.43
(1,223)	1:A:121:MET:H	1:A:118:ALA:H	4	0.43
(1,223)	1:A:121:MET:H	1:A:118:ALA:H	10	0.43
(1,220)	1:A:123:ALA:H	1:A:117:CYS:HA	8	0.43
(1,216)	1:A:125:ARG:H	1:A:115:THR:HA	8	0.43
(1,213)	1:A:125:ARG:H	1:A:114:LEU:HB2	2	0.43
(1,213)	1:A:125:ARG:H	1:A:114:LEU:HB3	2	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,212)	1:A:125:ARG:H	1:A:114:LEU:HB2	2	0.43
(1,212)	1:A:125:ARG:H	1:A:114:LEU:HB3	2	0.43
(1,205)	1:A:129:ARG:H	1:A:111:GLY:HA2	1	0.43
(1,205)	1:A:129:ARG:H	1:A:111:GLY:HA3	1	0.43
(1,2019)	1:A:63:VAL:HG21	1:A:89:LEU:HB2	9	0.43
(1,2019)	1:A:63:VAL:HG22	1:A:89:LEU:HB2	9	0.43
(1,2019)	1:A:63:VAL:HG23	1:A:89:LEU:HB2	9	0.43
(1,196)	1:A:106:GLU:H	1:A:105:TYR:HB2	10	0.43
(1,196)	1:A:106:GLU:H	1:A:105:TYR:HB3	10	0.43
(1,1951)	1:A:87:SER:HB3	1:A:4:LEU:HD21	4	0.43
(1,1951)	1:A:87:SER:HB3	1:A:4:LEU:HD22	4	0.43
(1,1951)	1:A:87:SER:HB3	1:A:4:LEU:HD23	4	0.43
(1,1910)	1:A:27:GLN:HG2	1:A:31:LYS:HG2	5	0.43
(1,1910)	1:A:27:GLN:HG3	1:A:31:LYS:HG2	5	0.43
(1,1898)	1:A:31:LYS:HG2	1:A:27:GLN:HG2	5	0.43
(1,1898)	1:A:31:LYS:HG2	1:A:27:GLN:HG3	5	0.43
(1,169)	1:A:81:PHE:H	1:A:91:VAL:HG11	5	0.43
(1,169)	1:A:81:PHE:H	1:A:91:VAL:HG12	5	0.43
(1,169)	1:A:81:PHE:H	1:A:91:VAL:HG13	5	0.43
(1,169)	1:A:81:PHE:H	1:A:91:VAL:HG21	5	0.43
(1,169)	1:A:81:PHE:H	1:A:91:VAL:HG22	5	0.43
(1,169)	1:A:81:PHE:H	1:A:91:VAL:HG23	5	0.43
(1,164)	1:A:81:PHE:H	1:A:91:VAL:HA	9	0.43
(1,1631)	1:A:113:VAL:HG21	1:A:126:TYR:HE1	5	0.43
(1,1631)	1:A:113:VAL:HG22	1:A:126:TYR:HE1	5	0.43
(1,1631)	1:A:113:VAL:HG23	1:A:126:TYR:HE1	5	0.43
(1,159)	1:A:88:LYS:H	1:A:88:LYS:HE2	9	0.43
(1,159)	1:A:88:LYS:H	1:A:88:LYS:HE3	9	0.43
(1,125)	1:A:53:SER:H	1:A:60:THR:HA	2	0.43
(1,125)	1:A:53:SER:H	1:A:60:THR:HA	3	0.43
(3,64)	1:A:129:ARG:H	1:A:109:ASP:O	5	0.42
(1,972)	1:A:35:SER:H	1:A:31:LYS:HB2	1	0.42
(1,972)	1:A:35:SER:H	1:A:31:LYS:HB3	1	0.42
(1,78)	1:A:35:SER:H	1:A:33:ALA:H	4	0.42
(1,731)	1:A:76:MET:H	1:A:71:LEU:HD11	8	0.42
(1,731)	1:A:76:MET:H	1:A:71:LEU:HD12	8	0.42
(1,731)	1:A:76:MET:H	1:A:71:LEU:HD13	8	0.42
(1,614)	1:A:121:MET:H	1:A:118:ALA:HA	3	0.42
(1,552)	1:A:83:LYS:H	1:A:83:LYS:HE2	7	0.42
(1,552)	1:A:83:LYS:H	1:A:83:LYS:HE3	7	0.42
(1,48)	1:A:21:ALA:H	1:A:20:LEU:HA	4	0.42
(1,48)	1:A:21:ALA:H	1:A:20:LEU:HA	7	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,428)	1:A:17:GLU:H	1:A:19:TYR:H	8	0.42
(1,4)	1:A:5:ALA:H	1:A:4:LEU:HA	7	0.42
(1,395)	1:A:115:THR:HB	1:A:124:LYS:HD2	6	0.42
(1,395)	1:A:115:THR:HB	1:A:124:LYS:HD3	6	0.42
(1,353)	1:A:6:GLY:H	1:A:5:ALA:HA	7	0.42
(1,353)	1:A:6:GLY:H	1:A:5:ALA:HA	10	0.42
(1,220)	1:A:123:ALA:H	1:A:117:CYS:HA	5	0.42
(1,219)	1:A:104:THR:H	1:A:116:MET:HA	6	0.42
(1,189)	1:A:104:THR:H	1:A:103:ARG:HG2	10	0.42
(1,189)	1:A:104:THR:H	1:A:103:ARG:HG3	10	0.42
(1,1800)	1:A:45:ASN:HD21	1:A:2:VAL:HG11	9	0.42
(1,1800)	1:A:45:ASN:HD21	1:A:2:VAL:HG12	9	0.42
(1,1800)	1:A:45:ASN:HD21	1:A:2:VAL:HG13	9	0.42
(1,1784)	1:A:27:GLN:HE21	1:A:29:SER:H	1	0.42
(1,1784)	1:A:27:GLN:HE21	1:A:29:SER:H	6	0.42
(1,1753)	1:A:27:GLN:H	1:A:26:PRO:HD2	9	0.42
(1,1654)	1:A:16:PHE:HB2	1:A:33:ALA:HB1	4	0.42
(1,1654)	1:A:16:PHE:HB2	1:A:33:ALA:HB2	4	0.42
(1,1654)	1:A:16:PHE:HB2	1:A:33:ALA:HB3	4	0.42
(1,1654)	1:A:16:PHE:HB3	1:A:33:ALA:HB1	4	0.42
(1,1654)	1:A:16:PHE:HB3	1:A:33:ALA:HB2	4	0.42
(1,1654)	1:A:16:PHE:HB3	1:A:33:ALA:HB3	4	0.42
(1,1578)	1:A:73:THR:HG21	1:A:71:LEU:HD11	2	0.42
(1,1578)	1:A:73:THR:HG21	1:A:71:LEU:HD12	2	0.42
(1,1578)	1:A:73:THR:HG21	1:A:71:LEU:HD13	2	0.42
(1,1578)	1:A:73:THR:HG21	1:A:71:LEU:HD21	2	0.42
(1,1578)	1:A:73:THR:HG21	1:A:71:LEU:HD22	2	0.42
(1,1578)	1:A:73:THR:HG21	1:A:71:LEU:HD23	2	0.42
(1,1578)	1:A:73:THR:HG22	1:A:71:LEU:HD11	2	0.42
(1,1578)	1:A:73:THR:HG22	1:A:71:LEU:HD12	2	0.42
(1,1578)	1:A:73:THR:HG22	1:A:71:LEU:HD13	2	0.42
(1,1578)	1:A:73:THR:HG22	1:A:71:LEU:HD21	2	0.42
(1,1578)	1:A:73:THR:HG22	1:A:71:LEU:HD22	2	0.42
(1,1578)	1:A:73:THR:HG22	1:A:71:LEU:HD23	2	0.42
(1,1578)	1:A:73:THR:HG23	1:A:71:LEU:HD11	2	0.42
(1,1578)	1:A:73:THR:HG23	1:A:71:LEU:HD12	2	0.42
(1,1578)	1:A:73:THR:HG23	1:A:71:LEU:HD13	2	0.42
(1,1578)	1:A:73:THR:HG23	1:A:71:LEU:HD21	2	0.42
(1,1578)	1:A:73:THR:HG23	1:A:71:LEU:HD22	2	0.42
(1,1578)	1:A:73:THR:HG23	1:A:71:LEU:HD23	2	0.42
(1,152)	1:A:92:ASN:H	1:A:82:THR:HA	3	0.42
(1,136)	1:A:66:GLU:H	1:A:65:GLU:HG2	6	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,136)	1:A:66:GLU:H	1:A:65:GLU:HG3	6	0.42
(1,131)	1:A:63:VAL:H	1:A:62:ILE:HD11	10	0.42
(1,131)	1:A:63:VAL:H	1:A:62:ILE:HD12	10	0.42
(1,131)	1:A:63:VAL:H	1:A:62:ILE:HD13	10	0.42
(1,1049)	1:A:48:LYS:H	1:A:44:VAL:HG11	4	0.42
(1,1049)	1:A:48:LYS:H	1:A:44:VAL:HG12	4	0.42
(1,1049)	1:A:48:LYS:H	1:A:44:VAL:HG13	4	0.42
(1,1049)	1:A:48:LYS:H	1:A:44:VAL:HG21	4	0.42
(1,1049)	1:A:48:LYS:H	1:A:44:VAL:HG22	4	0.42
(1,1049)	1:A:48:LYS:H	1:A:44:VAL:HG23	4	0.42
(1,1049)	1:A:48:LYS:H	1:A:44:VAL:HG11	6	0.42
(1,1049)	1:A:48:LYS:H	1:A:44:VAL:HG12	6	0.42
(1,1049)	1:A:48:LYS:H	1:A:44:VAL:HG13	6	0.42
(1,1049)	1:A:48:LYS:H	1:A:44:VAL:HG21	6	0.42
(1,1049)	1:A:48:LYS:H	1:A:44:VAL:HG22	6	0.42
(1,1049)	1:A:48:LYS:H	1:A:44:VAL:HG23	6	0.42
(3,16)	1:A:14:GLU:H	1:A:124:LYS:O	4	0.41
(3,10)	1:A:10:LEU:H	1:A:40:TYR:O	6	0.41
(2,5)	1:A:94:GLU:H	1:A:80:SER:HA	5	0.41
(2,5)	1:A:94:GLU:H	1:A:80:SER:HA	8	0.41
(1,732)	1:A:33:ALA:H	1:A:74:VAL:HG11	6	0.41
(1,732)	1:A:33:ALA:H	1:A:74:VAL:HG12	6	0.41
(1,732)	1:A:33:ALA:H	1:A:74:VAL:HG13	6	0.41
(1,728)	1:A:45:ASN:H	1:A:2:VAL:HG11	2	0.41
(1,728)	1:A:45:ASN:H	1:A:2:VAL:HG12	2	0.41
(1,728)	1:A:45:ASN:H	1:A:2:VAL:HG13	2	0.41
(1,710)	1:A:51:PHE:HB2	1:A:61:LEU:HB2	8	0.41
(1,710)	1:A:51:PHE:HB2	1:A:61:LEU:HB3	8	0.41
(1,710)	1:A:51:PHE:HB3	1:A:61:LEU:HB2	8	0.41
(1,710)	1:A:51:PHE:HB3	1:A:61:LEU:HB3	8	0.41
(1,648)	1:A:50:THR:HB	1:A:43:ILE:HB	4	0.41
(1,648)	1:A:50:THR:HB	1:A:43:ILE:HB	10	0.41
(1,644)	1:A:126:TYR:HB2	1:A:12:LYS:HB2	2	0.41
(1,644)	1:A:126:TYR:HB2	1:A:12:LYS:HB3	2	0.41
(1,644)	1:A:126:TYR:HB3	1:A:12:LYS:HB2	2	0.41
(1,644)	1:A:126:TYR:HB3	1:A:12:LYS:HB3	2	0.41
(1,643)	1:A:126:TYR:HB2	1:A:12:LYS:HB2	2	0.41
(1,643)	1:A:126:TYR:HB2	1:A:12:LYS:HB3	2	0.41
(1,643)	1:A:126:TYR:HB3	1:A:12:LYS:HB2	2	0.41
(1,634)	1:A:112:PHE:H	1:A:128:ILE:HD11	4	0.41
(1,634)	1:A:112:PHE:H	1:A:128:ILE:HD12	4	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,634)	1:A:112:PHE:H	1:A:128:ILE:HD13	4	0.41
(1,634)	1:A:112:PHE:H	1:A:128:ILE:HD11	8	0.41
(1,634)	1:A:112:PHE:H	1:A:128:ILE:HD12	8	0.41
(1,634)	1:A:112:PHE:H	1:A:128:ILE:HD13	8	0.41
(1,614)	1:A:121:MET:H	1:A:118:ALA:HA	5	0.41
(1,599)	1:A:127:PHE:H	1:A:112:PHE:HA	5	0.41
(1,43)	1:A:22:ALA:H	1:A:18:GLU:HA	1	0.41
(1,428)	1:A:17:GLU:H	1:A:19:TYR:H	6	0.41
(1,376)	1:A:106:GLU:H	1:A:113:VAL:HB	9	0.41
(1,353)	1:A:6:GLY:H	1:A:5:ALA:HA	9	0.41
(1,34)	1:A:124:LYS:H	1:A:14:GLU:HB2	9	0.41
(1,34)	1:A:124:LYS:H	1:A:14:GLU:HB3	9	0.41
(1,275)	1:A:77:ASN:HB2	1:A:70:VAL:HA	5	0.41
(1,275)	1:A:77:ASN:HB3	1:A:70:VAL:HA	5	0.41
(1,239)	1:A:125:ARG:H	1:A:124:LYS:HB2	10	0.41
(1,239)	1:A:125:ARG:H	1:A:124:LYS:HB3	10	0.41
(1,23)	1:A:12:LYS:H	1:A:11:GLU:HA	1	0.41
(1,23)	1:A:12:LYS:H	1:A:11:GLU:HA	9	0.41
(1,23)	1:A:12:LYS:H	1:A:11:GLU:HA	10	0.41
(1,210)	1:A:127:PHE:H	1:A:113:VAL:HA	6	0.41
(1,205)	1:A:129:ARG:H	1:A:111:GLY:HA2	7	0.41
(1,205)	1:A:129:ARG:H	1:A:111:GLY:HA3	7	0.41
(1,197)	1:A:89:LEU:H	1:A:106:GLU:HA	3	0.41
(1,1965)	1:A:114:LEU:HD21	1:A:13:ASN:HB2	7	0.41
(1,1965)	1:A:114:LEU:HD22	1:A:13:ASN:HB2	7	0.41
(1,1965)	1:A:114:LEU:HD23	1:A:13:ASN:HB2	7	0.41
(1,196)	1:A:106:GLU:H	1:A:105:TYR:HB2	7	0.41
(1,196)	1:A:106:GLU:H	1:A:105:TYR:HB3	7	0.41
(1,1950)	1:A:87:SER:HB2	1:A:4:LEU:HD21	3	0.41
(1,1950)	1:A:87:SER:HB2	1:A:4:LEU:HD22	3	0.41
(1,1950)	1:A:87:SER:HB2	1:A:4:LEU:HD23	3	0.41
(1,1910)	1:A:27:GLN:HG2	1:A:31:LYS:HG2	9	0.41
(1,1910)	1:A:27:GLN:HG3	1:A:31:LYS:HG2	9	0.41
(1,1898)	1:A:31:LYS:HG2	1:A:27:GLN:HG2	9	0.41
(1,1898)	1:A:31:LYS:HG2	1:A:27:GLN:HG3	9	0.41
(1,1817)	1:A:81:PHE:H	1:A:61:LEU:HD21	7	0.41
(1,1817)	1:A:81:PHE:H	1:A:61:LEU:HD22	7	0.41
(1,1817)	1:A:81:PHE:H	1:A:61:LEU:HD23	7	0.41
(1,1799)	1:A:47:ASN:HD21	1:A:2:VAL:HB	4	0.41
(1,1792)	1:A:72:GLY:H	1:A:75:ASN:HA	6	0.41
(1,1789)	1:A:48:LYS:H	1:A:45:ASN:HD21	2	0.41
(1,1785)	1:A:27:GLN:HE22	1:A:31:LYS:HD2	10	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1785)	1:A:27:GLN:HE22	1:A:31:LYS:HD3	10	0.41
(1,1768)	1:A:12:LYS:H	1:A:10:LEU:HB3	1	0.41
(1,169)	1:A:81:PHE:H	1:A:91:VAL:HG11	1	0.41
(1,169)	1:A:81:PHE:H	1:A:91:VAL:HG12	1	0.41
(1,169)	1:A:81:PHE:H	1:A:91:VAL:HG13	1	0.41
(1,169)	1:A:81:PHE:H	1:A:91:VAL:HG21	1	0.41
(1,169)	1:A:81:PHE:H	1:A:91:VAL:HG22	1	0.41
(1,169)	1:A:81:PHE:H	1:A:91:VAL:HG23	1	0.41
(1,1578)	1:A:73:THR:HG21	1:A:71:LEU:HD11	1	0.41
(1,1578)	1:A:73:THR:HG21	1:A:71:LEU:HD12	1	0.41
(1,1578)	1:A:73:THR:HG21	1:A:71:LEU:HD13	1	0.41
(1,1578)	1:A:73:THR:HG21	1:A:71:LEU:HD21	1	0.41
(1,1578)	1:A:73:THR:HG21	1:A:71:LEU:HD22	1	0.41
(1,1578)	1:A:73:THR:HG21	1:A:71:LEU:HD23	1	0.41
(1,1578)	1:A:73:THR:HG22	1:A:71:LEU:HD11	1	0.41
(1,1578)	1:A:73:THR:HG22	1:A:71:LEU:HD12	1	0.41
(1,1578)	1:A:73:THR:HG22	1:A:71:LEU:HD13	1	0.41
(1,1578)	1:A:73:THR:HG22	1:A:71:LEU:HD21	1	0.41
(1,1578)	1:A:73:THR:HG22	1:A:71:LEU:HD22	1	0.41
(1,1578)	1:A:73:THR:HG22	1:A:71:LEU:HD23	1	0.41
(1,1578)	1:A:73:THR:HG23	1:A:71:LEU:HD11	1	0.41
(1,1578)	1:A:73:THR:HG23	1:A:71:LEU:HD12	1	0.41
(1,1578)	1:A:73:THR:HG23	1:A:71:LEU:HD13	1	0.41
(1,1578)	1:A:73:THR:HG23	1:A:71:LEU:HD21	1	0.41
(1,1578)	1:A:73:THR:HG23	1:A:71:LEU:HD22	1	0.41
(1,1578)	1:A:73:THR:HG23	1:A:71:LEU:HD23	1	0.41
(1,156)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD11	3	0.41
(1,156)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD12	3	0.41
(1,156)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD13	3	0.41
(1,156)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD21	3	0.41
(1,156)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD22	3	0.41
(1,156)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD23	3	0.41
(1,155)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD11	3	0.41
(1,155)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD12	3	0.41
(1,155)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD13	3	0.41
(1,155)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD21	3	0.41
(1,155)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD22	3	0.41
(1,155)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD23	3	0.41
(1,139)	1:A:33:ALA:H	1:A:73:THR:HB	10	0.41
(1,130)	1:A:63:VAL:H	1:A:62:ILE:HB	2	0.41
(1,1207)	1:A:76:MET:H	1:A:72:GLY:HA2	8	0.41
(1,1207)	1:A:76:MET:H	1:A:72:GLY:HA3	8	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1049)	1:A:48:LYS:H	1:A:44:VAL:HG11	8	0.41
(1,1049)	1:A:48:LYS:H	1:A:44:VAL:HG12	8	0.41
(1,1049)	1:A:48:LYS:H	1:A:44:VAL:HG13	8	0.41
(1,1049)	1:A:48:LYS:H	1:A:44:VAL:HG21	8	0.41
(1,1049)	1:A:48:LYS:H	1:A:44:VAL:HG22	8	0.41
(1,1049)	1:A:48:LYS:H	1:A:44:VAL:HG23	8	0.41
(3,18)	1:A:124:LYS:H	1:A:14:GLU:O	1	0.4
(2,3)	1:A:59:SER:H	1:A:54:SER:HA	7	0.4
(1,91)	1:A:8:TYR:H	1:A:43:ILE:HA	6	0.4
(1,727)	1:A:85:GLU:H	1:A:89:LEU:HG	1	0.4
(1,65)	1:A:34:ASN:H	1:A:31:LYS:HA	10	0.4
(1,648)	1:A:50:THR:HB	1:A:43:ILE:HB	8	0.4
(1,614)	1:A:121:MET:H	1:A:118:ALA:HA	4	0.4
(1,49)	1:A:23:LEU:H	1:A:21:ALA:HA	2	0.4
(1,428)	1:A:17:GLU:H	1:A:19:TYR:H	10	0.4
(1,394)	1:A:126:TYR:HB2	1:A:113:VAL:HA	3	0.4
(1,370)	1:A:5:ALA:H	1:A:4:LEU:HD21	9	0.4
(1,370)	1:A:5:ALA:H	1:A:4:LEU:HD22	9	0.4
(1,370)	1:A:5:ALA:H	1:A:4:LEU:HD23	9	0.4
(1,29)	1:A:14:GLU:H	1:A:13:ASN:HB2	3	0.4
(1,29)	1:A:14:GLU:H	1:A:13:ASN:HB3	3	0.4
(1,285)	1:A:23:LEU:HB2	1:A:95:LEU:HB2	9	0.4
(1,285)	1:A:23:LEU:HB2	1:A:95:LEU:HB3	9	0.4
(1,285)	1:A:23:LEU:HB3	1:A:95:LEU:HB2	9	0.4
(1,285)	1:A:23:LEU:HB3	1:A:95:LEU:HB3	9	0.4
(1,284)	1:A:23:LEU:HB2	1:A:95:LEU:HB2	9	0.4
(1,284)	1:A:23:LEU:HB2	1:A:95:LEU:HB3	9	0.4
(1,284)	1:A:23:LEU:HB3	1:A:95:LEU:HB2	9	0.4
(1,284)	1:A:23:LEU:HB3	1:A:95:LEU:HB3	9	0.4
(1,253)	1:A:112:PHE:H	1:A:127:PHE:HB2	9	0.4
(1,253)	1:A:112:PHE:H	1:A:127:PHE:HB3	9	0.4
(1,23)	1:A:12:LYS:H	1:A:11:GLU:HA	6	0.4
(1,23)	1:A:12:LYS:H	1:A:11:GLU:HA	8	0.4
(1,2051)	1:A:12:LYS:HE2	1:A:126:TYR:HD1	9	0.4
(1,2051)	1:A:12:LYS:HE3	1:A:126:TYR:HD1	9	0.4
(1,2044)	1:A:122:VAL:HG21	1:A:117:CYS:HB2	2	0.4
(1,2044)	1:A:122:VAL:HG22	1:A:117:CYS:HB2	2	0.4
(1,2044)	1:A:122:VAL:HG23	1:A:117:CYS:HB2	2	0.4
(1,1976)	1:A:75:ASN:HB2	1:A:25:VAL:HG11	10	0.4
(1,1976)	1:A:75:ASN:HB2	1:A:25:VAL:HG12	10	0.4
(1,1976)	1:A:75:ASN:HB2	1:A:25:VAL:HG13	10	0.4
(1,1938)	1:A:118:ALA:HB1	1:A:122:VAL:HB	2	0.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1938)	1:A:118:ALA:HB2	1:A:122:VAL:HB	2	0.4
(1,1938)	1:A:118:ALA:HB3	1:A:122:VAL:HB	2	0.4
(1,1938)	1:A:118:ALA:HB1	1:A:122:VAL:HB	10	0.4
(1,1938)	1:A:118:ALA:HB2	1:A:122:VAL:HB	10	0.4
(1,1938)	1:A:118:ALA:HB3	1:A:122:VAL:HB	10	0.4
(1,1924)	1:A:65:GLU:HB3	1:A:67:VAL:HG21	4	0.4
(1,1924)	1:A:65:GLU:HB3	1:A:67:VAL:HG22	4	0.4
(1,1924)	1:A:65:GLU:HB3	1:A:67:VAL:HG23	4	0.4
(1,1923)	1:A:67:VAL:HG21	1:A:65:GLU:HB2	2	0.4
(1,1923)	1:A:67:VAL:HG22	1:A:65:GLU:HB2	2	0.4
(1,1923)	1:A:67:VAL:HG23	1:A:65:GLU:HB2	2	0.4
(1,1817)	1:A:81:PHE:H	1:A:61:LEU:HD21	3	0.4
(1,1817)	1:A:81:PHE:H	1:A:61:LEU:HD22	3	0.4
(1,1817)	1:A:81:PHE:H	1:A:61:LEU:HD23	3	0.4
(1,1792)	1:A:72:GLY:H	1:A:75:ASN:HA	2	0.4
(1,1760)	1:A:77:ASN:HD21	1:A:76:MET:HB2	7	0.4
(1,1628)	1:A:12:LYS:HG2	1:A:126:TYR:HD1	1	0.4
(1,1628)	1:A:12:LYS:HG3	1:A:126:TYR:HD1	1	0.4
(1,1627)	1:A:12:LYS:HG2	1:A:126:TYR:HD1	1	0.4
(1,1627)	1:A:12:LYS:HG3	1:A:126:TYR:HD1	1	0.4
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD11	2	0.4
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD12	2	0.4
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD13	2	0.4
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD21	2	0.4
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD22	2	0.4
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD23	2	0.4
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD11	2	0.4
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD12	2	0.4
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD13	2	0.4
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD21	2	0.4
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD22	2	0.4
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD23	2	0.4
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD11	2	0.4
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD12	2	0.4
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD13	2	0.4
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD21	2	0.4
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD22	2	0.4
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD23	2	0.4
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD11	2	0.4
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD12	2	0.4
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD13	2	0.4
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD21	2	0.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD22	2	0.4
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD23	2	0.4
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD11	2	0.4
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD12	2	0.4
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD13	2	0.4
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD21	2	0.4
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD22	2	0.4
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD23	2	0.4
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD11	2	0.4
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD12	2	0.4
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD13	2	0.4
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD21	2	0.4
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD22	2	0.4
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD23	2	0.4
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD11	2	0.4
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD12	2	0.4
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD13	2	0.4
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD21	2	0.4
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD22	2	0.4
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD23	2	0.4
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD11	2	0.4
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD12	2	0.4
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD13	2	0.4
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD21	2	0.4
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD22	2	0.4
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD23	2	0.4
(1,123)	1:A:60:THR:H	1:A:59:SER:HB2	8	0.4
(1,123)	1:A:60:THR:H	1:A:59:SER:HB3	8	0.4
(3,63)	1:A:129:ARG:N	1:A:109:ASP:O	1	0.39
(3,19)	1:A:19:TYR:N	1:A:15:ASN:O	9	0.39
(2,6)	1:A:39:VAL:H	1:A:54:SER:H	4	0.39
(1,91)	1:A:8:TYR:H	1:A:43:ILE:HA	5	0.39
(1,88)	1:A:54:SER:H	1:A:39:VAL:H	4	0.39
(1,766)	1:A:124:LYS:HA	1:A:115:THR:H	2	0.39
(1,73)	1:A:30:ILE:H	1:A:32:LYS:H	5	0.39
(1,65)	1:A:34:ASN:H	1:A:31:LYS:HA	7	0.39
(1,599)	1:A:127:PHE:H	1:A:112:PHE:HA	2	0.39
(1,49)	1:A:23:LEU:H	1:A:21:ALA:HA	9	0.39
(1,48)	1:A:21:ALA:H	1:A:20:LEU:HA	5	0.39
(1,48)	1:A:21:ALA:H	1:A:20:LEU:HA	9	0.39
(1,428)	1:A:17:GLU:H	1:A:19:TYR:H	1	0.39
(1,4)	1:A:5:ALA:H	1:A:4:LEU:HA	4	0.39

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,376)	1:A:106:GLU:H	1:A:113:VAL:HB	4	0.39
(1,353)	1:A:6:GLY:H	1:A:5:ALA:HA	8	0.39
(1,23)	1:A:12:LYS:H	1:A:11:GLU:HA	4	0.39
(1,23)	1:A:12:LYS:H	1:A:11:GLU:HA	7	0.39
(1,223)	1:A:121:MET:H	1:A:118:ALA:H	8	0.39
(1,222)	1:A:120:ASP:H	1:A:118:ALA:HA	7	0.39
(1,22)	1:A:11:GLU:H	1:A:10:LEU:HG	1	0.39
(1,202)	1:A:111:GLY:H	1:A:110:LYS:HB2	4	0.39
(1,202)	1:A:111:GLY:H	1:A:110:LYS:HB3	4	0.39
(1,1953)	1:A:111:GLY:HA3	1:A:8:TYR:HD1	2	0.39
(1,1953)	1:A:111:GLY:HA3	1:A:8:TYR:HD2	2	0.39
(1,1938)	1:A:118:ALA:HB1	1:A:122:VAL:HB	6	0.39
(1,1938)	1:A:118:ALA:HB2	1:A:122:VAL:HB	6	0.39
(1,1938)	1:A:118:ALA:HB3	1:A:122:VAL:HB	6	0.39
(1,1922)	1:A:65:GLU:HG2	1:A:63:VAL:HG11	3	0.39
(1,1922)	1:A:65:GLU:HG2	1:A:63:VAL:HG12	3	0.39
(1,1922)	1:A:65:GLU:HG2	1:A:63:VAL:HG13	3	0.39
(1,1920)	1:A:42:ILE:HG13	1:A:44:VAL:HG11	6	0.39
(1,1920)	1:A:42:ILE:HG13	1:A:44:VAL:HG12	6	0.39
(1,1920)	1:A:42:ILE:HG13	1:A:44:VAL:HG13	6	0.39
(1,1885)	1:A:22:ALA:HB1	1:A:18:GLU:HB2	1	0.39
(1,1885)	1:A:22:ALA:HB2	1:A:18:GLU:HB2	1	0.39
(1,1885)	1:A:22:ALA:HB3	1:A:18:GLU:HB2	1	0.39
(1,125)	1:A:53:SER:H	1:A:60:THR:HA	4	0.39
(1,124)	1:A:53:SER:H	1:A:59:SER:H	7	0.39
(1,113)	1:A:59:SER:H	1:A:53:SER:H	7	0.39
(1,109)	1:A:53:SER:H	1:A:52:LYS:HG2	3	0.39
(1,109)	1:A:53:SER:H	1:A:52:LYS:HG3	3	0.39
(3,18)	1:A:124:LYS:H	1:A:14:GLU:O	8	0.38
(3,10)	1:A:10:LEU:H	1:A:40:TYR:O	9	0.38
(1,907)	1:A:25:VAL:H	1:A:23:LEU:HG	2	0.38
(1,75)	1:A:34:ASN:H	1:A:33:ALA:HA	3	0.38
(1,75)	1:A:34:ASN:H	1:A:33:ALA:HA	5	0.38
(1,747)	1:A:9:LYS:HB2	1:A:39:VAL:HG11	3	0.38
(1,747)	1:A:9:LYS:HB2	1:A:39:VAL:HG12	3	0.38
(1,747)	1:A:9:LYS:HB2	1:A:39:VAL:HG13	3	0.38
(1,747)	1:A:9:LYS:HB3	1:A:39:VAL:HG11	3	0.38
(1,747)	1:A:9:LYS:HB3	1:A:39:VAL:HG12	3	0.38
(1,747)	1:A:9:LYS:HB3	1:A:39:VAL:HG13	3	0.38
(1,732)	1:A:33:ALA:H	1:A:74:VAL:HG11	8	0.38
(1,732)	1:A:33:ALA:H	1:A:74:VAL:HG12	8	0.38
(1,732)	1:A:33:ALA:H	1:A:74:VAL:HG13	8	0.38

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,724)	1:A:17:GLU:H	1:A:20:LEU:HB2	6	0.38
(1,713)	1:A:51:PHE:H	1:A:61:LEU:HB2	10	0.38
(1,713)	1:A:51:PHE:H	1:A:61:LEU:HB3	10	0.38
(1,63)	1:A:32:LYS:H	1:A:31:LYS:HA	4	0.38
(1,63)	1:A:32:LYS:H	1:A:31:LYS:HA	9	0.38
(1,599)	1:A:127:PHE:H	1:A:112:PHE:HA	1	0.38
(1,599)	1:A:127:PHE:H	1:A:112:PHE:HA	10	0.38
(1,55)	1:A:24:GLY:H	1:A:23:LEU:HB2	8	0.38
(1,55)	1:A:24:GLY:H	1:A:23:LEU:HB3	8	0.38
(1,429)	1:A:22:ALA:H	1:A:20:LEU:HA	4	0.38
(1,429)	1:A:22:ALA:H	1:A:20:LEU:HA	7	0.38
(1,4)	1:A:5:ALA:H	1:A:4:LEU:HA	5	0.38
(1,4)	1:A:5:ALA:H	1:A:4:LEU:HA	6	0.38
(1,382)	1:A:36:PRO:HB2	1:A:10:LEU:HG	7	0.38
(1,371)	1:A:32:LYS:H	1:A:33:ALA:HB1	1	0.38
(1,371)	1:A:32:LYS:H	1:A:33:ALA:HB2	1	0.38
(1,371)	1:A:32:LYS:H	1:A:33:ALA:HB3	1	0.38
(1,23)	1:A:12:LYS:H	1:A:11:GLU:HA	3	0.38
(1,210)	1:A:127:PHE:H	1:A:113:VAL:HA	5	0.38
(1,1985)	1:A:10:LEU:HB2	1:A:38:VAL:HG21	10	0.38
(1,1985)	1:A:10:LEU:HB2	1:A:38:VAL:HG22	10	0.38
(1,1985)	1:A:10:LEU:HB2	1:A:38:VAL:HG23	10	0.38
(1,196)	1:A:106:GLU:H	1:A:105:TYR:HB2	4	0.38
(1,196)	1:A:106:GLU:H	1:A:105:TYR:HB3	4	0.38
(1,19)	1:A:128:ILE:H	1:A:10:LEU:HA	7	0.38
(1,1817)	1:A:81:PHE:H	1:A:61:LEU:HD21	1	0.38
(1,1817)	1:A:81:PHE:H	1:A:61:LEU:HD22	1	0.38
(1,1817)	1:A:81:PHE:H	1:A:61:LEU:HD23	1	0.38
(1,1817)	1:A:81:PHE:H	1:A:61:LEU:HD21	10	0.38
(1,1817)	1:A:81:PHE:H	1:A:61:LEU:HD22	10	0.38
(1,1817)	1:A:81:PHE:H	1:A:61:LEU:HD23	10	0.38
(1,1807)	1:A:122:VAL:H	1:A:15:ASN:HD21	10	0.38
(1,1799)	1:A:47:ASN:HD21	1:A:2:VAL:HB	6	0.38
(1,1792)	1:A:72:GLY:H	1:A:75:ASN:HA	1	0.38
(1,1792)	1:A:72:GLY:H	1:A:75:ASN:HA	4	0.38
(1,1757)	1:A:64:ASN:HD22	1:A:63:VAL:HB	1	0.38
(1,1718)	1:A:126:TYR:HB2	1:A:12:LYS:HG2	1	0.38
(1,1718)	1:A:126:TYR:HB2	1:A:12:LYS:HG3	1	0.38
(1,1718)	1:A:126:TYR:HB3	1:A:12:LYS:HG2	1	0.38
(1,1718)	1:A:126:TYR:HB3	1:A:12:LYS:HG3	1	0.38
(1,1717)	1:A:126:TYR:HB2	1:A:12:LYS:HG2	1	0.38
(1,1717)	1:A:126:TYR:HB2	1:A:12:LYS:HG3	1	0.38

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1717)	1:A:126:TYR:HB3	1:A:12:LYS:HG2	1	0.38
(1,1717)	1:A:126:TYR:HB3	1:A:12:LYS:HG3	1	0.38
(1,170)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:HG11	1	0.38
(1,170)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:HG12	1	0.38
(1,170)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:HG13	1	0.38
(1,170)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:HG21	1	0.38
(1,170)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:HG22	1	0.38
(1,170)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:HG23	1	0.38
(1,1631)	1:A:113:VAL:HG21	1:A:126:TYR:HE1	4	0.38
(1,1631)	1:A:113:VAL:HG22	1:A:126:TYR:HE1	4	0.38
(1,1631)	1:A:113:VAL:HG23	1:A:126:TYR:HE1	4	0.38
(1,1626)	1:A:12:LYS:HG2	1:A:126:TYR:HB2	1	0.38
(1,1626)	1:A:12:LYS:HG2	1:A:126:TYR:HB3	1	0.38
(1,1626)	1:A:12:LYS:HG3	1:A:126:TYR:HB2	1	0.38
(1,1626)	1:A:12:LYS:HG3	1:A:126:TYR:HB3	1	0.38
(1,1625)	1:A:12:LYS:HG2	1:A:126:TYR:HB2	1	0.38
(1,1625)	1:A:12:LYS:HG2	1:A:126:TYR:HB3	1	0.38
(1,1625)	1:A:12:LYS:HG3	1:A:126:TYR:HB2	1	0.38
(1,1625)	1:A:12:LYS:HG3	1:A:126:TYR:HB3	1	0.38
(1,159)	1:A:88:LYS:H	1:A:88:LYS:HE2	3	0.38
(1,159)	1:A:88:LYS:H	1:A:88:LYS:HE3	3	0.38
(1,1207)	1:A:76:MET:H	1:A:72:GLY:HA2	10	0.38
(1,1207)	1:A:76:MET:H	1:A:72:GLY:HA3	10	0.38
(1,732)	1:A:33:ALA:H	1:A:74:VAL:HG11	4	0.37
(1,732)	1:A:33:ALA:H	1:A:74:VAL:HG12	4	0.37
(1,732)	1:A:33:ALA:H	1:A:74:VAL:HG13	4	0.37
(1,727)	1:A:85:GLU:H	1:A:89:LEU:HG	5	0.37
(1,725)	1:A:29:SER:H	1:A:32:LYS:HG2	1	0.37
(1,723)	1:A:16:PHE:H	1:A:14:GLU:HB2	7	0.37
(1,667)	1:A:88:LYS:HA	1:A:106:GLU:HB2	1	0.37
(1,667)	1:A:88:LYS:HA	1:A:106:GLU:HB3	1	0.37
(1,646)	1:A:30:ILE:HG21	1:A:20:LEU:HD11	9	0.37
(1,646)	1:A:30:ILE:HG21	1:A:20:LEU:HD12	9	0.37
(1,646)	1:A:30:ILE:HG21	1:A:20:LEU:HD13	9	0.37
(1,646)	1:A:30:ILE:HG21	1:A:20:LEU:HD21	9	0.37
(1,646)	1:A:30:ILE:HG21	1:A:20:LEU:HD22	9	0.37
(1,646)	1:A:30:ILE:HG21	1:A:20:LEU:HD23	9	0.37
(1,646)	1:A:30:ILE:HG22	1:A:20:LEU:HD11	9	0.37
(1,646)	1:A:30:ILE:HG22	1:A:20:LEU:HD12	9	0.37
(1,646)	1:A:30:ILE:HG22	1:A:20:LEU:HD13	9	0.37
(1,646)	1:A:30:ILE:HG22	1:A:20:LEU:HD21	9	0.37
(1,646)	1:A:30:ILE:HG22	1:A:20:LEU:HD22	9	0.37

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,646)	1:A:30:ILE:HG22	1:A:20:LEU:HD23	9	0.37
(1,646)	1:A:30:ILE:HG23	1:A:20:LEU:HD11	9	0.37
(1,646)	1:A:30:ILE:HG23	1:A:20:LEU:HD12	9	0.37
(1,646)	1:A:30:ILE:HG23	1:A:20:LEU:HD13	9	0.37
(1,646)	1:A:30:ILE:HG23	1:A:20:LEU:HD21	9	0.37
(1,646)	1:A:30:ILE:HG23	1:A:20:LEU:HD22	9	0.37
(1,646)	1:A:30:ILE:HG23	1:A:20:LEU:HD23	9	0.37
(1,635)	1:A:129:ARG:H	1:A:128:ILE:HD11	8	0.37
(1,635)	1:A:129:ARG:H	1:A:128:ILE:HD12	8	0.37
(1,635)	1:A:129:ARG:H	1:A:128:ILE:HD13	8	0.37
(1,63)	1:A:32:LYS:H	1:A:31:LYS:HA	10	0.37
(1,49)	1:A:23:LEU:H	1:A:21:ALA:HA	6	0.37
(1,48)	1:A:21:ALA:H	1:A:20:LEU:HA	2	0.37
(1,428)	1:A:17:GLU:H	1:A:19:TYR:H	5	0.37
(1,4)	1:A:5:ALA:H	1:A:4:LEU:HA	8	0.37
(1,385)	1:A:33:ALA:HB1	1:A:25:VAL:HG11	1	0.37
(1,385)	1:A:33:ALA:HB1	1:A:25:VAL:HG12	1	0.37
(1,385)	1:A:33:ALA:HB1	1:A:25:VAL:HG13	1	0.37
(1,385)	1:A:33:ALA:HB2	1:A:25:VAL:HG11	1	0.37
(1,385)	1:A:33:ALA:HB2	1:A:25:VAL:HG12	1	0.37
(1,385)	1:A:33:ALA:HB2	1:A:25:VAL:HG13	1	0.37
(1,385)	1:A:33:ALA:HB3	1:A:25:VAL:HG11	1	0.37
(1,385)	1:A:33:ALA:HB3	1:A:25:VAL:HG12	1	0.37
(1,385)	1:A:33:ALA:HB3	1:A:25:VAL:HG13	1	0.37
(1,385)	1:A:33:ALA:HB1	1:A:25:VAL:HG11	5	0.37
(1,385)	1:A:33:ALA:HB1	1:A:25:VAL:HG12	5	0.37
(1,385)	1:A:33:ALA:HB1	1:A:25:VAL:HG13	5	0.37
(1,385)	1:A:33:ALA:HB2	1:A:25:VAL:HG11	5	0.37
(1,385)	1:A:33:ALA:HB2	1:A:25:VAL:HG12	5	0.37
(1,385)	1:A:33:ALA:HB2	1:A:25:VAL:HG13	5	0.37
(1,385)	1:A:33:ALA:HB3	1:A:25:VAL:HG11	5	0.37
(1,385)	1:A:33:ALA:HB3	1:A:25:VAL:HG12	5	0.37
(1,385)	1:A:33:ALA:HB3	1:A:25:VAL:HG13	5	0.37
(1,373)	1:A:76:MET:H	1:A:71:LEU:HD11	2	0.37
(1,373)	1:A:76:MET:H	1:A:71:LEU:HD12	2	0.37
(1,373)	1:A:76:MET:H	1:A:71:LEU:HD13	2	0.37
(1,373)	1:A:76:MET:H	1:A:71:LEU:HD11	7	0.37
(1,373)	1:A:76:MET:H	1:A:71:LEU:HD12	7	0.37
(1,373)	1:A:76:MET:H	1:A:71:LEU:HD13	7	0.37
(1,353)	1:A:6:GLY:H	1:A:5:ALA:HA	4	0.37
(1,353)	1:A:6:GLY:H	1:A:5:ALA:HA	5	0.37
(1,353)	1:A:6:GLY:H	1:A:5:ALA:HA	6	0.37

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,34)	1:A:124:LYS:H	1:A:14:GLU:HB2	6	0.37
(1,34)	1:A:124:LYS:H	1:A:14:GLU:HB3	6	0.37
(1,261)	1:A:112:PHE:H	1:A:128:ILE:HG12	9	0.37
(1,261)	1:A:112:PHE:H	1:A:128:ILE:HG13	9	0.37
(1,202)	1:A:111:GLY:H	1:A:110:LYS:HB2	7	0.37
(1,202)	1:A:111:GLY:H	1:A:110:LYS:HB3	7	0.37
(1,196)	1:A:106:GLU:H	1:A:105:TYR:HB2	3	0.37
(1,196)	1:A:106:GLU:H	1:A:105:TYR:HB3	3	0.37
(1,196)	1:A:106:GLU:H	1:A:105:TYR:HB2	5	0.37
(1,196)	1:A:106:GLU:H	1:A:105:TYR:HB3	5	0.37
(1,1816)	1:A:39:VAL:H	1:A:54:SER:HA	4	0.37
(1,1807)	1:A:122:VAL:H	1:A:15:ASN:HD21	2	0.37
(1,1753)	1:A:27:GLN:H	1:A:26:PRO:HD2	10	0.37
(1,1628)	1:A:12:LYS:HG2	1:A:126:TYR:HD1	2	0.37
(1,1628)	1:A:12:LYS:HG3	1:A:126:TYR:HD1	2	0.37
(1,1627)	1:A:12:LYS:HG2	1:A:126:TYR:HD1	2	0.37
(1,1627)	1:A:12:LYS:HG3	1:A:126:TYR:HD1	2	0.37
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD11	8	0.37
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD12	8	0.37
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD13	8	0.37
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD21	8	0.37
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD22	8	0.37
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD23	8	0.37
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD11	8	0.37
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD12	8	0.37
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD13	8	0.37
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD21	8	0.37
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD22	8	0.37
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD23	8	0.37
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD11	8	0.37
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD12	8	0.37
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD13	8	0.37
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD21	8	0.37
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD22	8	0.37
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD23	8	0.37
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD11	8	0.37
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD12	8	0.37
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD13	8	0.37
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD21	8	0.37
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD22	8	0.37
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD23	8	0.37
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD11	8	0.37

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD12	8	0.37
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD13	8	0.37
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD21	8	0.37
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD22	8	0.37
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD23	8	0.37
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD11	8	0.37
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD12	8	0.37
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD13	8	0.37
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD21	8	0.37
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD22	8	0.37
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD23	8	0.37
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD11	8	0.37
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD12	8	0.37
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD13	8	0.37
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD21	8	0.37
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD22	8	0.37
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD23	8	0.37
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD11	8	0.37
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD12	8	0.37
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD13	8	0.37
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD21	8	0.37
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD22	8	0.37
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD23	8	0.37
(1,1219)	1:A:76:MET:H	1:A:75:ASN:HD21	3	0.37
(1,1219)	1:A:76:MET:H	1:A:75:ASN:HD22	3	0.37
(1,109)	1:A:53:SER:H	1:A:52:LYS:HG2	7	0.37
(1,109)	1:A:53:SER:H	1:A:52:LYS:HG3	7	0.37
(1,1049)	1:A:48:LYS:H	1:A:44:VAL:HG11	5	0.37
(1,1049)	1:A:48:LYS:H	1:A:44:VAL:HG12	5	0.37
(1,1049)	1:A:48:LYS:H	1:A:44:VAL:HG13	5	0.37
(1,1049)	1:A:48:LYS:H	1:A:44:VAL:HG21	5	0.37
(1,1049)	1:A:48:LYS:H	1:A:44:VAL:HG22	5	0.37
(1,1049)	1:A:48:LYS:H	1:A:44:VAL:HG23	5	0.37
(3,34)	1:A:48:LYS:H	1:A:45:ASN:O	6	0.36
(1,972)	1:A:35:SER:H	1:A:31:LYS:HB2	10	0.36
(1,972)	1:A:35:SER:H	1:A:31:LYS:HB3	10	0.36
(1,75)	1:A:34:ASN:H	1:A:33:ALA:HA	1	0.36
(1,723)	1:A:16:PHE:H	1:A:14:GLU:HB2	8	0.36
(1,710)	1:A:51:PHE:HB2	1:A:61:LEU:HB2	2	0.36
(1,710)	1:A:51:PHE:HB2	1:A:61:LEU:HB3	2	0.36
(1,710)	1:A:51:PHE:HB3	1:A:61:LEU:HB2	2	0.36
(1,710)	1:A:51:PHE:HB3	1:A:61:LEU:HB3	2	0.36

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,63)	1:A:32:LYS:H	1:A:31:LYS:HA	7	0.36
(1,599)	1:A:127:PHE:H	1:A:112:PHE:HA	7	0.36
(1,429)	1:A:22:ALA:H	1:A:20:LEU:HA	6	0.36
(1,4)	1:A:5:ALA:H	1:A:4:LEU:HA	2	0.36
(1,34)	1:A:124:LYS:H	1:A:14:GLU:HB2	3	0.36
(1,34)	1:A:124:LYS:H	1:A:14:GLU:HB3	3	0.36
(1,286)	1:A:23:LEU:HG	1:A:95:LEU:HG	7	0.36
(1,273)	1:A:50:THR:HB	1:A:43:ILE:HG12	7	0.36
(1,273)	1:A:50:THR:HB	1:A:43:ILE:HG13	7	0.36
(1,272)	1:A:50:THR:HB	1:A:43:ILE:HG12	7	0.36
(1,272)	1:A:50:THR:HB	1:A:43:ILE:HG13	7	0.36
(1,240)	1:A:124:LYS:H	1:A:124:LYS:HD2	10	0.36
(1,240)	1:A:124:LYS:H	1:A:124:LYS:HD3	10	0.36
(1,24)	1:A:128:ILE:H	1:A:11:GLU:HB2	1	0.36
(1,24)	1:A:128:ILE:H	1:A:11:GLU:HB3	1	0.36
(1,217)	1:A:116:MET:H	1:A:115:THR:HG21	10	0.36
(1,217)	1:A:116:MET:H	1:A:115:THR:HG22	10	0.36
(1,217)	1:A:116:MET:H	1:A:115:THR:HG23	10	0.36
(1,2017)	1:A:63:VAL:HG11	1:A:89:LEU:HA	3	0.36
(1,2017)	1:A:63:VAL:HG12	1:A:89:LEU:HA	3	0.36
(1,2017)	1:A:63:VAL:HG13	1:A:89:LEU:HA	3	0.36
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD11	1:A:83:LYS:HE2	8	0.36
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD11	1:A:83:LYS:HE3	8	0.36
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD12	1:A:83:LYS:HE2	8	0.36
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD12	1:A:83:LYS:HE3	8	0.36
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD13	1:A:83:LYS:HE2	8	0.36
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD13	1:A:83:LYS:HE3	8	0.36
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD21	1:A:83:LYS:HE2	8	0.36
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD21	1:A:83:LYS:HE3	8	0.36
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD22	1:A:83:LYS:HE2	8	0.36
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD22	1:A:83:LYS:HE3	8	0.36
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD23	1:A:83:LYS:HE2	8	0.36
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD23	1:A:83:LYS:HE3	8	0.36
(1,1976)	1:A:75:ASN:HB2	1:A:25:VAL:HG11	7	0.36
(1,1976)	1:A:75:ASN:HB2	1:A:25:VAL:HG12	7	0.36
(1,1976)	1:A:75:ASN:HB2	1:A:25:VAL:HG13	7	0.36
(1,1973)	1:A:121:MET:HB2	1:A:18:GLU:HG3	6	0.36
(1,1755)	1:A:60:THR:H	1:A:61:LEU:HG	9	0.36
(1,170)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:HG11	3	0.36
(1,170)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:HG12	3	0.36
(1,170)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:HG13	3	0.36
(1,170)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:HG21	3	0.36

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,170)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:HG22	3	0.36
(1,170)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:HG23	3	0.36
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD11	3	0.36
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD12	3	0.36
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD13	3	0.36
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD21	3	0.36
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD22	3	0.36
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD23	3	0.36
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD11	3	0.36
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD12	3	0.36
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD13	3	0.36
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD21	3	0.36
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD22	3	0.36
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD23	3	0.36
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD11	3	0.36
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD12	3	0.36
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD13	3	0.36
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD21	3	0.36
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD22	3	0.36
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD23	3	0.36
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD11	3	0.36
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD12	3	0.36
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD13	3	0.36
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD21	3	0.36
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD22	3	0.36
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD23	3	0.36
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD11	3	0.36
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD12	3	0.36
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD13	3	0.36
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD21	3	0.36
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD22	3	0.36
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD23	3	0.36
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD11	3	0.36
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD12	3	0.36
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD13	3	0.36
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD21	3	0.36
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD22	3	0.36
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD23	3	0.36
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD11	3	0.36
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD12	3	0.36
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD13	3	0.36
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD21	3	0.36

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD22	3	0.36
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD23	3	0.36
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD11	3	0.36
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD12	3	0.36
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD13	3	0.36
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD21	3	0.36
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD22	3	0.36
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD23	3	0.36
(1,1249)	1:A:94:GLU:H	1:A:78:ILE:HG21	3	0.36
(1,1249)	1:A:94:GLU:H	1:A:78:ILE:HG22	3	0.36
(1,1249)	1:A:94:GLU:H	1:A:78:ILE:HG23	3	0.36
(1,12)	1:A:130:THR:H	1:A:8:TYR:HA	2	0.36
(1,99)	1:A:45:ASN:H	1:A:48:LYS:HB2	8	0.35
(1,99)	1:A:45:ASN:H	1:A:48:LYS:HB3	8	0.35
(1,725)	1:A:29:SER:H	1:A:32:LYS:HG2	3	0.35
(1,723)	1:A:16:PHE:H	1:A:14:GLU:HB2	5	0.35
(1,713)	1:A:51:PHE:H	1:A:61:LEU:HB2	1	0.35
(1,713)	1:A:51:PHE:H	1:A:61:LEU:HB3	1	0.35
(1,713)	1:A:51:PHE:H	1:A:61:LEU:HB2	8	0.35
(1,713)	1:A:51:PHE:H	1:A:61:LEU:HB3	8	0.35
(1,70)	1:A:33:ALA:H	1:A:32:LYS:HA	3	0.35
(1,614)	1:A:121:MET:H	1:A:118:ALA:HA	1	0.35
(1,430)	1:A:24:GLY:H	1:A:20:LEU:HA	9	0.35
(1,429)	1:A:22:ALA:H	1:A:20:LEU:HA	1	0.35
(1,4)	1:A:5:ALA:H	1:A:4:LEU:HA	1	0.35
(1,4)	1:A:5:ALA:H	1:A:4:LEU:HA	3	0.35
(1,39)	1:A:17:GLU:H	1:A:15:ASN:H	5	0.35
(1,39)	1:A:17:GLU:H	1:A:15:ASN:H	8	0.35
(1,370)	1:A:5:ALA:H	1:A:4:LEU:HD21	10	0.35
(1,370)	1:A:5:ALA:H	1:A:4:LEU:HD22	10	0.35
(1,370)	1:A:5:ALA:H	1:A:4:LEU:HD23	10	0.35
(1,281)	1:A:84:LEU:HA	1:A:89:LEU:HB2	6	0.35
(1,281)	1:A:84:LEU:HA	1:A:89:LEU:HB3	6	0.35
(1,281)	1:A:84:LEU:HA	1:A:89:LEU:HB2	7	0.35
(1,281)	1:A:84:LEU:HA	1:A:89:LEU:HB3	7	0.35
(1,253)	1:A:112:PHE:H	1:A:127:PHE:HB2	1	0.35
(1,253)	1:A:112:PHE:H	1:A:127:PHE:HB3	1	0.35
(1,246)	1:A:125:ARG:H	1:A:125:ARG:HG2	2	0.35
(1,246)	1:A:125:ARG:H	1:A:125:ARG:HG3	2	0.35
(1,240)	1:A:124:LYS:H	1:A:124:LYS:HD2	3	0.35
(1,240)	1:A:124:LYS:H	1:A:124:LYS:HD3	3	0.35
(1,24)	1:A:128:ILE:H	1:A:11:GLU:HB2	10	0.35

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,24)	1:A:128:ILE:H	1:A:11:GLU:HB3	10	0.35
(1,230)	1:A:123:ALA:H	1:A:122:VAL:HG11	8	0.35
(1,230)	1:A:123:ALA:H	1:A:122:VAL:HG12	8	0.35
(1,230)	1:A:123:ALA:H	1:A:122:VAL:HG13	8	0.35
(1,230)	1:A:123:ALA:H	1:A:122:VAL:HG21	8	0.35
(1,230)	1:A:123:ALA:H	1:A:122:VAL:HG22	8	0.35
(1,230)	1:A:123:ALA:H	1:A:122:VAL:HG23	8	0.35
(1,229)	1:A:123:ALA:H	1:A:122:VAL:HG11	8	0.35
(1,229)	1:A:123:ALA:H	1:A:122:VAL:HG12	8	0.35
(1,229)	1:A:123:ALA:H	1:A:122:VAL:HG13	8	0.35
(1,229)	1:A:123:ALA:H	1:A:122:VAL:HG21	8	0.35
(1,229)	1:A:123:ALA:H	1:A:122:VAL:HG22	8	0.35
(1,229)	1:A:123:ALA:H	1:A:122:VAL:HG23	8	0.35
(1,228)	1:A:123:ALA:H	1:A:122:VAL:HB	7	0.35
(1,220)	1:A:123:ALA:H	1:A:117:CYS:HA	10	0.35
(1,219)	1:A:104:THR:H	1:A:116:MET:HA	7	0.35
(1,219)	1:A:104:THR:H	1:A:116:MET:HA	8	0.35
(1,2055)	1:A:14:GLU:HB2	1:A:126:TYR:HE1	7	0.35
(1,2044)	1:A:122:VAL:HG21	1:A:117:CYS:HB2	6	0.35
(1,2044)	1:A:122:VAL:HG22	1:A:117:CYS:HB2	6	0.35
(1,2044)	1:A:122:VAL:HG23	1:A:117:CYS:HB2	6	0.35
(1,202)	1:A:111:GLY:H	1:A:110:LYS:HB2	5	0.35
(1,202)	1:A:111:GLY:H	1:A:110:LYS:HB3	5	0.35
(1,202)	1:A:111:GLY:H	1:A:110:LYS:HB2	8	0.35
(1,202)	1:A:111:GLY:H	1:A:110:LYS:HB3	8	0.35
(1,2019)	1:A:63:VAL:HG21	1:A:89:LEU:HB2	3	0.35
(1,2019)	1:A:63:VAL:HG22	1:A:89:LEU:HB2	3	0.35
(1,2019)	1:A:63:VAL:HG23	1:A:89:LEU:HB2	3	0.35
(1,1989)	1:A:39:VAL:HG21	1:A:54:SER:HA	7	0.35
(1,1989)	1:A:39:VAL:HG22	1:A:54:SER:HA	7	0.35
(1,1989)	1:A:39:VAL:HG23	1:A:54:SER:HA	7	0.35
(1,1978)	1:A:74:VAL:HG21	1:A:29:SER:HB3	6	0.35
(1,1978)	1:A:74:VAL:HG22	1:A:29:SER:HB3	6	0.35
(1,1978)	1:A:74:VAL:HG23	1:A:29:SER:HB3	6	0.35
(1,1973)	1:A:121:MET:HB2	1:A:18:GLU:HG3	10	0.35
(1,1949)	1:A:87:SER:HA	1:A:4:LEU:HD21	7	0.35
(1,1949)	1:A:87:SER:HA	1:A:4:LEU:HD22	7	0.35
(1,1949)	1:A:87:SER:HA	1:A:4:LEU:HD23	7	0.35
(1,157)	1:A:85:GLU:H	1:A:86:GLY:H	8	0.35
(1,145)	1:A:94:GLU:H	1:A:79:LYS:H	6	0.35
(3,21)	1:A:20:LEU:N	1:A:16:PHE:O	4	0.34
(2,3)	1:A:59:SER:H	1:A:54:SER:HA	10	0.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,764)	1:A:12:LYS:HE2	1:A:126:TYR:HE1	7	0.34
(1,764)	1:A:12:LYS:HE3	1:A:126:TYR:HE1	7	0.34
(1,75)	1:A:34:ASN:H	1:A:33:ALA:HA	2	0.34
(1,75)	1:A:34:ASN:H	1:A:33:ALA:HA	6	0.34
(1,75)	1:A:34:ASN:H	1:A:33:ALA:HA	10	0.34
(1,727)	1:A:85:GLU:H	1:A:89:LEU:HG	7	0.34
(1,723)	1:A:16:PHE:H	1:A:14:GLU:HB2	3	0.34
(1,667)	1:A:88:LYS:HA	1:A:106:GLU:HB2	10	0.34
(1,667)	1:A:88:LYS:HA	1:A:106:GLU:HB3	10	0.34
(1,552)	1:A:83:LYS:H	1:A:83:LYS:HE2	6	0.34
(1,552)	1:A:83:LYS:H	1:A:83:LYS:HE3	6	0.34
(1,551)	1:A:83:LYS:H	1:A:83:LYS:HD2	1	0.34
(1,551)	1:A:83:LYS:H	1:A:83:LYS:HD3	1	0.34
(1,429)	1:A:22:ALA:H	1:A:20:LEU:HA	9	0.34
(1,390)	1:A:106:GLU:HA	1:A:88:LYS:HB3	8	0.34
(1,386)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:28:ASP:HA	5	0.34
(1,386)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:28:ASP:HA	5	0.34
(1,385)	1:A:33:ALA:HB1	1:A:25:VAL:HG11	9	0.34
(1,385)	1:A:33:ALA:HB1	1:A:25:VAL:HG12	9	0.34
(1,385)	1:A:33:ALA:HB1	1:A:25:VAL:HG13	9	0.34
(1,385)	1:A:33:ALA:HB2	1:A:25:VAL:HG11	9	0.34
(1,385)	1:A:33:ALA:HB2	1:A:25:VAL:HG12	9	0.34
(1,385)	1:A:33:ALA:HB2	1:A:25:VAL:HG13	9	0.34
(1,385)	1:A:33:ALA:HB3	1:A:25:VAL:HG11	9	0.34
(1,385)	1:A:33:ALA:HB3	1:A:25:VAL:HG12	9	0.34
(1,385)	1:A:33:ALA:HB3	1:A:25:VAL:HG13	9	0.34
(1,289)	1:A:92:ASN:HA	1:A:102:THR:HG21	5	0.34
(1,289)	1:A:92:ASN:HA	1:A:102:THR:HG22	5	0.34
(1,289)	1:A:92:ASN:HA	1:A:102:THR:HG23	5	0.34
(1,276)	1:A:25:VAL:HG11	1:A:74:VAL:HB	9	0.34
(1,276)	1:A:25:VAL:HG12	1:A:74:VAL:HB	9	0.34
(1,276)	1:A:25:VAL:HG13	1:A:74:VAL:HB	9	0.34
(1,276)	1:A:25:VAL:HG21	1:A:74:VAL:HB	9	0.34
(1,276)	1:A:25:VAL:HG22	1:A:74:VAL:HB	9	0.34
(1,276)	1:A:25:VAL:HG23	1:A:74:VAL:HB	9	0.34
(1,269)	1:A:28:ASP:HA	1:A:31:LYS:HB2	5	0.34
(1,269)	1:A:28:ASP:HA	1:A:31:LYS:HB3	5	0.34
(1,268)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:28:ASP:HA	5	0.34
(1,268)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:28:ASP:HA	5	0.34
(1,267)	1:A:74:VAL:HB	1:A:25:VAL:HG11	9	0.34
(1,267)	1:A:74:VAL:HB	1:A:25:VAL:HG12	9	0.34
(1,267)	1:A:74:VAL:HB	1:A:25:VAL:HG13	9	0.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,267)	1:A:74:VAL:HB	1:A:25:VAL:HG21	9	0.34
(1,267)	1:A:74:VAL:HB	1:A:25:VAL:HG22	9	0.34
(1,267)	1:A:74:VAL:HB	1:A:25:VAL:HG23	9	0.34
(1,2044)	1:A:122:VAL:HG21	1:A:117:CYS:HB2	10	0.34
(1,2044)	1:A:122:VAL:HG22	1:A:117:CYS:HB2	10	0.34
(1,2044)	1:A:122:VAL:HG23	1:A:117:CYS:HB2	10	0.34
(1,1989)	1:A:39:VAL:HG21	1:A:54:SER:HA	4	0.34
(1,1989)	1:A:39:VAL:HG22	1:A:54:SER:HA	4	0.34
(1,1989)	1:A:39:VAL:HG23	1:A:54:SER:HA	4	0.34
(1,1947)	1:A:47:ASN:HA	1:A:2:VAL:HG21	6	0.34
(1,1947)	1:A:47:ASN:HA	1:A:2:VAL:HG22	6	0.34
(1,1947)	1:A:47:ASN:HA	1:A:2:VAL:HG23	6	0.34
(1,1885)	1:A:22:ALA:HB1	1:A:18:GLU:HB2	7	0.34
(1,1885)	1:A:22:ALA:HB2	1:A:18:GLU:HB2	7	0.34
(1,1885)	1:A:22:ALA:HB3	1:A:18:GLU:HB2	7	0.34
(1,186)	1:A:102:THR:H	1:A:102:THR:HG21	5	0.34
(1,186)	1:A:102:THR:H	1:A:102:THR:HG22	5	0.34
(1,186)	1:A:102:THR:H	1:A:102:THR:HG23	5	0.34
(1,181)	1:A:95:LEU:H	1:A:96:PRO:HD2	3	0.34
(1,181)	1:A:95:LEU:H	1:A:96:PRO:HD3	3	0.34
(1,1790)	1:A:45:ASN:HD21	1:A:48:LYS:HD2	9	0.34
(1,1790)	1:A:45:ASN:HD21	1:A:48:LYS:HD3	9	0.34
(1,1760)	1:A:77:ASN:HD21	1:A:76:MET:HB2	4	0.34
(1,1760)	1:A:77:ASN:HD21	1:A:76:MET:HB2	8	0.34
(1,1718)	1:A:126:TYR:HB2	1:A:12:LYS:HG2	2	0.34
(1,1718)	1:A:126:TYR:HB2	1:A:12:LYS:HG3	2	0.34
(1,1718)	1:A:126:TYR:HB3	1:A:12:LYS:HG2	2	0.34
(1,1718)	1:A:126:TYR:HB3	1:A:12:LYS:HG3	2	0.34
(1,1717)	1:A:126:TYR:HB2	1:A:12:LYS:HG2	2	0.34
(1,1717)	1:A:126:TYR:HB2	1:A:12:LYS:HG3	2	0.34
(1,1717)	1:A:126:TYR:HB3	1:A:12:LYS:HG2	2	0.34
(1,1717)	1:A:126:TYR:HB3	1:A:12:LYS:HG3	2	0.34
(1,165)	1:A:83:LYS:H	1:A:91:VAL:HA	5	0.34
(1,1626)	1:A:12:LYS:HG2	1:A:126:TYR:HB2	2	0.34
(1,1626)	1:A:12:LYS:HG2	1:A:126:TYR:HB3	2	0.34
(1,1626)	1:A:12:LYS:HG3	1:A:126:TYR:HB2	2	0.34
(1,1626)	1:A:12:LYS:HG3	1:A:126:TYR:HB3	2	0.34
(1,1625)	1:A:12:LYS:HG2	1:A:126:TYR:HB2	2	0.34
(1,1625)	1:A:12:LYS:HG2	1:A:126:TYR:HB3	2	0.34
(1,1625)	1:A:12:LYS:HG3	1:A:126:TYR:HB2	2	0.34
(1,1625)	1:A:12:LYS:HG3	1:A:126:TYR:HB3	2	0.34
(1,1456)	1:A:104:THR:H	1:A:114:LEU:HD11	10	0.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1456)	1:A:104:THR:H	1:A:114:LEU:HD12	10	0.34
(1,1456)	1:A:104:THR:H	1:A:114:LEU:HD13	10	0.34
(1,1456)	1:A:104:THR:H	1:A:114:LEU:HD21	10	0.34
(1,1456)	1:A:104:THR:H	1:A:114:LEU:HD22	10	0.34
(1,1456)	1:A:104:THR:H	1:A:114:LEU:HD23	10	0.34
(1,139)	1:A:33:ALA:H	1:A:73:THR:HB	7	0.34
(1,1322)	1:A:105:TYR:H	1:A:89:LEU:HG	1	0.34
(1,132)	1:A:63:VAL:H	1:A:62:ILE:HG21	3	0.34
(1,132)	1:A:63:VAL:H	1:A:62:ILE:HG22	3	0.34
(1,132)	1:A:63:VAL:H	1:A:62:ILE:HG23	3	0.34
(1,12)	1:A:130:THR:H	1:A:8:TYR:HA	5	0.34
(1,1053)	1:A:48:LYS:H	1:A:45:ASN:HA	6	0.34
(3,9)	1:A:10:LEU:N	1:A:40:TYR:O	7	0.33
(1,713)	1:A:51:PHE:H	1:A:61:LEU:HB2	4	0.33
(1,713)	1:A:51:PHE:H	1:A:61:LEU:HB3	4	0.33
(1,710)	1:A:51:PHE:HB2	1:A:61:LEU:HB2	9	0.33
(1,710)	1:A:51:PHE:HB2	1:A:61:LEU:HB3	9	0.33
(1,710)	1:A:51:PHE:HB3	1:A:61:LEU:HB2	9	0.33
(1,710)	1:A:51:PHE:HB3	1:A:61:LEU:HB3	9	0.33
(1,648)	1:A:50:THR:HB	1:A:43:ILE:HB	2	0.33
(1,634)	1:A:112:PHE:H	1:A:128:ILE:HD11	10	0.33
(1,634)	1:A:112:PHE:H	1:A:128:ILE:HD12	10	0.33
(1,634)	1:A:112:PHE:H	1:A:128:ILE:HD13	10	0.33
(1,599)	1:A:127:PHE:H	1:A:112:PHE:HA	4	0.33
(1,599)	1:A:127:PHE:H	1:A:112:PHE:HA	8	0.33
(1,594)	1:A:93:SER:H	1:A:101:GLY:H	3	0.33
(1,493)	1:A:56:GLY:H	1:A:57:MET:HB2	7	0.33
(1,493)	1:A:56:GLY:H	1:A:57:MET:HB3	7	0.33
(1,48)	1:A:21:ALA:H	1:A:20:LEU:HA	8	0.33
(1,441)	1:A:29:SER:H	1:A:27:GLN:HA	1	0.33
(1,42)	1:A:19:TYR:H	1:A:18:GLU:HA	3	0.33
(1,418)	1:A:19:TYR:H	1:A:17:GLU:HA	4	0.33
(1,369)	1:A:3:GLN:H	1:A:2:VAL:HG11	4	0.33
(1,369)	1:A:3:GLN:H	1:A:2:VAL:HG12	4	0.33
(1,369)	1:A:3:GLN:H	1:A:2:VAL:HG13	4	0.33
(1,351)	1:A:88:LYS:H	1:A:85:GLU:H	5	0.33
(1,275)	1:A:77:ASN:HB2	1:A:70:VAL:HA	10	0.33
(1,275)	1:A:77:ASN:HB3	1:A:70:VAL:HA	10	0.33
(1,261)	1:A:112:PHE:H	1:A:128:ILE:HG12	2	0.33
(1,261)	1:A:112:PHE:H	1:A:128:ILE:HG13	2	0.33
(1,223)	1:A:121:MET:H	1:A:118:ALA:H	5	0.33
(1,2059)	1:A:11:GLU:HA	1:A:127:PHE:HA	10	0.33

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1992)	1:A:80:SER:HB2	1:A:61:LEU:HB3	5	0.33
(1,1992)	1:A:80:SER:HB3	1:A:61:LEU:HB3	5	0.33
(1,1970)	1:A:124:LYS:HG3	1:A:14:GLU:HB3	7	0.33
(1,1965)	1:A:114:LEU:HD21	1:A:13:ASN:HB2	9	0.33
(1,1965)	1:A:114:LEU:HD22	1:A:13:ASN:HB2	9	0.33
(1,1965)	1:A:114:LEU:HD23	1:A:13:ASN:HB2	9	0.33
(1,1933)	1:A:97:ASP:HB3	1:A:95:LEU:HD11	9	0.33
(1,1933)	1:A:97:ASP:HB3	1:A:95:LEU:HD12	9	0.33
(1,1933)	1:A:97:ASP:HB3	1:A:95:LEU:HD13	9	0.33
(1,1928)	1:A:84:LEU:HD21	1:A:88:LYS:HG2	10	0.33
(1,1928)	1:A:84:LEU:HD21	1:A:88:LYS:HG3	10	0.33
(1,1928)	1:A:84:LEU:HD22	1:A:88:LYS:HG2	10	0.33
(1,1928)	1:A:84:LEU:HD22	1:A:88:LYS:HG3	10	0.33
(1,1928)	1:A:84:LEU:HD23	1:A:88:LYS:HG2	10	0.33
(1,1928)	1:A:84:LEU:HD23	1:A:88:LYS:HG3	10	0.33
(1,1927)	1:A:88:LYS:HG2	1:A:84:LEU:HD21	10	0.33
(1,1927)	1:A:88:LYS:HG2	1:A:84:LEU:HD22	10	0.33
(1,1927)	1:A:88:LYS:HG2	1:A:84:LEU:HD23	10	0.33
(1,1927)	1:A:88:LYS:HG3	1:A:84:LEU:HD21	10	0.33
(1,1927)	1:A:88:LYS:HG3	1:A:84:LEU:HD22	10	0.33
(1,1927)	1:A:88:LYS:HG3	1:A:84:LEU:HD23	10	0.33
(1,1922)	1:A:65:GLU:HG2	1:A:63:VAL:HG11	5	0.33
(1,1922)	1:A:65:GLU:HG2	1:A:63:VAL:HG12	5	0.33
(1,1922)	1:A:65:GLU:HG2	1:A:63:VAL:HG13	5	0.33
(1,1785)	1:A:27:GLN:HE22	1:A:31:LYS:HD2	4	0.33
(1,1785)	1:A:27:GLN:HE22	1:A:31:LYS:HD3	4	0.33
(1,1769)	1:A:13:ASN:H	1:A:10:LEU:HD11	8	0.33
(1,1769)	1:A:13:ASN:H	1:A:10:LEU:HD12	8	0.33
(1,1769)	1:A:13:ASN:H	1:A:10:LEU:HD13	8	0.33
(1,1757)	1:A:64:ASN:HD22	1:A:63:VAL:HB	5	0.33
(1,1639)	1:A:7:THR:H	1:A:130:THR:H	9	0.33
(1,1638)	1:A:130:THR:H	1:A:7:THR:H	9	0.33
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD11	7	0.33
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD12	7	0.33
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD13	7	0.33
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD21	7	0.33
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD22	7	0.33
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD23	7	0.33
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD11	7	0.33
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD12	7	0.33
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD13	7	0.33
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD21	7	0.33

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD22	7	0.33
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD23	7	0.33
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD11	7	0.33
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD12	7	0.33
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD13	7	0.33
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD21	7	0.33
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD22	7	0.33
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD23	7	0.33
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD11	7	0.33
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD12	7	0.33
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD13	7	0.33
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD21	7	0.33
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD22	7	0.33
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD23	7	0.33
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD11	7	0.33
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD12	7	0.33
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD13	7	0.33
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD21	7	0.33
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD22	7	0.33
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD23	7	0.33
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD11	7	0.33
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD12	7	0.33
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD13	7	0.33
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD21	7	0.33
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD22	7	0.33
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD23	7	0.33
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD11	7	0.33
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD12	7	0.33
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD13	7	0.33
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD21	7	0.33
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD22	7	0.33
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD23	7	0.33
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD11	7	0.33
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD12	7	0.33
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD13	7	0.33
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD21	7	0.33
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD22	7	0.33
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD23	7	0.33
(1,1527)	1:A:47:ASN:HA	1:A:2:VAL:HB	2	0.33
(1,126)	1:A:60:THR:H	1:A:60:THR:HB	6	0.33
(1,125)	1:A:53:SER:H	1:A:60:THR:HA	6	0.33
(1,1249)	1:A:94:GLU:H	1:A:78:ILE:HG21	7	0.33

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1249)	1:A:94:GLU:H	1:A:78:ILE:HG22	7	0.33
(1,1249)	1:A:94:GLU:H	1:A:78:ILE:HG23	7	0.33
(1,1249)	1:A:94:GLU:H	1:A:78:ILE:HG21	9	0.33
(1,1249)	1:A:94:GLU:H	1:A:78:ILE:HG22	9	0.33
(1,1249)	1:A:94:GLU:H	1:A:78:ILE:HG23	9	0.33
(1,109)	1:A:53:SER:H	1:A:52:LYS:HG2	9	0.33
(1,109)	1:A:53:SER:H	1:A:52:LYS:HG3	9	0.33
(1,10)	1:A:8:TYR:H	1:A:7:THR:HG21	1	0.33
(1,10)	1:A:8:TYR:H	1:A:7:THR:HG22	1	0.33
(1,10)	1:A:8:TYR:H	1:A:7:THR:HG23	1	0.33
(3,34)	1:A:48:LYS:H	1:A:45:ASN:O	1	0.32
(2,3)	1:A:59:SER:H	1:A:54:SER:HA	6	0.32
(1,91)	1:A:8:TYR:H	1:A:43:ILE:HA	3	0.32
(1,75)	1:A:34:ASN:H	1:A:33:ALA:HA	4	0.32
(1,724)	1:A:17:GLU:H	1:A:20:LEU:HB2	9	0.32
(1,63)	1:A:32:LYS:H	1:A:31:LYS:HA	5	0.32
(1,4)	1:A:5:ALA:H	1:A:4:LEU:HA	10	0.32
(1,39)	1:A:17:GLU:H	1:A:15:ASN:H	3	0.32
(1,37)	1:A:16:PHE:H	1:A:15:ASN:HB2	2	0.32
(1,37)	1:A:16:PHE:H	1:A:15:ASN:HB3	2	0.32
(1,34)	1:A:124:LYS:H	1:A:14:GLU:HB2	5	0.32
(1,34)	1:A:124:LYS:H	1:A:14:GLU:HB3	5	0.32
(1,223)	1:A:121:MET:H	1:A:118:ALA:H	1	0.32
(1,220)	1:A:123:ALA:H	1:A:117:CYS:HA	4	0.32
(1,210)	1:A:127:PHE:H	1:A:113:VAL:HA	3	0.32
(1,210)	1:A:127:PHE:H	1:A:113:VAL:HA	8	0.32
(1,2028)	1:A:91:VAL:HA	1:A:103:ARG:HB2	9	0.32
(1,1989)	1:A:39:VAL:HG21	1:A:54:SER:HA	2	0.32
(1,1989)	1:A:39:VAL:HG22	1:A:54:SER:HA	2	0.32
(1,1989)	1:A:39:VAL:HG23	1:A:54:SER:HA	2	0.32
(1,1957)	1:A:114:LEU:HD21	1:A:10:LEU:HA	7	0.32
(1,1957)	1:A:114:LEU:HD22	1:A:10:LEU:HA	7	0.32
(1,1957)	1:A:114:LEU:HD23	1:A:10:LEU:HA	7	0.32
(1,1942)	1:A:124:LYS:HB3	1:A:126:TYR:HE1	3	0.32
(1,1933)	1:A:97:ASP:HB3	1:A:95:LEU:HD11	8	0.32
(1,1933)	1:A:97:ASP:HB3	1:A:95:LEU:HD12	8	0.32
(1,1933)	1:A:97:ASP:HB3	1:A:95:LEU:HD13	8	0.32
(1,1928)	1:A:84:LEU:HD21	1:A:88:LYS:HG2	1	0.32
(1,1928)	1:A:84:LEU:HD21	1:A:88:LYS:HG3	1	0.32
(1,1928)	1:A:84:LEU:HD22	1:A:88:LYS:HG2	1	0.32
(1,1928)	1:A:84:LEU:HD22	1:A:88:LYS:HG3	1	0.32
(1,1928)	1:A:84:LEU:HD23	1:A:88:LYS:HG2	1	0.32

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1928)	1:A:84:LEU:HD23	1:A:88:LYS:HG3	1	0.32
(1,1927)	1:A:88:LYS:HG2	1:A:84:LEU:HD21	1	0.32
(1,1927)	1:A:88:LYS:HG2	1:A:84:LEU:HD22	1	0.32
(1,1927)	1:A:88:LYS:HG2	1:A:84:LEU:HD23	1	0.32
(1,1927)	1:A:88:LYS:HG3	1:A:84:LEU:HD21	1	0.32
(1,1927)	1:A:88:LYS:HG3	1:A:84:LEU:HD22	1	0.32
(1,1927)	1:A:88:LYS:HG3	1:A:84:LEU:HD23	1	0.32
(1,1911)	1:A:28:ASP:HA	1:A:32:LYS:HE2	7	0.32
(1,1911)	1:A:28:ASP:HA	1:A:32:LYS:HE3	7	0.32
(1,1801)	1:A:45:ASN:HD22	1:A:2:VAL:HG11	4	0.32
(1,1801)	1:A:45:ASN:HD22	1:A:2:VAL:HG12	4	0.32
(1,1801)	1:A:45:ASN:HD22	1:A:2:VAL:HG13	4	0.32
(1,1789)	1:A:48:LYS:H	1:A:45:ASN:HD21	4	0.32
(1,170)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:HG11	10	0.32
(1,170)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:HG12	10	0.32
(1,170)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:HG13	10	0.32
(1,170)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:HG21	10	0.32
(1,170)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:HG22	10	0.32
(1,170)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:HG23	10	0.32
(1,1578)	1:A:73:THR:HG21	1:A:71:LEU:HD11	5	0.32
(1,1578)	1:A:73:THR:HG21	1:A:71:LEU:HD12	5	0.32
(1,1578)	1:A:73:THR:HG21	1:A:71:LEU:HD13	5	0.32
(1,1578)	1:A:73:THR:HG21	1:A:71:LEU:HD21	5	0.32
(1,1578)	1:A:73:THR:HG21	1:A:71:LEU:HD22	5	0.32
(1,1578)	1:A:73:THR:HG21	1:A:71:LEU:HD23	5	0.32
(1,1578)	1:A:73:THR:HG22	1:A:71:LEU:HD11	5	0.32
(1,1578)	1:A:73:THR:HG22	1:A:71:LEU:HD12	5	0.32
(1,1578)	1:A:73:THR:HG22	1:A:71:LEU:HD13	5	0.32
(1,1578)	1:A:73:THR:HG22	1:A:71:LEU:HD21	5	0.32
(1,1578)	1:A:73:THR:HG22	1:A:71:LEU:HD22	5	0.32
(1,1578)	1:A:73:THR:HG22	1:A:71:LEU:HD23	5	0.32
(1,1578)	1:A:73:THR:HG23	1:A:71:LEU:HD11	5	0.32
(1,1578)	1:A:73:THR:HG23	1:A:71:LEU:HD12	5	0.32
(1,1578)	1:A:73:THR:HG23	1:A:71:LEU:HD13	5	0.32
(1,1578)	1:A:73:THR:HG23	1:A:71:LEU:HD21	5	0.32
(1,1578)	1:A:73:THR:HG23	1:A:71:LEU:HD22	5	0.32
(1,1578)	1:A:73:THR:HG23	1:A:71:LEU:HD23	5	0.32
(1,110)	1:A:41:GLU:H	1:A:53:SER:HA	4	0.32
(1,110)	1:A:41:GLU:H	1:A:53:SER:HA	10	0.32
(1,1049)	1:A:48:LYS:H	1:A:44:VAL:HG11	2	0.32
(1,1049)	1:A:48:LYS:H	1:A:44:VAL:HG12	2	0.32
(1,1049)	1:A:48:LYS:H	1:A:44:VAL:HG13	2	0.32

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1049)	1:A:48:LYS:H	1:A:44:VAL:HG21	2	0.32
(1,1049)	1:A:48:LYS:H	1:A:44:VAL:HG22	2	0.32
(1,1049)	1:A:48:LYS:H	1:A:44:VAL:HG23	2	0.32
(1,10)	1:A:8:TYR:H	1:A:7:THR:HG21	8	0.32
(1,10)	1:A:8:TYR:H	1:A:7:THR:HG22	8	0.32
(1,10)	1:A:8:TYR:H	1:A:7:THR:HG23	8	0.32
(1,91)	1:A:8:TYR:H	1:A:43:ILE:HA	1	0.31
(1,723)	1:A:16:PHE:H	1:A:14:GLU:HB2	2	0.31
(1,713)	1:A:51:PHE:H	1:A:61:LEU:HB2	6	0.31
(1,713)	1:A:51:PHE:H	1:A:61:LEU:HB3	6	0.31
(1,70)	1:A:33:ALA:H	1:A:32:LYS:HA	1	0.31
(1,70)	1:A:33:ALA:H	1:A:32:LYS:HA	4	0.31
(1,66)	1:A:29:SER:H	1:A:31:LYS:H	9	0.31
(1,648)	1:A:50:THR:HB	1:A:43:ILE:HB	3	0.31
(1,635)	1:A:129:ARG:H	1:A:128:ILE:HD11	7	0.31
(1,635)	1:A:129:ARG:H	1:A:128:ILE:HD12	7	0.31
(1,635)	1:A:129:ARG:H	1:A:128:ILE:HD13	7	0.31
(1,572)	1:A:84:LEU:H	1:A:89:LEU:HG	6	0.31
(1,429)	1:A:22:ALA:H	1:A:20:LEU:HA	3	0.31
(1,383)	1:A:36:PRO:HG2	1:A:12:LYS:HA	3	0.31
(1,383)	1:A:36:PRO:HG3	1:A:12:LYS:HA	3	0.31
(1,275)	1:A:77:ASN:HB2	1:A:70:VAL:HA	6	0.31
(1,275)	1:A:77:ASN:HB3	1:A:70:VAL:HA	6	0.31
(1,253)	1:A:112:PHE:H	1:A:127:PHE:HB2	5	0.31
(1,253)	1:A:112:PHE:H	1:A:127:PHE:HB3	5	0.31
(1,240)	1:A:124:LYS:H	1:A:124:LYS:HD2	4	0.31
(1,240)	1:A:124:LYS:H	1:A:124:LYS:HD3	4	0.31
(1,240)	1:A:124:LYS:H	1:A:124:LYS:HD2	8	0.31
(1,240)	1:A:124:LYS:H	1:A:124:LYS:HD3	8	0.31
(1,24)	1:A:128:ILE:H	1:A:11:GLU:HB2	3	0.31
(1,24)	1:A:128:ILE:H	1:A:11:GLU:HB3	3	0.31
(1,238)	1:A:124:LYS:H	1:A:124:LYS:HB2	8	0.31
(1,238)	1:A:124:LYS:H	1:A:124:LYS:HB3	8	0.31
(1,237)	1:A:124:LYS:H	1:A:124:LYS:HB2	8	0.31
(1,237)	1:A:124:LYS:H	1:A:124:LYS:HB3	8	0.31
(1,216)	1:A:125:ARG:H	1:A:115:THR:HA	1	0.31
(1,216)	1:A:125:ARG:H	1:A:115:THR:HA	9	0.31
(1,2032)	1:A:105:TYR:HB2	1:A:112:PHE:HA	2	0.31
(1,2032)	1:A:105:TYR:HB3	1:A:112:PHE:HA	2	0.31
(1,1991)	1:A:82:THR:HB	1:A:61:LEU:HB2	6	0.31
(1,1991)	1:A:82:THR:HB	1:A:61:LEU:HB2	9	0.31
(1,1978)	1:A:74:VAL:HG21	1:A:29:SER:HB3	7	0.31

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1978)	1:A:74:VAL:HG22	1:A:29:SER:HB3	7	0.31
(1,1978)	1:A:74:VAL:HG23	1:A:29:SER:HB3	7	0.31
(1,1967)	1:A:124:LYS:HB2	1:A:14:GLU:HB3	10	0.31
(1,1951)	1:A:87:SER:HB3	1:A:4:LEU:HD21	1	0.31
(1,1951)	1:A:87:SER:HB3	1:A:4:LEU:HD22	1	0.31
(1,1951)	1:A:87:SER:HB3	1:A:4:LEU:HD23	1	0.31
(1,1951)	1:A:87:SER:HB3	1:A:4:LEU:HD21	7	0.31
(1,1951)	1:A:87:SER:HB3	1:A:4:LEU:HD22	7	0.31
(1,1951)	1:A:87:SER:HB3	1:A:4:LEU:HD23	7	0.31
(1,1947)	1:A:47:ASN:HA	1:A:2:VAL:HG21	4	0.31
(1,1947)	1:A:47:ASN:HA	1:A:2:VAL:HG22	4	0.31
(1,1947)	1:A:47:ASN:HA	1:A:2:VAL:HG23	4	0.31
(1,1924)	1:A:65:GLU:HB3	1:A:67:VAL:HG21	3	0.31
(1,1924)	1:A:65:GLU:HB3	1:A:67:VAL:HG22	3	0.31
(1,1924)	1:A:65:GLU:HB3	1:A:67:VAL:HG23	3	0.31
(1,1922)	1:A:65:GLU:HG2	1:A:63:VAL:HG11	4	0.31
(1,1922)	1:A:65:GLU:HG2	1:A:63:VAL:HG12	4	0.31
(1,1922)	1:A:65:GLU:HG2	1:A:63:VAL:HG13	4	0.31
(1,192)	1:A:104:THR:H	1:A:104:THR:HB	6	0.31
(1,1885)	1:A:22:ALA:HB1	1:A:18:GLU:HB2	4	0.31
(1,1885)	1:A:22:ALA:HB2	1:A:18:GLU:HB2	4	0.31
(1,1885)	1:A:22:ALA:HB3	1:A:18:GLU:HB2	4	0.31
(1,1824)	1:A:77:ASN:H	1:A:71:LEU:HD11	1	0.31
(1,1824)	1:A:77:ASN:H	1:A:71:LEU:HD12	1	0.31
(1,1824)	1:A:77:ASN:H	1:A:71:LEU:HD13	1	0.31
(1,1810)	1:A:13:ASN:HD22	1:A:34:ASN:HA	9	0.31
(1,1718)	1:A:126:TYR:HB2	1:A:12:LYS:HG2	4	0.31
(1,1718)	1:A:126:TYR:HB2	1:A:12:LYS:HG3	4	0.31
(1,1718)	1:A:126:TYR:HB3	1:A:12:LYS:HG2	4	0.31
(1,1718)	1:A:126:TYR:HB3	1:A:12:LYS:HG3	4	0.31
(1,1717)	1:A:126:TYR:HB2	1:A:12:LYS:HG2	4	0.31
(1,1717)	1:A:126:TYR:HB2	1:A:12:LYS:HG3	4	0.31
(1,1717)	1:A:126:TYR:HB3	1:A:12:LYS:HG2	4	0.31
(1,1717)	1:A:126:TYR:HB3	1:A:12:LYS:HG3	4	0.31
(1,1651)	1:A:65:GLU:H	1:A:84:LEU:HD11	4	0.31
(1,1651)	1:A:65:GLU:H	1:A:84:LEU:HD12	4	0.31
(1,1651)	1:A:65:GLU:H	1:A:84:LEU:HD13	4	0.31
(1,1651)	1:A:65:GLU:H	1:A:84:LEU:HD21	4	0.31
(1,1651)	1:A:65:GLU:H	1:A:84:LEU:HD22	4	0.31
(1,1651)	1:A:65:GLU:H	1:A:84:LEU:HD23	4	0.31
(1,1631)	1:A:113:VAL:HG21	1:A:126:TYR:HE1	2	0.31
(1,1631)	1:A:113:VAL:HG22	1:A:126:TYR:HE1	2	0.31

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1631)	1:A:113:VAL:HG23	1:A:126:TYR:HE1	2	0.31
(1,1631)	1:A:113:VAL:HG21	1:A:126:TYR:HE1	7	0.31
(1,1631)	1:A:113:VAL:HG22	1:A:126:TYR:HE1	7	0.31
(1,1631)	1:A:113:VAL:HG23	1:A:126:TYR:HE1	7	0.31
(1,1626)	1:A:12:LYS:HG2	1:A:126:TYR:HB2	4	0.31
(1,1626)	1:A:12:LYS:HG2	1:A:126:TYR:HB3	4	0.31
(1,1626)	1:A:12:LYS:HG3	1:A:126:TYR:HB2	4	0.31
(1,1626)	1:A:12:LYS:HG3	1:A:126:TYR:HB3	4	0.31
(1,1625)	1:A:12:LYS:HG2	1:A:126:TYR:HB2	4	0.31
(1,1625)	1:A:12:LYS:HG2	1:A:126:TYR:HB3	4	0.31
(1,1625)	1:A:12:LYS:HG3	1:A:126:TYR:HB2	4	0.31
(1,1625)	1:A:12:LYS:HG3	1:A:126:TYR:HB3	4	0.31
(1,145)	1:A:94:GLU:H	1:A:79:LYS:H	5	0.31
(1,124)	1:A:53:SER:H	1:A:59:SER:H	3	0.31
(1,113)	1:A:59:SER:H	1:A:53:SER:H	3	0.31
(1,110)	1:A:41:GLU:H	1:A:53:SER:HA	9	0.31
(3,9)	1:A:10:LEU:N	1:A:40:TYR:O	4	0.3
(3,49)	1:A:101:GLY:N	1:A:93:SER:O	10	0.3
(3,19)	1:A:19:TYR:N	1:A:15:ASN:O	5	0.3
(1,78)	1:A:35:SER:H	1:A:33:ALA:H	8	0.3
(1,750)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:44:VAL:HG11	5	0.3
(1,750)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:44:VAL:HG12	5	0.3
(1,750)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:44:VAL:HG13	5	0.3
(1,750)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:44:VAL:HG11	5	0.3
(1,750)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:44:VAL:HG12	5	0.3
(1,750)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:44:VAL:HG13	5	0.3
(1,750)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:44:VAL:HG11	5	0.3
(1,750)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:44:VAL:HG12	5	0.3
(1,750)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:44:VAL:HG13	5	0.3
(1,75)	1:A:34:ASN:H	1:A:33:ALA:HA	7	0.3
(1,75)	1:A:34:ASN:H	1:A:33:ALA:HA	8	0.3
(1,749)	1:A:54:SER:HA	1:A:39:VAL:HG11	3	0.3
(1,749)	1:A:54:SER:HA	1:A:39:VAL:HG12	3	0.3
(1,749)	1:A:54:SER:HA	1:A:39:VAL:HG13	3	0.3
(1,749)	1:A:54:SER:HA	1:A:39:VAL:HG11	7	0.3
(1,749)	1:A:54:SER:HA	1:A:39:VAL:HG12	7	0.3
(1,749)	1:A:54:SER:HA	1:A:39:VAL:HG13	7	0.3
(1,70)	1:A:33:ALA:H	1:A:32:LYS:HA	9	0.3
(1,667)	1:A:88:LYS:HA	1:A:106:GLU:HB2	6	0.3
(1,667)	1:A:88:LYS:HA	1:A:106:GLU:HB3	6	0.3
(1,614)	1:A:121:MET:H	1:A:118:ALA:HA	8	0.3
(1,37)	1:A:16:PHE:H	1:A:15:ASN:HB2	4	0.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,37)	1:A:16:PHE:H	1:A:15:ASN:HB3	4	0.3
(1,351)	1:A:88:LYS:H	1:A:85:GLU:H	3	0.3
(1,345)	1:A:43:ILE:HG21	1:A:7:THR:HG21	1	0.3
(1,345)	1:A:43:ILE:HG21	1:A:7:THR:HG22	1	0.3
(1,345)	1:A:43:ILE:HG21	1:A:7:THR:HG23	1	0.3
(1,345)	1:A:43:ILE:HG22	1:A:7:THR:HG21	1	0.3
(1,345)	1:A:43:ILE:HG22	1:A:7:THR:HG22	1	0.3
(1,345)	1:A:43:ILE:HG22	1:A:7:THR:HG23	1	0.3
(1,345)	1:A:43:ILE:HG23	1:A:7:THR:HG21	1	0.3
(1,345)	1:A:43:ILE:HG23	1:A:7:THR:HG22	1	0.3
(1,345)	1:A:43:ILE:HG23	1:A:7:THR:HG23	1	0.3
(1,296)	1:A:6:GLY:H	1:A:44:VAL:HG11	8	0.3
(1,296)	1:A:6:GLY:H	1:A:44:VAL:HG12	8	0.3
(1,296)	1:A:6:GLY:H	1:A:44:VAL:HG13	8	0.3
(1,296)	1:A:6:GLY:H	1:A:44:VAL:HG21	8	0.3
(1,296)	1:A:6:GLY:H	1:A:44:VAL:HG22	8	0.3
(1,296)	1:A:6:GLY:H	1:A:44:VAL:HG23	8	0.3
(1,220)	1:A:123:ALA:H	1:A:117:CYS:HA	7	0.3
(1,216)	1:A:125:ARG:H	1:A:115:THR:HA	5	0.3
(1,2051)	1:A:12:LYS:HE2	1:A:126:TYR:HD1	5	0.3
(1,2051)	1:A:12:LYS:HE3	1:A:126:TYR:HD1	5	0.3
(1,192)	1:A:104:THR:H	1:A:104:THR:HB	7	0.3
(1,19)	1:A:128:ILE:H	1:A:10:LEU:HA	6	0.3
(1,1785)	1:A:27:GLN:HE22	1:A:31:LYS:HD2	6	0.3
(1,1785)	1:A:27:GLN:HE22	1:A:31:LYS:HD3	6	0.3
(1,1778)	1:A:15:ASN:H	1:A:18:GLU:HB3	2	0.3
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD11	1	0.3
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD12	1	0.3
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD13	1	0.3
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD21	1	0.3
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD22	1	0.3
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD23	1	0.3
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD11	1	0.3
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD12	1	0.3
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD13	1	0.3
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD21	1	0.3
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD22	1	0.3
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD23	1	0.3
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD11	1	0.3
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD12	1	0.3
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD13	1	0.3
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD21	1	0.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD22	1	0.3
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD23	1	0.3
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD11	1	0.3
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD12	1	0.3
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD13	1	0.3
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD21	1	0.3
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD22	1	0.3
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD23	1	0.3
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD11	1	0.3
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD12	1	0.3
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD13	1	0.3
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD21	1	0.3
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD22	1	0.3
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD23	1	0.3
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD11	1	0.3
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD12	1	0.3
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD13	1	0.3
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD21	1	0.3
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD22	1	0.3
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD23	1	0.3
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD11	1	0.3
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD12	1	0.3
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD13	1	0.3
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD21	1	0.3
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD22	1	0.3
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD23	1	0.3
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD11	1	0.3
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD12	1	0.3
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD13	1	0.3
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD21	1	0.3
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD22	1	0.3
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD23	1	0.3
(1,1578)	1:A:73:THR:HG21	1:A:71:LEU:HD11	7	0.3
(1,1578)	1:A:73:THR:HG21	1:A:71:LEU:HD12	7	0.3
(1,1578)	1:A:73:THR:HG21	1:A:71:LEU:HD13	7	0.3
(1,1578)	1:A:73:THR:HG21	1:A:71:LEU:HD21	7	0.3
(1,1578)	1:A:73:THR:HG21	1:A:71:LEU:HD22	7	0.3
(1,1578)	1:A:73:THR:HG21	1:A:71:LEU:HD23	7	0.3
(1,1578)	1:A:73:THR:HG22	1:A:71:LEU:HD11	7	0.3
(1,1578)	1:A:73:THR:HG22	1:A:71:LEU:HD12	7	0.3
(1,1578)	1:A:73:THR:HG22	1:A:71:LEU:HD13	7	0.3
(1,1578)	1:A:73:THR:HG22	1:A:71:LEU:HD21	7	0.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1578)	1:A:73:THR:HG22	1:A:71:LEU:HD22	7	0.3
(1,1578)	1:A:73:THR:HG22	1:A:71:LEU:HD23	7	0.3
(1,1578)	1:A:73:THR:HG23	1:A:71:LEU:HD11	7	0.3
(1,1578)	1:A:73:THR:HG23	1:A:71:LEU:HD12	7	0.3
(1,1578)	1:A:73:THR:HG23	1:A:71:LEU:HD13	7	0.3
(1,1578)	1:A:73:THR:HG23	1:A:71:LEU:HD21	7	0.3
(1,1578)	1:A:73:THR:HG23	1:A:71:LEU:HD22	7	0.3
(1,1578)	1:A:73:THR:HG23	1:A:71:LEU:HD23	7	0.3
(1,1527)	1:A:47:ASN:HA	1:A:2:VAL:HB	10	0.3
(1,1337)	1:A:79:LYS:H	1:A:93:SER:HB2	6	0.3
(1,1337)	1:A:79:LYS:H	1:A:93:SER:HB3	6	0.3
(1,125)	1:A:53:SER:H	1:A:60:THR:HA	8	0.3
(1,1186)	1:A:77:ASN:HD21	1:A:70:VAL:HA	3	0.3
(1,1186)	1:A:77:ASN:HD22	1:A:70:VAL:HA	3	0.3
(3,9)	1:A:10:LEU:N	1:A:40:TYR:O	8	0.29
(3,64)	1:A:129:ARG:H	1:A:109:ASP:O	4	0.29
(3,34)	1:A:48:LYS:H	1:A:45:ASN:O	5	0.29
(2,5)	1:A:94:GLU:H	1:A:80:SER:HA	6	0.29
(1,99)	1:A:45:ASN:H	1:A:48:LYS:HB2	9	0.29
(1,99)	1:A:45:ASN:H	1:A:48:LYS:HB3	9	0.29
(1,75)	1:A:34:ASN:H	1:A:33:ALA:HA	9	0.29
(1,725)	1:A:29:SER:H	1:A:32:LYS:HG2	5	0.29
(1,723)	1:A:16:PHE:H	1:A:14:GLU:HB2	4	0.29
(1,713)	1:A:51:PHE:H	1:A:61:LEU:HB2	2	0.29
(1,713)	1:A:51:PHE:H	1:A:61:LEU:HB3	2	0.29
(1,636)	1:A:129:ARG:H	1:A:128:ILE:HG12	1	0.29
(1,636)	1:A:129:ARG:H	1:A:128:ILE:HG13	1	0.29
(1,635)	1:A:129:ARG:H	1:A:128:ILE:HD11	3	0.29
(1,635)	1:A:129:ARG:H	1:A:128:ILE:HD12	3	0.29
(1,635)	1:A:129:ARG:H	1:A:128:ILE:HD13	3	0.29
(1,627)	1:A:14:GLU:H	1:A:124:LYS:H	9	0.29
(1,599)	1:A:127:PHE:H	1:A:112:PHE:HA	9	0.29
(1,551)	1:A:83:LYS:H	1:A:83:LYS:HD2	2	0.29
(1,551)	1:A:83:LYS:H	1:A:83:LYS:HD3	2	0.29
(1,5)	1:A:5:ALA:H	1:A:4:LEU:HB2	10	0.29
(1,5)	1:A:5:ALA:H	1:A:4:LEU:HB3	10	0.29
(1,493)	1:A:56:GLY:H	1:A:57:MET:HB2	1	0.29
(1,493)	1:A:56:GLY:H	1:A:57:MET:HB3	1	0.29
(1,491)	1:A:41:GLU:H	1:A:51:PHE:HA	8	0.29
(1,450)	1:A:32:LYS:H	1:A:30:ILE:H	6	0.29
(1,436)	1:A:19:TYR:H	1:A:21:ALA:H	2	0.29
(1,409)	1:A:124:LYS:H	1:A:14:GLU:H	9	0.29

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,376)	1:A:106:GLU:H	1:A:113:VAL:HB	3	0.29
(1,376)	1:A:106:GLU:H	1:A:113:VAL:HB	8	0.29
(1,353)	1:A:6:GLY:H	1:A:5:ALA:HA	3	0.29
(1,349)	1:A:77:ASN:HB2	1:A:70:VAL:HG11	2	0.29
(1,349)	1:A:77:ASN:HB2	1:A:70:VAL:HG12	2	0.29
(1,349)	1:A:77:ASN:HB2	1:A:70:VAL:HG13	2	0.29
(1,349)	1:A:77:ASN:HB2	1:A:70:VAL:HG21	2	0.29
(1,349)	1:A:77:ASN:HB2	1:A:70:VAL:HG22	2	0.29
(1,349)	1:A:77:ASN:HB2	1:A:70:VAL:HG23	2	0.29
(1,349)	1:A:77:ASN:HB3	1:A:70:VAL:HG11	2	0.29
(1,349)	1:A:77:ASN:HB3	1:A:70:VAL:HG12	2	0.29
(1,349)	1:A:77:ASN:HB3	1:A:70:VAL:HG13	2	0.29
(1,349)	1:A:77:ASN:HB3	1:A:70:VAL:HG21	2	0.29
(1,349)	1:A:77:ASN:HB3	1:A:70:VAL:HG22	2	0.29
(1,349)	1:A:77:ASN:HB3	1:A:70:VAL:HG23	2	0.29
(1,245)	1:A:125:ARG:H	1:A:125:ARG:HD2	7	0.29
(1,245)	1:A:125:ARG:H	1:A:125:ARG:HD3	7	0.29
(1,223)	1:A:121:MET:H	1:A:118:ALA:H	9	0.29
(1,2063)	1:A:111:GLY:HA3	1:A:129:ARG:HG2	7	0.29
(1,2063)	1:A:111:GLY:HA3	1:A:129:ARG:HG3	7	0.29
(1,2041)	1:A:93:SER:HB2	1:A:116:MET:HG3	7	0.29
(1,193)	1:A:104:THR:H	1:A:104:THR:HG21	8	0.29
(1,193)	1:A:104:THR:H	1:A:104:THR:HG22	8	0.29
(1,193)	1:A:104:THR:H	1:A:104:THR:HG23	8	0.29
(1,1822)	1:A:34:ASN:HD21	1:A:71:LEU:HB2	9	0.29
(1,170)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:HG11	5	0.29
(1,170)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:HG12	5	0.29
(1,170)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:HG13	5	0.29
(1,170)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:HG21	5	0.29
(1,170)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:HG22	5	0.29
(1,170)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:HG23	5	0.29
(1,170)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:HG11	6	0.29
(1,170)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:HG12	6	0.29
(1,170)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:HG13	6	0.29
(1,170)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:HG21	6	0.29
(1,170)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:HG22	6	0.29
(1,170)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:HG23	6	0.29
(1,1566)	1:A:43:ILE:HB	1:A:7:THR:HB	6	0.29
(1,156)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD11	6	0.29
(1,156)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD12	6	0.29
(1,156)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD13	6	0.29
(1,156)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD21	6	0.29

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,156)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD22	6	0.29
(1,156)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD23	6	0.29
(1,156)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD11	10	0.29
(1,156)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD12	10	0.29
(1,156)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD13	10	0.29
(1,156)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD21	10	0.29
(1,156)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD22	10	0.29
(1,156)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD23	10	0.29
(1,155)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD11	6	0.29
(1,155)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD12	6	0.29
(1,155)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD13	6	0.29
(1,155)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD21	6	0.29
(1,155)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD22	6	0.29
(1,155)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD23	6	0.29
(1,155)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD11	10	0.29
(1,155)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD12	10	0.29
(1,155)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD13	10	0.29
(1,155)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD21	10	0.29
(1,155)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD22	10	0.29
(1,155)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD23	10	0.29
(1,1456)	1:A:104:THR:H	1:A:114:LEU:HD11	4	0.29
(1,1456)	1:A:104:THR:H	1:A:114:LEU:HD12	4	0.29
(1,1456)	1:A:104:THR:H	1:A:114:LEU:HD13	4	0.29
(1,1456)	1:A:104:THR:H	1:A:114:LEU:HD21	4	0.29
(1,1456)	1:A:104:THR:H	1:A:114:LEU:HD22	4	0.29
(1,1456)	1:A:104:THR:H	1:A:114:LEU:HD23	4	0.29
(1,1356)	1:A:99:ARG:H	1:A:95:LEU:HG	2	0.29
(1,132)	1:A:63:VAL:H	1:A:62:ILE:HG21	5	0.29
(1,132)	1:A:63:VAL:H	1:A:62:ILE:HG22	5	0.29
(1,132)	1:A:63:VAL:H	1:A:62:ILE:HG23	5	0.29
(1,109)	1:A:53:SER:H	1:A:52:LYS:HG2	1	0.29
(1,109)	1:A:53:SER:H	1:A:52:LYS:HG3	1	0.29
(1,1049)	1:A:48:LYS:H	1:A:44:VAL:HG11	7	0.29
(1,1049)	1:A:48:LYS:H	1:A:44:VAL:HG12	7	0.29
(1,1049)	1:A:48:LYS:H	1:A:44:VAL:HG13	7	0.29
(1,1049)	1:A:48:LYS:H	1:A:44:VAL:HG21	7	0.29
(1,1049)	1:A:48:LYS:H	1:A:44:VAL:HG22	7	0.29
(1,1049)	1:A:48:LYS:H	1:A:44:VAL:HG23	7	0.29
(1,99)	1:A:45:ASN:H	1:A:48:LYS:HB2	3	0.28
(1,99)	1:A:45:ASN:H	1:A:48:LYS:HB3	3	0.28
(1,750)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:44:VAL:HG11	8	0.28
(1,750)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:44:VAL:HG12	8	0.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,750)	1:A:4:LEU:HD11	1:A:44:VAL:HG13	8	0.28
(1,750)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:44:VAL:HG11	8	0.28
(1,750)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:44:VAL:HG12	8	0.28
(1,750)	1:A:4:LEU:HD12	1:A:44:VAL:HG13	8	0.28
(1,750)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:44:VAL:HG11	8	0.28
(1,750)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:44:VAL:HG12	8	0.28
(1,750)	1:A:4:LEU:HD13	1:A:44:VAL:HG13	8	0.28
(1,732)	1:A:33:ALA:H	1:A:74:VAL:HG11	2	0.28
(1,732)	1:A:33:ALA:H	1:A:74:VAL:HG12	2	0.28
(1,732)	1:A:33:ALA:H	1:A:74:VAL:HG13	2	0.28
(1,703)	1:A:69:GLU:H	1:A:78:ILE:HD11	7	0.28
(1,703)	1:A:69:GLU:H	1:A:78:ILE:HD12	7	0.28
(1,703)	1:A:69:GLU:H	1:A:78:ILE:HD13	7	0.28
(1,693)	1:A:61:LEU:HA	1:A:67:VAL:HG11	2	0.28
(1,693)	1:A:61:LEU:HA	1:A:67:VAL:HG12	2	0.28
(1,693)	1:A:61:LEU:HA	1:A:67:VAL:HG13	2	0.28
(1,693)	1:A:61:LEU:HA	1:A:67:VAL:HG21	2	0.28
(1,693)	1:A:61:LEU:HA	1:A:67:VAL:HG22	2	0.28
(1,693)	1:A:61:LEU:HA	1:A:67:VAL:HG23	2	0.28
(1,693)	1:A:61:LEU:HA	1:A:67:VAL:HG11	10	0.28
(1,693)	1:A:61:LEU:HA	1:A:67:VAL:HG12	10	0.28
(1,693)	1:A:61:LEU:HA	1:A:67:VAL:HG13	10	0.28
(1,693)	1:A:61:LEU:HA	1:A:67:VAL:HG21	10	0.28
(1,693)	1:A:61:LEU:HA	1:A:67:VAL:HG22	10	0.28
(1,693)	1:A:61:LEU:HA	1:A:67:VAL:HG23	10	0.28
(1,394)	1:A:126:TYR:HB2	1:A:113:VAL:HA	8	0.28
(1,384)	1:A:25:VAL:HG11	1:A:20:LEU:HD11	4	0.28
(1,384)	1:A:25:VAL:HG11	1:A:20:LEU:HD12	4	0.28
(1,384)	1:A:25:VAL:HG11	1:A:20:LEU:HD13	4	0.28
(1,384)	1:A:25:VAL:HG12	1:A:20:LEU:HD11	4	0.28
(1,384)	1:A:25:VAL:HG12	1:A:20:LEU:HD12	4	0.28
(1,384)	1:A:25:VAL:HG12	1:A:20:LEU:HD13	4	0.28
(1,384)	1:A:25:VAL:HG13	1:A:20:LEU:HD11	4	0.28
(1,384)	1:A:25:VAL:HG13	1:A:20:LEU:HD12	4	0.28
(1,384)	1:A:25:VAL:HG13	1:A:20:LEU:HD13	4	0.28
(1,370)	1:A:5:ALA:H	1:A:4:LEU:HD21	2	0.28
(1,370)	1:A:5:ALA:H	1:A:4:LEU:HD22	2	0.28
(1,370)	1:A:5:ALA:H	1:A:4:LEU:HD23	2	0.28
(1,347)	1:A:43:ILE:H	1:A:50:THR:HB	10	0.28
(1,281)	1:A:84:LEU:HA	1:A:89:LEU:HB2	8	0.28
(1,281)	1:A:84:LEU:HA	1:A:89:LEU:HB3	8	0.28
(1,270)	1:A:73:THR:HG21	1:A:33:ALA:HB1	10	0.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,270)	1:A:73:THR:HG21	1:A:33:ALA:HB2	10	0.28
(1,270)	1:A:73:THR:HG21	1:A:33:ALA:HB3	10	0.28
(1,270)	1:A:73:THR:HG22	1:A:33:ALA:HB1	10	0.28
(1,270)	1:A:73:THR:HG22	1:A:33:ALA:HB2	10	0.28
(1,270)	1:A:73:THR:HG22	1:A:33:ALA:HB3	10	0.28
(1,270)	1:A:73:THR:HG23	1:A:33:ALA:HB1	10	0.28
(1,270)	1:A:73:THR:HG23	1:A:33:ALA:HB2	10	0.28
(1,270)	1:A:73:THR:HG23	1:A:33:ALA:HB3	10	0.28
(1,240)	1:A:124:LYS:H	1:A:124:LYS:HD2	2	0.28
(1,240)	1:A:124:LYS:H	1:A:124:LYS:HD3	2	0.28
(1,239)	1:A:125:ARG:H	1:A:124:LYS:HB2	6	0.28
(1,239)	1:A:125:ARG:H	1:A:124:LYS:HB3	6	0.28
(1,233)	1:A:19:TYR:H	1:A:123:ALA:HB1	10	0.28
(1,233)	1:A:19:TYR:H	1:A:123:ALA:HB2	10	0.28
(1,233)	1:A:19:TYR:H	1:A:123:ALA:HB3	10	0.28
(1,221)	1:A:118:ALA:H	1:A:117:CYS:HB2	2	0.28
(1,221)	1:A:118:ALA:H	1:A:117:CYS:HB3	2	0.28
(1,221)	1:A:118:ALA:H	1:A:117:CYS:HB2	3	0.28
(1,221)	1:A:118:ALA:H	1:A:117:CYS:HB3	3	0.28
(1,216)	1:A:125:ARG:H	1:A:115:THR:HA	4	0.28
(1,210)	1:A:127:PHE:H	1:A:113:VAL:HA	2	0.28
(1,2051)	1:A:12:LYS:HE2	1:A:126:TYR:HD1	4	0.28
(1,2051)	1:A:12:LYS:HE3	1:A:126:TYR:HD1	4	0.28
(1,1947)	1:A:47:ASN:HA	1:A:2:VAL:HG21	2	0.28
(1,1947)	1:A:47:ASN:HA	1:A:2:VAL:HG22	2	0.28
(1,1947)	1:A:47:ASN:HA	1:A:2:VAL:HG23	2	0.28
(1,1935)	1:A:94:GLU:HG2	1:A:96:PRO:HB2	7	0.28
(1,1935)	1:A:94:GLU:HG3	1:A:96:PRO:HB2	7	0.28
(1,1824)	1:A:77:ASN:H	1:A:71:LEU:HD11	10	0.28
(1,1824)	1:A:77:ASN:H	1:A:71:LEU:HD12	10	0.28
(1,1824)	1:A:77:ASN:H	1:A:71:LEU:HD13	10	0.28
(1,1801)	1:A:45:ASN:HD22	1:A:2:VAL:HG11	2	0.28
(1,1801)	1:A:45:ASN:HD22	1:A:2:VAL:HG12	2	0.28
(1,1801)	1:A:45:ASN:HD22	1:A:2:VAL:HG13	2	0.28
(1,1792)	1:A:72:GLY:H	1:A:75:ASN:HA	5	0.28
(1,1753)	1:A:27:GLN:H	1:A:26:PRO:HD2	4	0.28
(1,165)	1:A:83:LYS:H	1:A:91:VAL:HA	1	0.28
(1,1647)	1:A:14:GLU:H	1:A:124:LYS:HG2	3	0.28
(1,1647)	1:A:14:GLU:H	1:A:124:LYS:HG3	3	0.28
(1,1628)	1:A:12:LYS:HG2	1:A:126:TYR:HD1	6	0.28
(1,1628)	1:A:12:LYS:HG3	1:A:126:TYR:HD1	6	0.28
(1,1627)	1:A:12:LYS:HG2	1:A:126:TYR:HD1	6	0.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1627)	1:A:12:LYS:HG3	1:A:126:TYR:HD1	6	0.28
(1,156)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD11	4	0.28
(1,156)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD12	4	0.28
(1,156)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD13	4	0.28
(1,156)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD21	4	0.28
(1,156)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD22	4	0.28
(1,156)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD23	4	0.28
(1,155)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD11	4	0.28
(1,155)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD12	4	0.28
(1,155)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD13	4	0.28
(1,155)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD21	4	0.28
(1,155)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD22	4	0.28
(1,155)	1:A:89:LEU:H	1:A:84:LEU:HD23	4	0.28
(1,1527)	1:A:47:ASN:HA	1:A:2:VAL:HB	1	0.28
(1,1527)	1:A:47:ASN:HA	1:A:2:VAL:HB	7	0.28
(1,125)	1:A:53:SER:H	1:A:60:THR:HA	5	0.28
(1,102)	1:A:50:THR:H	1:A:49:PHE:HB2	5	0.28
(1,102)	1:A:50:THR:H	1:A:49:PHE:HB3	5	0.28
(3,15)	1:A:14:GLU:N	1:A:124:LYS:O	8	0.27
(1,971)	1:A:28:ASP:H	1:A:31:LYS:HB2	1	0.27
(1,971)	1:A:28:ASP:H	1:A:31:LYS:HB3	1	0.27
(1,907)	1:A:25:VAL:H	1:A:23:LEU:HG	9	0.27
(1,706)	1:A:65:GLU:HB2	1:A:62:ILE:HD11	8	0.27
(1,706)	1:A:65:GLU:HB2	1:A:62:ILE:HD12	8	0.27
(1,706)	1:A:65:GLU:HB2	1:A:62:ILE:HD13	8	0.27
(1,706)	1:A:65:GLU:HB3	1:A:62:ILE:HD11	8	0.27
(1,706)	1:A:65:GLU:HB3	1:A:62:ILE:HD12	8	0.27
(1,706)	1:A:65:GLU:HB3	1:A:62:ILE:HD13	8	0.27
(1,65)	1:A:34:ASN:H	1:A:31:LYS:HA	9	0.27
(1,554)	1:A:84:LEU:H	1:A:83:LYS:HG2	3	0.27
(1,554)	1:A:84:LEU:H	1:A:83:LYS:HG3	3	0.27
(1,552)	1:A:83:LYS:H	1:A:83:LYS:HE2	5	0.27
(1,552)	1:A:83:LYS:H	1:A:83:LYS:HE3	5	0.27
(1,45)	1:A:23:LEU:H	1:A:19:TYR:HA	2	0.27
(1,430)	1:A:24:GLY:H	1:A:20:LEU:HA	7	0.27
(1,4)	1:A:5:ALA:H	1:A:4:LEU:HA	9	0.27
(1,356)	1:A:63:VAL:H	1:A:62:ILE:HA	2	0.27
(1,285)	1:A:23:LEU:HB2	1:A:95:LEU:HB2	6	0.27
(1,285)	1:A:23:LEU:HB2	1:A:95:LEU:HB3	6	0.27
(1,285)	1:A:23:LEU:HB3	1:A:95:LEU:HB2	6	0.27
(1,285)	1:A:23:LEU:HB3	1:A:95:LEU:HB3	6	0.27
(1,284)	1:A:23:LEU:HB2	1:A:95:LEU:HB2	6	0.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,284)	1:A:23:LEU:HB2	1:A:95:LEU:HB3	6	0.27
(1,284)	1:A:23:LEU:HB3	1:A:95:LEU:HB2	6	0.27
(1,284)	1:A:23:LEU:HB3	1:A:95:LEU:HB3	6	0.27
(1,239)	1:A:125:ARG:H	1:A:124:LYS:HB2	4	0.27
(1,239)	1:A:125:ARG:H	1:A:124:LYS:HB3	4	0.27
(1,216)	1:A:125:ARG:H	1:A:115:THR:HA	6	0.27
(1,2047)	1:A:113:VAL:HG21	1:A:124:LYS:HB2	4	0.27
(1,2047)	1:A:113:VAL:HG22	1:A:124:LYS:HB2	4	0.27
(1,2047)	1:A:113:VAL:HG23	1:A:124:LYS:HB2	4	0.27
(1,2033)	1:A:126:TYR:HA	1:A:113:VAL:HB	4	0.27
(1,2019)	1:A:63:VAL:HG21	1:A:89:LEU:HB2	7	0.27
(1,2019)	1:A:63:VAL:HG22	1:A:89:LEU:HB2	7	0.27
(1,2019)	1:A:63:VAL:HG23	1:A:89:LEU:HB2	7	0.27
(1,1943)	1:A:45:ASN:HB3	1:A:2:VAL:HA	9	0.27
(1,1922)	1:A:65:GLU:HG2	1:A:63:VAL:HG11	6	0.27
(1,1922)	1:A:65:GLU:HG2	1:A:63:VAL:HG12	6	0.27
(1,1922)	1:A:65:GLU:HG2	1:A:63:VAL:HG13	6	0.27
(1,189)	1:A:104:THR:H	1:A:103:ARG:HG2	1	0.27
(1,189)	1:A:104:THR:H	1:A:103:ARG:HG3	1	0.27
(1,189)	1:A:104:THR:H	1:A:103:ARG:HG2	4	0.27
(1,189)	1:A:104:THR:H	1:A:103:ARG:HG3	4	0.27
(1,1885)	1:A:22:ALA:HB1	1:A:18:GLU:HB2	3	0.27
(1,1885)	1:A:22:ALA:HB2	1:A:18:GLU:HB2	3	0.27
(1,1885)	1:A:22:ALA:HB3	1:A:18:GLU:HB2	3	0.27
(1,1800)	1:A:45:ASN:HD21	1:A:2:VAL:HG11	1	0.27
(1,1800)	1:A:45:ASN:HD21	1:A:2:VAL:HG12	1	0.27
(1,1800)	1:A:45:ASN:HD21	1:A:2:VAL:HG13	1	0.27
(1,1760)	1:A:77:ASN:HD21	1:A:76:MET:HB2	10	0.27
(1,170)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:HG11	2	0.27
(1,170)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:HG12	2	0.27
(1,170)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:HG13	2	0.27
(1,170)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:HG21	2	0.27
(1,170)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:HG22	2	0.27
(1,170)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:HG23	2	0.27
(1,1639)	1:A:7:THR:H	1:A:130:THR:H	5	0.27
(1,1638)	1:A:130:THR:H	1:A:7:THR:H	5	0.27
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD11	4	0.27
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD12	4	0.27
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD13	4	0.27
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD21	4	0.27
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD22	4	0.27
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD23	4	0.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD11	4	0.27
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD12	4	0.27
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD13	4	0.27
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD21	4	0.27
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD22	4	0.27
(1,1605)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD23	4	0.27
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD11	4	0.27
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD12	4	0.27
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD13	4	0.27
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD21	4	0.27
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD22	4	0.27
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD23	4	0.27
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD11	4	0.27
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD12	4	0.27
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD13	4	0.27
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD21	4	0.27
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD22	4	0.27
(1,1604)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD23	4	0.27
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD11	4	0.27
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD12	4	0.27
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD13	4	0.27
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD21	4	0.27
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD22	4	0.27
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD23	4	0.27
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD11	4	0.27
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD12	4	0.27
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD13	4	0.27
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD21	4	0.27
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD22	4	0.27
(1,1603)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD23	4	0.27
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD11	4	0.27
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD12	4	0.27
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD13	4	0.27
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD21	4	0.27
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD22	4	0.27
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD2	1:A:95:LEU:HD23	4	0.27
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD11	4	0.27
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD12	4	0.27
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD13	4	0.27
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD21	4	0.27
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD22	4	0.27
(1,1602)	1:A:99:ARG:HD3	1:A:95:LEU:HD23	4	0.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1459)	1:A:125:ARG:H	1:A:114:LEU:HG	9	0.27
(1,1459)	1:A:125:ARG:H	1:A:114:LEU:HG	10	0.27
(1,1356)	1:A:99:ARG:H	1:A:95:LEU:HG	8	0.27
(1,131)	1:A:63:VAL:H	1:A:62:ILE:HD11	4	0.27
(1,131)	1:A:63:VAL:H	1:A:62:ILE:HD12	4	0.27
(1,131)	1:A:63:VAL:H	1:A:62:ILE:HD13	4	0.27
(2,8)	1:A:41:GLU:H	1:A:52:LYS:H	9	0.26
(2,7)	1:A:52:LYS:H	1:A:41:GLU:H	9	0.26
(2,3)	1:A:59:SER:H	1:A:54:SER:HA	1	0.26
(1,757)	1:A:61:LEU:HD21	1:A:89:LEU:HD11	7	0.26
(1,757)	1:A:61:LEU:HD21	1:A:89:LEU:HD12	7	0.26
(1,757)	1:A:61:LEU:HD21	1:A:89:LEU:HD13	7	0.26
(1,757)	1:A:61:LEU:HD21	1:A:89:LEU:HD21	7	0.26
(1,757)	1:A:61:LEU:HD21	1:A:89:LEU:HD22	7	0.26
(1,757)	1:A:61:LEU:HD21	1:A:89:LEU:HD23	7	0.26
(1,757)	1:A:61:LEU:HD22	1:A:89:LEU:HD11	7	0.26
(1,757)	1:A:61:LEU:HD22	1:A:89:LEU:HD12	7	0.26
(1,757)	1:A:61:LEU:HD22	1:A:89:LEU:HD13	7	0.26
(1,757)	1:A:61:LEU:HD22	1:A:89:LEU:HD21	7	0.26
(1,757)	1:A:61:LEU:HD22	1:A:89:LEU:HD22	7	0.26
(1,757)	1:A:61:LEU:HD22	1:A:89:LEU:HD23	7	0.26
(1,757)	1:A:61:LEU:HD23	1:A:89:LEU:HD11	7	0.26
(1,757)	1:A:61:LEU:HD23	1:A:89:LEU:HD12	7	0.26
(1,757)	1:A:61:LEU:HD23	1:A:89:LEU:HD13	7	0.26
(1,757)	1:A:61:LEU:HD23	1:A:89:LEU:HD21	7	0.26
(1,757)	1:A:61:LEU:HD23	1:A:89:LEU:HD22	7	0.26
(1,757)	1:A:61:LEU:HD23	1:A:89:LEU:HD23	7	0.26
(1,723)	1:A:16:PHE:H	1:A:14:GLU:HB2	1	0.26
(1,63)	1:A:32:LYS:H	1:A:31:LYS:HA	2	0.26
(1,554)	1:A:84:LEU:H	1:A:83:LYS:HG2	7	0.26
(1,554)	1:A:84:LEU:H	1:A:83:LYS:HG3	7	0.26
(1,465)	1:A:34:ASN:HD21	1:A:34:ASN:HD22	8	0.26
(1,465)	1:A:34:ASN:HD22	1:A:34:ASN:HD21	8	0.26
(1,464)	1:A:34:ASN:HD21	1:A:34:ASN:HD22	8	0.26
(1,464)	1:A:34:ASN:HD22	1:A:34:ASN:HD21	8	0.26
(1,392)	1:A:79:LYS:HE2	1:A:94:GLU:HG2	6	0.26
(1,392)	1:A:79:LYS:HE2	1:A:94:GLU:HG3	6	0.26
(1,392)	1:A:79:LYS:HE3	1:A:94:GLU:HG2	6	0.26
(1,392)	1:A:79:LYS:HE3	1:A:94:GLU:HG3	6	0.26
(1,392)	1:A:79:LYS:HE2	1:A:94:GLU:HG2	7	0.26
(1,392)	1:A:79:LYS:HE2	1:A:94:GLU:HG3	7	0.26
(1,392)	1:A:79:LYS:HE3	1:A:94:GLU:HG2	7	0.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,392)	1:A:79:LYS:HE3	1:A:94:GLU:HG3	7	0.26
(1,37)	1:A:16:PHE:H	1:A:15:ASN:HB2	6	0.26
(1,37)	1:A:16:PHE:H	1:A:15:ASN:HB3	6	0.26
(1,37)	1:A:16:PHE:H	1:A:15:ASN:HB2	8	0.26
(1,37)	1:A:16:PHE:H	1:A:15:ASN:HB3	8	0.26
(1,37)	1:A:16:PHE:H	1:A:15:ASN:HB2	10	0.26
(1,37)	1:A:16:PHE:H	1:A:15:ASN:HB3	10	0.26
(1,348)	1:A:116:MET:HA	1:A:103:ARG:HG2	1	0.26
(1,348)	1:A:116:MET:HA	1:A:103:ARG:HG3	1	0.26
(1,240)	1:A:124:LYS:H	1:A:124:LYS:HD2	9	0.26
(1,240)	1:A:124:LYS:H	1:A:124:LYS:HD3	9	0.26
(1,230)	1:A:123:ALA:H	1:A:122:VAL:HG11	10	0.26
(1,230)	1:A:123:ALA:H	1:A:122:VAL:HG12	10	0.26
(1,230)	1:A:123:ALA:H	1:A:122:VAL:HG13	10	0.26
(1,230)	1:A:123:ALA:H	1:A:122:VAL:HG21	10	0.26
(1,230)	1:A:123:ALA:H	1:A:122:VAL:HG22	10	0.26
(1,230)	1:A:123:ALA:H	1:A:122:VAL:HG23	10	0.26
(1,229)	1:A:123:ALA:H	1:A:122:VAL:HG11	10	0.26
(1,229)	1:A:123:ALA:H	1:A:122:VAL:HG12	10	0.26
(1,229)	1:A:123:ALA:H	1:A:122:VAL:HG13	10	0.26
(1,229)	1:A:123:ALA:H	1:A:122:VAL:HG21	10	0.26
(1,229)	1:A:123:ALA:H	1:A:122:VAL:HG22	10	0.26
(1,229)	1:A:123:ALA:H	1:A:122:VAL:HG23	10	0.26
(1,221)	1:A:118:ALA:H	1:A:117:CYS:HB2	6	0.26
(1,221)	1:A:118:ALA:H	1:A:117:CYS:HB3	6	0.26
(1,2044)	1:A:122:VAL:HG21	1:A:117:CYS:HB2	3	0.26
(1,2044)	1:A:122:VAL:HG22	1:A:117:CYS:HB2	3	0.26
(1,2044)	1:A:122:VAL:HG23	1:A:117:CYS:HB2	3	0.26
(1,2017)	1:A:63:VAL:HG11	1:A:89:LEU:HA	4	0.26
(1,2017)	1:A:63:VAL:HG12	1:A:89:LEU:HA	4	0.26
(1,2017)	1:A:63:VAL:HG13	1:A:89:LEU:HA	4	0.26
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD11	1:A:83:LYS:HE2	10	0.26
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD11	1:A:83:LYS:HE3	10	0.26
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD12	1:A:83:LYS:HE2	10	0.26
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD12	1:A:83:LYS:HE3	10	0.26
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD13	1:A:83:LYS:HE2	10	0.26
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD13	1:A:83:LYS:HE3	10	0.26
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD21	1:A:83:LYS:HE2	10	0.26
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD21	1:A:83:LYS:HE3	10	0.26
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD22	1:A:83:LYS:HE2	10	0.26
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD22	1:A:83:LYS:HE3	10	0.26
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD23	1:A:83:LYS:HE2	10	0.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD23	1:A:83:LYS:HE3	10	0.26
(1,2001)	1:A:34:ASN:HB2	1:A:74:VAL:HG11	2	0.26
(1,2001)	1:A:34:ASN:HB2	1:A:74:VAL:HG12	2	0.26
(1,2001)	1:A:34:ASN:HB2	1:A:74:VAL:HG13	2	0.26
(1,197)	1:A:89:LEU:H	1:A:106:GLU:HA	10	0.26
(1,1935)	1:A:94:GLU:HG2	1:A:96:PRO:HB2	4	0.26
(1,1935)	1:A:94:GLU:HG3	1:A:96:PRO:HB2	4	0.26
(1,189)	1:A:104:THR:H	1:A:103:ARG:HG2	5	0.26
(1,189)	1:A:104:THR:H	1:A:103:ARG:HG3	5	0.26
(1,1795)	1:A:92:ASN:HD21	1:A:90:VAL:HG11	7	0.26
(1,1795)	1:A:92:ASN:HD21	1:A:90:VAL:HG12	7	0.26
(1,1795)	1:A:92:ASN:HD21	1:A:90:VAL:HG13	7	0.26
(1,1795)	1:A:92:ASN:HD21	1:A:90:VAL:HG21	7	0.26
(1,1795)	1:A:92:ASN:HD21	1:A:90:VAL:HG22	7	0.26
(1,1795)	1:A:92:ASN:HD21	1:A:90:VAL:HG23	7	0.26
(1,1792)	1:A:72:GLY:H	1:A:75:ASN:HA	10	0.26
(1,179)	1:A:97:ASP:H	1:A:95:LEU:HB2	7	0.26
(1,179)	1:A:97:ASP:H	1:A:95:LEU:HB3	7	0.26
(1,1753)	1:A:27:GLN:H	1:A:26:PRO:HD2	3	0.26
(1,170)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:HG11	4	0.26
(1,170)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:HG12	4	0.26
(1,170)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:HG13	4	0.26
(1,170)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:HG21	4	0.26
(1,170)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:HG22	4	0.26
(1,170)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:HG23	4	0.26
(1,169)	1:A:81:PHE:H	1:A:91:VAL:HG11	3	0.26
(1,169)	1:A:81:PHE:H	1:A:91:VAL:HG12	3	0.26
(1,169)	1:A:81:PHE:H	1:A:91:VAL:HG13	3	0.26
(1,169)	1:A:81:PHE:H	1:A:91:VAL:HG21	3	0.26
(1,169)	1:A:81:PHE:H	1:A:91:VAL:HG22	3	0.26
(1,169)	1:A:81:PHE:H	1:A:91:VAL:HG23	3	0.26
(1,1628)	1:A:12:LYS:HG2	1:A:126:TYR:HD1	8	0.26
(1,1628)	1:A:12:LYS:HG3	1:A:126:TYR:HD1	8	0.26
(1,1627)	1:A:12:LYS:HG2	1:A:126:TYR:HD1	8	0.26
(1,1627)	1:A:12:LYS:HG3	1:A:126:TYR:HD1	8	0.26
(1,126)	1:A:60:THR:H	1:A:60:THR:HB	2	0.26
(1,1210)	1:A:72:GLY:H	1:A:74:VAL:HB	9	0.26
(1,109)	1:A:53:SER:H	1:A:52:LYS:HG2	5	0.26
(1,109)	1:A:53:SER:H	1:A:52:LYS:HG3	5	0.26
(3,51)	1:A:106:GLU:N	1:A:113:VAL:O	7	0.25
(3,51)	1:A:106:GLU:N	1:A:113:VAL:O	8	0.25
(3,51)	1:A:106:GLU:N	1:A:113:VAL:O	9	0.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,11)	1:A:12:LYS:N	1:A:126:TYR:O	10	0.25
(2,5)	1:A:94:GLU:H	1:A:80:SER:HA	4	0.25
(2,5)	1:A:94:GLU:H	1:A:80:SER:HA	9	0.25
(1,96)	1:A:45:ASN:HD21	1:A:45:ASN:HD22	2	0.25
(1,96)	1:A:45:ASN:HD22	1:A:45:ASN:HD21	2	0.25
(1,95)	1:A:45:ASN:HD21	1:A:45:ASN:HD22	2	0.25
(1,95)	1:A:45:ASN:HD22	1:A:45:ASN:HD21	2	0.25
(1,94)	1:A:45:ASN:HD21	1:A:45:ASN:HD22	2	0.25
(1,94)	1:A:45:ASN:HD22	1:A:45:ASN:HD21	2	0.25
(1,93)	1:A:45:ASN:HD21	1:A:45:ASN:HD22	2	0.25
(1,93)	1:A:45:ASN:HD22	1:A:45:ASN:HD21	2	0.25
(1,70)	1:A:33:ALA:H	1:A:32:LYS:HA	7	0.25
(1,429)	1:A:22:ALA:H	1:A:20:LEU:HA	8	0.25
(1,370)	1:A:5:ALA:H	1:A:4:LEU:HD21	1	0.25
(1,370)	1:A:5:ALA:H	1:A:4:LEU:HD22	1	0.25
(1,370)	1:A:5:ALA:H	1:A:4:LEU:HD23	1	0.25
(1,289)	1:A:92:ASN:HA	1:A:102:THR:HG21	4	0.25
(1,289)	1:A:92:ASN:HA	1:A:102:THR:HG22	4	0.25
(1,289)	1:A:92:ASN:HA	1:A:102:THR:HG23	4	0.25
(1,285)	1:A:23:LEU:HB2	1:A:95:LEU:HB2	8	0.25
(1,285)	1:A:23:LEU:HB2	1:A:95:LEU:HB3	8	0.25
(1,285)	1:A:23:LEU:HB3	1:A:95:LEU:HB2	8	0.25
(1,285)	1:A:23:LEU:HB3	1:A:95:LEU:HB3	8	0.25
(1,284)	1:A:23:LEU:HB2	1:A:95:LEU:HB2	8	0.25
(1,284)	1:A:23:LEU:HB2	1:A:95:LEU:HB3	8	0.25
(1,284)	1:A:23:LEU:HB3	1:A:95:LEU:HB2	8	0.25
(1,284)	1:A:23:LEU:HB3	1:A:95:LEU:HB3	8	0.25
(1,238)	1:A:124:LYS:H	1:A:124:LYS:HB2	9	0.25
(1,238)	1:A:124:LYS:H	1:A:124:LYS:HB3	9	0.25
(1,237)	1:A:124:LYS:H	1:A:124:LYS:HB2	9	0.25
(1,237)	1:A:124:LYS:H	1:A:124:LYS:HB3	9	0.25
(1,205)	1:A:129:ARG:H	1:A:111:GLY:HA2	3	0.25
(1,205)	1:A:129:ARG:H	1:A:111:GLY:HA3	3	0.25
(1,1981)	1:A:25:VAL:HB	1:A:30:ILE:HG12	2	0.25
(1,197)	1:A:89:LEU:H	1:A:106:GLU:HA	6	0.25
(1,1928)	1:A:84:LEU:HD21	1:A:88:LYS:HG2	4	0.25
(1,1928)	1:A:84:LEU:HD21	1:A:88:LYS:HG3	4	0.25
(1,1928)	1:A:84:LEU:HD22	1:A:88:LYS:HG2	4	0.25
(1,1928)	1:A:84:LEU:HD22	1:A:88:LYS:HG3	4	0.25
(1,1928)	1:A:84:LEU:HD23	1:A:88:LYS:HG2	4	0.25
(1,1928)	1:A:84:LEU:HD23	1:A:88:LYS:HG3	4	0.25
(1,1927)	1:A:88:LYS:HG2	1:A:84:LEU:HD21	4	0.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1927)	1:A:88:LYS:HG2	1:A:84:LEU:HD22	4	0.25
(1,1927)	1:A:88:LYS:HG2	1:A:84:LEU:HD23	4	0.25
(1,1927)	1:A:88:LYS:HG3	1:A:84:LEU:HD21	4	0.25
(1,1927)	1:A:88:LYS:HG3	1:A:84:LEU:HD22	4	0.25
(1,1927)	1:A:88:LYS:HG3	1:A:84:LEU:HD23	4	0.25
(1,1923)	1:A:67:VAL:HG21	1:A:65:GLU:HB2	5	0.25
(1,1923)	1:A:67:VAL:HG22	1:A:65:GLU:HB2	5	0.25
(1,1923)	1:A:67:VAL:HG23	1:A:65:GLU:HB2	5	0.25
(1,1921)	1:A:48:LYS:HD2	1:A:45:ASN:HB3	3	0.25
(1,1921)	1:A:48:LYS:HD3	1:A:45:ASN:HB3	3	0.25
(1,1901)	1:A:32:LYS:HE2	1:A:29:SER:HB2	1	0.25
(1,1901)	1:A:32:LYS:HE3	1:A:29:SER:HB2	1	0.25
(1,1793)	1:A:87:SER:H	1:A:85:GLU:HG2	7	0.25
(1,1793)	1:A:87:SER:H	1:A:85:GLU:HG3	7	0.25
(1,1755)	1:A:60:THR:H	1:A:61:LEU:HG	10	0.25
(1,1718)	1:A:126:TYR:HB2	1:A:12:LYS:HG2	7	0.25
(1,1718)	1:A:126:TYR:HB2	1:A:12:LYS:HG3	7	0.25
(1,1718)	1:A:126:TYR:HB3	1:A:12:LYS:HG2	7	0.25
(1,1718)	1:A:126:TYR:HB3	1:A:12:LYS:HG3	7	0.25
(1,1717)	1:A:126:TYR:HB2	1:A:12:LYS:HG2	7	0.25
(1,1717)	1:A:126:TYR:HB2	1:A:12:LYS:HG3	7	0.25
(1,1717)	1:A:126:TYR:HB3	1:A:12:LYS:HG2	7	0.25
(1,1717)	1:A:126:TYR:HB3	1:A:12:LYS:HG3	7	0.25
(1,170)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:HG11	9	0.25
(1,170)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:HG12	9	0.25
(1,170)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:HG13	9	0.25
(1,170)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:HG21	9	0.25
(1,170)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:HG22	9	0.25
(1,170)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:HG23	9	0.25
(1,164)	1:A:81:PHE:H	1:A:91:VAL:HA	2	0.25
(1,1626)	1:A:12:LYS:HG2	1:A:126:TYR:HB2	7	0.25
(1,1626)	1:A:12:LYS:HG2	1:A:126:TYR:HB3	7	0.25
(1,1626)	1:A:12:LYS:HG3	1:A:126:TYR:HB2	7	0.25
(1,1626)	1:A:12:LYS:HG3	1:A:126:TYR:HB3	7	0.25
(1,1625)	1:A:12:LYS:HG2	1:A:126:TYR:HB2	7	0.25
(1,1625)	1:A:12:LYS:HG2	1:A:126:TYR:HB3	7	0.25
(1,1625)	1:A:12:LYS:HG3	1:A:126:TYR:HB2	7	0.25
(1,1625)	1:A:12:LYS:HG3	1:A:126:TYR:HB3	7	0.25
(1,158)	1:A:88:LYS:H	1:A:87:SER:H	3	0.25
(1,157)	1:A:85:GLU:H	1:A:86:GLY:H	9	0.25
(1,1458)	1:A:115:THR:H	1:A:114:LEU:HG	5	0.25
(1,1249)	1:A:94:GLU:H	1:A:78:ILE:HG21	8	0.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1249)	1:A:94:GLU:H	1:A:78:ILE:HG22	8	0.25
(1,1249)	1:A:94:GLU:H	1:A:78:ILE:HG23	8	0.25
(1,109)	1:A:53:SER:H	1:A:52:LYS:HG2	10	0.25
(1,109)	1:A:53:SER:H	1:A:52:LYS:HG3	10	0.25
(3,15)	1:A:14:GLU:N	1:A:124:LYS:O	1	0.24
(3,15)	1:A:14:GLU:N	1:A:124:LYS:O	5	0.24
(3,15)	1:A:14:GLU:N	1:A:124:LYS:O	10	0.24
(2,5)	1:A:94:GLU:H	1:A:80:SER:HA	2	0.24
(2,5)	1:A:94:GLU:H	1:A:80:SER:HA	3	0.24
(1,96)	1:A:45:ASN:HD21	1:A:45:ASN:HD22	3	0.24
(1,96)	1:A:45:ASN:HD22	1:A:45:ASN:HD21	3	0.24
(1,96)	1:A:45:ASN:HD21	1:A:45:ASN:HD22	5	0.24
(1,96)	1:A:45:ASN:HD22	1:A:45:ASN:HD21	5	0.24
(1,96)	1:A:45:ASN:HD21	1:A:45:ASN:HD22	6	0.24
(1,96)	1:A:45:ASN:HD22	1:A:45:ASN:HD21	6	0.24
(1,96)	1:A:45:ASN:HD21	1:A:45:ASN:HD22	7	0.24
(1,96)	1:A:45:ASN:HD22	1:A:45:ASN:HD21	7	0.24
(1,96)	1:A:45:ASN:HD21	1:A:45:ASN:HD22	8	0.24
(1,96)	1:A:45:ASN:HD22	1:A:45:ASN:HD21	8	0.24
(1,96)	1:A:45:ASN:HD21	1:A:45:ASN:HD22	9	0.24
(1,96)	1:A:45:ASN:HD22	1:A:45:ASN:HD21	9	0.24
(1,96)	1:A:45:ASN:HD21	1:A:45:ASN:HD22	10	0.24
(1,96)	1:A:45:ASN:HD22	1:A:45:ASN:HD21	10	0.24
(1,95)	1:A:45:ASN:HD21	1:A:45:ASN:HD22	3	0.24
(1,95)	1:A:45:ASN:HD22	1:A:45:ASN:HD21	3	0.24
(1,95)	1:A:45:ASN:HD21	1:A:45:ASN:HD22	5	0.24
(1,95)	1:A:45:ASN:HD22	1:A:45:ASN:HD21	5	0.24
(1,95)	1:A:45:ASN:HD21	1:A:45:ASN:HD22	6	0.24
(1,95)	1:A:45:ASN:HD22	1:A:45:ASN:HD21	6	0.24
(1,95)	1:A:45:ASN:HD21	1:A:45:ASN:HD22	7	0.24
(1,95)	1:A:45:ASN:HD22	1:A:45:ASN:HD21	7	0.24
(1,95)	1:A:45:ASN:HD21	1:A:45:ASN:HD22	8	0.24
(1,95)	1:A:45:ASN:HD22	1:A:45:ASN:HD21	8	0.24
(1,95)	1:A:45:ASN:HD21	1:A:45:ASN:HD22	9	0.24
(1,95)	1:A:45:ASN:HD22	1:A:45:ASN:HD21	9	0.24
(1,95)	1:A:45:ASN:HD21	1:A:45:ASN:HD22	10	0.24
(1,95)	1:A:45:ASN:HD22	1:A:45:ASN:HD21	10	0.24
(1,94)	1:A:45:ASN:HD21	1:A:45:ASN:HD22	3	0.24
(1,94)	1:A:45:ASN:HD22	1:A:45:ASN:HD21	3	0.24
(1,94)	1:A:45:ASN:HD21	1:A:45:ASN:HD22	5	0.24
(1,94)	1:A:45:ASN:HD22	1:A:45:ASN:HD21	5	0.24
(1,94)	1:A:45:ASN:HD21	1:A:45:ASN:HD22	6	0.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,94)	1:A:45:ASN:HD22	1:A:45:ASN:HD21	6	0.24
(1,94)	1:A:45:ASN:HD21	1:A:45:ASN:HD22	7	0.24
(1,94)	1:A:45:ASN:HD22	1:A:45:ASN:HD21	7	0.24
(1,94)	1:A:45:ASN:HD21	1:A:45:ASN:HD22	8	0.24
(1,94)	1:A:45:ASN:HD22	1:A:45:ASN:HD21	8	0.24
(1,94)	1:A:45:ASN:HD21	1:A:45:ASN:HD22	9	0.24
(1,94)	1:A:45:ASN:HD22	1:A:45:ASN:HD21	9	0.24
(1,94)	1:A:45:ASN:HD21	1:A:45:ASN:HD22	10	0.24
(1,94)	1:A:45:ASN:HD22	1:A:45:ASN:HD21	10	0.24
(1,93)	1:A:45:ASN:HD21	1:A:45:ASN:HD22	3	0.24
(1,93)	1:A:45:ASN:HD22	1:A:45:ASN:HD21	3	0.24
(1,93)	1:A:45:ASN:HD21	1:A:45:ASN:HD22	5	0.24
(1,93)	1:A:45:ASN:HD22	1:A:45:ASN:HD21	5	0.24
(1,93)	1:A:45:ASN:HD21	1:A:45:ASN:HD22	6	0.24
(1,93)	1:A:45:ASN:HD22	1:A:45:ASN:HD21	6	0.24
(1,93)	1:A:45:ASN:HD21	1:A:45:ASN:HD22	7	0.24
(1,93)	1:A:45:ASN:HD22	1:A:45:ASN:HD21	7	0.24
(1,93)	1:A:45:ASN:HD21	1:A:45:ASN:HD22	8	0.24
(1,93)	1:A:45:ASN:HD22	1:A:45:ASN:HD21	8	0.24
(1,93)	1:A:45:ASN:HD21	1:A:45:ASN:HD22	9	0.24
(1,93)	1:A:45:ASN:HD22	1:A:45:ASN:HD21	9	0.24
(1,93)	1:A:45:ASN:HD21	1:A:45:ASN:HD22	10	0.24
(1,93)	1:A:45:ASN:HD22	1:A:45:ASN:HD21	10	0.24
(1,91)	1:A:8:TYR:H	1:A:43:ILE:HA	4	0.24
(1,724)	1:A:17:GLU:H	1:A:20:LEU:HB2	7	0.24
(1,551)	1:A:83:LYS:H	1:A:83:LYS:HD2	3	0.24
(1,551)	1:A:83:LYS:H	1:A:83:LYS:HD3	3	0.24
(1,551)	1:A:83:LYS:H	1:A:83:LYS:HD2	8	0.24
(1,551)	1:A:83:LYS:H	1:A:83:LYS:HD3	8	0.24
(1,551)	1:A:83:LYS:H	1:A:83:LYS:HD2	9	0.24
(1,551)	1:A:83:LYS:H	1:A:83:LYS:HD3	9	0.24
(1,521)	1:A:69:GLU:H	1:A:68:GLU:HG2	10	0.24
(1,521)	1:A:69:GLU:H	1:A:68:GLU:HG3	10	0.24
(1,5)	1:A:5:ALA:H	1:A:4:LEU:HB2	9	0.24
(1,5)	1:A:5:ALA:H	1:A:4:LEU:HB3	9	0.24
(1,499)	1:A:58:ASN:HD21	1:A:58:ASN:HD22	4	0.24
(1,499)	1:A:58:ASN:HD22	1:A:58:ASN:HD21	4	0.24
(1,499)	1:A:58:ASN:HD21	1:A:58:ASN:HD22	6	0.24
(1,499)	1:A:58:ASN:HD22	1:A:58:ASN:HD21	6	0.24
(1,499)	1:A:58:ASN:HD21	1:A:58:ASN:HD22	9	0.24
(1,499)	1:A:58:ASN:HD22	1:A:58:ASN:HD21	9	0.24
(1,499)	1:A:58:ASN:HD21	1:A:58:ASN:HD22	10	0.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,499)	1:A:58:ASN:HD22	1:A:58:ASN:HD21	10	0.24
(1,498)	1:A:58:ASN:HD21	1:A:58:ASN:HD22	4	0.24
(1,498)	1:A:58:ASN:HD22	1:A:58:ASN:HD21	4	0.24
(1,498)	1:A:58:ASN:HD21	1:A:58:ASN:HD22	6	0.24
(1,498)	1:A:58:ASN:HD22	1:A:58:ASN:HD21	6	0.24
(1,498)	1:A:58:ASN:HD21	1:A:58:ASN:HD22	9	0.24
(1,498)	1:A:58:ASN:HD22	1:A:58:ASN:HD21	9	0.24
(1,498)	1:A:58:ASN:HD21	1:A:58:ASN:HD22	10	0.24
(1,498)	1:A:58:ASN:HD22	1:A:58:ASN:HD21	10	0.24
(1,465)	1:A:34:ASN:HD21	1:A:34:ASN:HD22	5	0.24
(1,465)	1:A:34:ASN:HD22	1:A:34:ASN:HD21	5	0.24
(1,465)	1:A:34:ASN:HD21	1:A:34:ASN:HD22	7	0.24
(1,465)	1:A:34:ASN:HD22	1:A:34:ASN:HD21	7	0.24
(1,465)	1:A:34:ASN:HD21	1:A:34:ASN:HD22	10	0.24
(1,465)	1:A:34:ASN:HD22	1:A:34:ASN:HD21	10	0.24
(1,464)	1:A:34:ASN:HD21	1:A:34:ASN:HD22	5	0.24
(1,464)	1:A:34:ASN:HD22	1:A:34:ASN:HD21	5	0.24
(1,464)	1:A:34:ASN:HD21	1:A:34:ASN:HD22	7	0.24
(1,464)	1:A:34:ASN:HD22	1:A:34:ASN:HD21	7	0.24
(1,464)	1:A:34:ASN:HD21	1:A:34:ASN:HD22	10	0.24
(1,464)	1:A:34:ASN:HD22	1:A:34:ASN:HD21	10	0.24
(1,448)	1:A:31:LYS:H	1:A:30:ILE:HG12	10	0.24
(1,448)	1:A:31:LYS:H	1:A:30:ILE:HG13	10	0.24
(1,43)	1:A:22:ALA:H	1:A:18:GLU:HA	2	0.24
(1,351)	1:A:88:LYS:H	1:A:85:GLU:H	6	0.24
(1,265)	1:A:130:THR:H	1:A:130:THR:HG21	9	0.24
(1,265)	1:A:130:THR:H	1:A:130:THR:HG22	9	0.24
(1,265)	1:A:130:THR:H	1:A:130:THR:HG23	9	0.24
(1,230)	1:A:123:ALA:H	1:A:122:VAL:HG11	2	0.24
(1,230)	1:A:123:ALA:H	1:A:122:VAL:HG12	2	0.24
(1,230)	1:A:123:ALA:H	1:A:122:VAL:HG13	2	0.24
(1,230)	1:A:123:ALA:H	1:A:122:VAL:HG21	2	0.24
(1,230)	1:A:123:ALA:H	1:A:122:VAL:HG22	2	0.24
(1,230)	1:A:123:ALA:H	1:A:122:VAL:HG23	2	0.24
(1,229)	1:A:123:ALA:H	1:A:122:VAL:HG11	2	0.24
(1,229)	1:A:123:ALA:H	1:A:122:VAL:HG12	2	0.24
(1,229)	1:A:123:ALA:H	1:A:122:VAL:HG13	2	0.24
(1,229)	1:A:123:ALA:H	1:A:122:VAL:HG21	2	0.24
(1,229)	1:A:123:ALA:H	1:A:122:VAL:HG22	2	0.24
(1,229)	1:A:123:ALA:H	1:A:122:VAL:HG23	2	0.24
(1,219)	1:A:104:THR:H	1:A:116:MET:HA	3	0.24
(1,214)	1:A:125:ARG:H	1:A:114:LEU:H	7	0.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2059)	1:A:11:GLU:HA	1:A:127:PHE:HA	1	0.24
(1,2052)	1:A:14:GLU:HB2	1:A:126:TYR:HD1	6	0.24
(1,2044)	1:A:122:VAL:HG21	1:A:117:CYS:HB2	8	0.24
(1,2044)	1:A:122:VAL:HG22	1:A:117:CYS:HB2	8	0.24
(1,2044)	1:A:122:VAL:HG23	1:A:117:CYS:HB2	8	0.24
(1,2030)	1:A:113:VAL:HG11	1:A:106:GLU:HB2	3	0.24
(1,2030)	1:A:113:VAL:HG11	1:A:106:GLU:HB3	3	0.24
(1,2030)	1:A:113:VAL:HG12	1:A:106:GLU:HB2	3	0.24
(1,2030)	1:A:113:VAL:HG12	1:A:106:GLU:HB3	3	0.24
(1,2030)	1:A:113:VAL:HG13	1:A:106:GLU:HB2	3	0.24
(1,2030)	1:A:113:VAL:HG13	1:A:106:GLU:HB3	3	0.24
(1,202)	1:A:111:GLY:H	1:A:110:LYS:HB2	2	0.24
(1,202)	1:A:111:GLY:H	1:A:110:LYS:HB3	2	0.24
(1,1922)	1:A:65:GLU:HG2	1:A:63:VAL:HG11	8	0.24
(1,1922)	1:A:65:GLU:HG2	1:A:63:VAL:HG12	8	0.24
(1,1922)	1:A:65:GLU:HG2	1:A:63:VAL:HG13	8	0.24
(1,19)	1:A:128:ILE:H	1:A:10:LEU:HA	4	0.24
(1,183)	1:A:99:ARG:H	1:A:99:ARG:HD2	10	0.24
(1,183)	1:A:99:ARG:H	1:A:99:ARG:HD3	10	0.24
(1,1823)	1:A:34:ASN:HD22	1:A:71:LEU:HB2	3	0.24
(1,1808)	1:A:33:ALA:H	1:A:20:LEU:HD11	1	0.24
(1,1808)	1:A:33:ALA:H	1:A:20:LEU:HD12	1	0.24
(1,1808)	1:A:33:ALA:H	1:A:20:LEU:HD13	1	0.24
(1,179)	1:A:97:ASP:H	1:A:95:LEU:HB2	10	0.24
(1,179)	1:A:97:ASP:H	1:A:95:LEU:HB3	10	0.24
(1,1788)	1:A:47:ASN:H	1:A:45:ASN:HB3	6	0.24
(1,1718)	1:A:126:TYR:HB2	1:A:12:LYS:HG2	8	0.24
(1,1718)	1:A:126:TYR:HB2	1:A:12:LYS:HG3	8	0.24
(1,1718)	1:A:126:TYR:HB3	1:A:12:LYS:HG2	8	0.24
(1,1718)	1:A:126:TYR:HB3	1:A:12:LYS:HG3	8	0.24
(1,1717)	1:A:126:TYR:HB2	1:A:12:LYS:HG2	8	0.24
(1,1717)	1:A:126:TYR:HB2	1:A:12:LYS:HG3	8	0.24
(1,1717)	1:A:126:TYR:HB3	1:A:12:LYS:HG2	8	0.24
(1,1717)	1:A:126:TYR:HB3	1:A:12:LYS:HG3	8	0.24
(1,1639)	1:A:7:THR:H	1:A:130:THR:H	2	0.24
(1,1638)	1:A:130:THR:H	1:A:7:THR:H	2	0.24
(1,1632)	1:A:9:LYS:HA	1:A:127:PHE:HD1	8	0.24
(1,1632)	1:A:9:LYS:HA	1:A:127:PHE:HD2	8	0.24
(1,1626)	1:A:12:LYS:HG2	1:A:126:TYR:HB2	8	0.24
(1,1626)	1:A:12:LYS:HG2	1:A:126:TYR:HB3	8	0.24
(1,1626)	1:A:12:LYS:HG3	1:A:126:TYR:HB2	8	0.24
(1,1626)	1:A:12:LYS:HG3	1:A:126:TYR:HB3	8	0.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1625)	1:A:12:LYS:HG2	1:A:126:TYR:HB2	8	0.24
(1,1625)	1:A:12:LYS:HG2	1:A:126:TYR:HB3	8	0.24
(1,1625)	1:A:12:LYS:HG3	1:A:126:TYR:HB2	8	0.24
(1,1625)	1:A:12:LYS:HG3	1:A:126:TYR:HB3	8	0.24
(1,1566)	1:A:43:ILE:HB	1:A:7:THR:HB	2	0.24
(1,140)	1:A:73:THR:H	1:A:73:THR:HB	1	0.24
(1,1352)	1:A:98:GLY:H	1:A:95:LEU:HD11	2	0.24
(1,1352)	1:A:98:GLY:H	1:A:95:LEU:HD12	2	0.24
(1,1352)	1:A:98:GLY:H	1:A:95:LEU:HD13	2	0.24
(1,1352)	1:A:98:GLY:H	1:A:95:LEU:HD21	2	0.24
(1,1352)	1:A:98:GLY:H	1:A:95:LEU:HD22	2	0.24
(1,1352)	1:A:98:GLY:H	1:A:95:LEU:HD23	2	0.24
(1,129)	1:A:51:PHE:H	1:A:62:ILE:HA	3	0.24
(1,123)	1:A:60:THR:H	1:A:59:SER:HB2	2	0.24
(1,123)	1:A:60:THR:H	1:A:59:SER:HB3	2	0.24
(1,123)	1:A:60:THR:H	1:A:59:SER:HB2	4	0.24
(1,123)	1:A:60:THR:H	1:A:59:SER:HB3	4	0.24
(1,102)	1:A:50:THR:H	1:A:49:PHE:HB2	4	0.24
(1,102)	1:A:50:THR:H	1:A:49:PHE:HB3	4	0.24
(1,972)	1:A:35:SER:H	1:A:31:LYS:HB2	2	0.23
(1,972)	1:A:35:SER:H	1:A:31:LYS:HB3	2	0.23
(1,96)	1:A:45:ASN:HD21	1:A:45:ASN:HD22	1	0.23
(1,96)	1:A:45:ASN:HD22	1:A:45:ASN:HD21	1	0.23
(1,96)	1:A:45:ASN:HD21	1:A:45:ASN:HD22	4	0.23
(1,96)	1:A:45:ASN:HD22	1:A:45:ASN:HD21	4	0.23
(1,95)	1:A:45:ASN:HD21	1:A:45:ASN:HD22	1	0.23
(1,95)	1:A:45:ASN:HD22	1:A:45:ASN:HD21	1	0.23
(1,95)	1:A:45:ASN:HD21	1:A:45:ASN:HD22	4	0.23
(1,95)	1:A:45:ASN:HD22	1:A:45:ASN:HD21	4	0.23
(1,94)	1:A:45:ASN:HD21	1:A:45:ASN:HD22	1	0.23
(1,94)	1:A:45:ASN:HD22	1:A:45:ASN:HD21	1	0.23
(1,94)	1:A:45:ASN:HD21	1:A:45:ASN:HD22	4	0.23
(1,94)	1:A:45:ASN:HD22	1:A:45:ASN:HD21	4	0.23
(1,94)	1:A:45:ASN:HD21	1:A:45:ASN:HD22	4	0.23
(1,93)	1:A:45:ASN:HD21	1:A:45:ASN:HD22	1	0.23
(1,93)	1:A:45:ASN:HD22	1:A:45:ASN:HD21	1	0.23
(1,93)	1:A:45:ASN:HD21	1:A:45:ASN:HD22	4	0.23
(1,93)	1:A:45:ASN:HD22	1:A:45:ASN:HD21	4	0.23
(1,703)	1:A:69:GLU:H	1:A:78:ILE:HD11	8	0.23
(1,703)	1:A:69:GLU:H	1:A:78:ILE:HD12	8	0.23
(1,703)	1:A:69:GLU:H	1:A:78:ILE:HD13	8	0.23
(1,627)	1:A:14:GLU:H	1:A:124:LYS:H	2	0.23
(1,583)	1:A:101:GLY:H	1:A:93:SER:HB2	1	0.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,583)	1:A:101:GLY:H	1:A:93:SER:HB3	1	0.23
(1,552)	1:A:83:LYS:H	1:A:83:LYS:HE2	8	0.23
(1,552)	1:A:83:LYS:H	1:A:83:LYS:HE3	8	0.23
(1,499)	1:A:58:ASN:HD21	1:A:58:ASN:HD22	1	0.23
(1,499)	1:A:58:ASN:HD22	1:A:58:ASN:HD21	1	0.23
(1,499)	1:A:58:ASN:HD21	1:A:58:ASN:HD22	2	0.23
(1,499)	1:A:58:ASN:HD22	1:A:58:ASN:HD21	2	0.23
(1,499)	1:A:58:ASN:HD21	1:A:58:ASN:HD22	3	0.23
(1,499)	1:A:58:ASN:HD22	1:A:58:ASN:HD21	3	0.23
(1,499)	1:A:58:ASN:HD21	1:A:58:ASN:HD22	7	0.23
(1,499)	1:A:58:ASN:HD22	1:A:58:ASN:HD21	7	0.23
(1,499)	1:A:58:ASN:HD21	1:A:58:ASN:HD22	8	0.23
(1,499)	1:A:58:ASN:HD22	1:A:58:ASN:HD21	8	0.23
(1,498)	1:A:58:ASN:HD21	1:A:58:ASN:HD22	1	0.23
(1,498)	1:A:58:ASN:HD22	1:A:58:ASN:HD21	1	0.23
(1,498)	1:A:58:ASN:HD21	1:A:58:ASN:HD22	2	0.23
(1,498)	1:A:58:ASN:HD22	1:A:58:ASN:HD21	2	0.23
(1,498)	1:A:58:ASN:HD21	1:A:58:ASN:HD22	3	0.23
(1,498)	1:A:58:ASN:HD22	1:A:58:ASN:HD21	3	0.23
(1,498)	1:A:58:ASN:HD21	1:A:58:ASN:HD22	7	0.23
(1,498)	1:A:58:ASN:HD22	1:A:58:ASN:HD21	7	0.23
(1,498)	1:A:58:ASN:HD21	1:A:58:ASN:HD22	8	0.23
(1,498)	1:A:58:ASN:HD22	1:A:58:ASN:HD21	8	0.23
(1,465)	1:A:34:ASN:HD21	1:A:34:ASN:HD22	1	0.23
(1,465)	1:A:34:ASN:HD22	1:A:34:ASN:HD21	1	0.23
(1,465)	1:A:34:ASN:HD21	1:A:34:ASN:HD22	2	0.23
(1,465)	1:A:34:ASN:HD22	1:A:34:ASN:HD21	2	0.23
(1,465)	1:A:34:ASN:HD21	1:A:34:ASN:HD22	3	0.23
(1,465)	1:A:34:ASN:HD22	1:A:34:ASN:HD21	3	0.23
(1,465)	1:A:34:ASN:HD21	1:A:34:ASN:HD22	4	0.23
(1,465)	1:A:34:ASN:HD22	1:A:34:ASN:HD21	4	0.23
(1,465)	1:A:34:ASN:HD21	1:A:34:ASN:HD22	6	0.23
(1,465)	1:A:34:ASN:HD22	1:A:34:ASN:HD21	6	0.23
(1,465)	1:A:34:ASN:HD21	1:A:34:ASN:HD22	9	0.23
(1,465)	1:A:34:ASN:HD22	1:A:34:ASN:HD21	9	0.23
(1,464)	1:A:34:ASN:HD21	1:A:34:ASN:HD22	1	0.23
(1,464)	1:A:34:ASN:HD22	1:A:34:ASN:HD21	1	0.23
(1,464)	1:A:34:ASN:HD21	1:A:34:ASN:HD22	2	0.23
(1,464)	1:A:34:ASN:HD22	1:A:34:ASN:HD21	2	0.23
(1,464)	1:A:34:ASN:HD21	1:A:34:ASN:HD22	3	0.23
(1,464)	1:A:34:ASN:HD22	1:A:34:ASN:HD21	3	0.23
(1,464)	1:A:34:ASN:HD21	1:A:34:ASN:HD22	4	0.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,464)	1:A:34:ASN:HD22	1:A:34:ASN:HD21	4	0.23
(1,464)	1:A:34:ASN:HD21	1:A:34:ASN:HD22	6	0.23
(1,464)	1:A:34:ASN:HD22	1:A:34:ASN:HD21	6	0.23
(1,464)	1:A:34:ASN:HD21	1:A:34:ASN:HD22	9	0.23
(1,464)	1:A:34:ASN:HD22	1:A:34:ASN:HD21	9	0.23
(1,447)	1:A:30:ILE:H	1:A:30:ILE:HD11	2	0.23
(1,447)	1:A:30:ILE:H	1:A:30:ILE:HD12	2	0.23
(1,447)	1:A:30:ILE:H	1:A:30:ILE:HD13	2	0.23
(1,409)	1:A:124:LYS:H	1:A:14:GLU:H	2	0.23
(1,394)	1:A:126:TYR:HB2	1:A:113:VAL:HA	7	0.23
(1,394)	1:A:126:TYR:HB2	1:A:113:VAL:HA	9	0.23
(1,385)	1:A:33:ALA:HB1	1:A:25:VAL:HG11	8	0.23
(1,385)	1:A:33:ALA:HB1	1:A:25:VAL:HG12	8	0.23
(1,385)	1:A:33:ALA:HB1	1:A:25:VAL:HG13	8	0.23
(1,385)	1:A:33:ALA:HB2	1:A:25:VAL:HG11	8	0.23
(1,385)	1:A:33:ALA:HB2	1:A:25:VAL:HG12	8	0.23
(1,385)	1:A:33:ALA:HB2	1:A:25:VAL:HG13	8	0.23
(1,385)	1:A:33:ALA:HB3	1:A:25:VAL:HG11	8	0.23
(1,385)	1:A:33:ALA:HB3	1:A:25:VAL:HG12	8	0.23
(1,385)	1:A:33:ALA:HB3	1:A:25:VAL:HG13	8	0.23
(1,381)	1:A:39:VAL:HG11	1:A:9:LYS:HG2	1	0.23
(1,381)	1:A:39:VAL:HG12	1:A:9:LYS:HG2	1	0.23
(1,381)	1:A:39:VAL:HG13	1:A:9:LYS:HG2	1	0.23
(1,381)	1:A:39:VAL:HG11	1:A:9:LYS:HG2	3	0.23
(1,381)	1:A:39:VAL:HG12	1:A:9:LYS:HG2	3	0.23
(1,381)	1:A:39:VAL:HG13	1:A:9:LYS:HG2	3	0.23
(1,351)	1:A:88:LYS:H	1:A:85:GLU:H	7	0.23
(1,347)	1:A:43:ILE:H	1:A:50:THR:HB	5	0.23
(1,270)	1:A:73:THR:HG21	1:A:33:ALA:HB1	7	0.23
(1,270)	1:A:73:THR:HG21	1:A:33:ALA:HB2	7	0.23
(1,270)	1:A:73:THR:HG21	1:A:33:ALA:HB3	7	0.23
(1,270)	1:A:73:THR:HG22	1:A:33:ALA:HB1	7	0.23
(1,270)	1:A:73:THR:HG22	1:A:33:ALA:HB2	7	0.23
(1,270)	1:A:73:THR:HG22	1:A:33:ALA:HB3	7	0.23
(1,270)	1:A:73:THR:HG23	1:A:33:ALA:HB1	7	0.23
(1,270)	1:A:73:THR:HG23	1:A:33:ALA:HB2	7	0.23
(1,270)	1:A:73:THR:HG23	1:A:33:ALA:HB3	7	0.23
(1,25)	1:A:128:ILE:H	1:A:11:GLU:HG2	3	0.23
(1,25)	1:A:128:ILE:H	1:A:11:GLU:HG3	3	0.23
(1,233)	1:A:19:TYR:H	1:A:123:ALA:HB1	2	0.23
(1,233)	1:A:19:TYR:H	1:A:123:ALA:HB2	2	0.23
(1,233)	1:A:19:TYR:H	1:A:123:ALA:HB3	2	0.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,214)	1:A:125:ARG:H	1:A:114:LEU:H	2	0.23
(1,213)	1:A:125:ARG:H	1:A:114:LEU:HB2	3	0.23
(1,213)	1:A:125:ARG:H	1:A:114:LEU:HB3	3	0.23
(1,212)	1:A:125:ARG:H	1:A:114:LEU:HB2	3	0.23
(1,212)	1:A:125:ARG:H	1:A:114:LEU:HB3	3	0.23
(1,2052)	1:A:14:GLU:HB2	1:A:126:TYR:HD1	9	0.23
(1,1953)	1:A:111:GLY:HA3	1:A:8:TYR:HD1	3	0.23
(1,1953)	1:A:111:GLY:HA3	1:A:8:TYR:HD2	3	0.23
(1,1951)	1:A:87:SER:HB3	1:A:4:LEU:HD21	8	0.23
(1,1951)	1:A:87:SER:HB3	1:A:4:LEU:HD22	8	0.23
(1,1951)	1:A:87:SER:HB3	1:A:4:LEU:HD23	8	0.23
(1,192)	1:A:104:THR:H	1:A:104:THR:HB	10	0.23
(1,1845)	1:A:17:GLU:H	1:A:123:ALA:HB1	7	0.23
(1,1845)	1:A:17:GLU:H	1:A:123:ALA:HB2	7	0.23
(1,1845)	1:A:17:GLU:H	1:A:123:ALA:HB3	7	0.23
(1,1779)	1:A:15:ASN:HD22	1:A:18:GLU:HB3	6	0.23
(1,165)	1:A:83:LYS:H	1:A:91:VAL:HA	8	0.23
(1,1631)	1:A:113:VAL:HG21	1:A:126:TYR:HE1	1	0.23
(1,1631)	1:A:113:VAL:HG22	1:A:126:TYR:HE1	1	0.23
(1,1631)	1:A:113:VAL:HG23	1:A:126:TYR:HE1	1	0.23
(1,140)	1:A:73:THR:H	1:A:73:THR:HB	6	0.23
(1,139)	1:A:33:ALA:H	1:A:73:THR:HB	6	0.23
(1,1356)	1:A:99:ARG:H	1:A:95:LEU:HG	10	0.23
(1,1322)	1:A:105:TYR:H	1:A:89:LEU:HG	7	0.23
(1,132)	1:A:63:VAL:H	1:A:62:ILE:HG21	4	0.23
(1,132)	1:A:63:VAL:H	1:A:62:ILE:HG22	4	0.23
(1,132)	1:A:63:VAL:H	1:A:62:ILE:HG23	4	0.23
(1,124)	1:A:53:SER:H	1:A:59:SER:H	5	0.23
(1,113)	1:A:59:SER:H	1:A:53:SER:H	5	0.23
(1,747)	1:A:9:LYS:HB2	1:A:39:VAL:HG11	4	0.22
(1,747)	1:A:9:LYS:HB2	1:A:39:VAL:HG12	4	0.22
(1,747)	1:A:9:LYS:HB2	1:A:39:VAL:HG13	4	0.22
(1,747)	1:A:9:LYS:HB3	1:A:39:VAL:HG11	4	0.22
(1,747)	1:A:9:LYS:HB3	1:A:39:VAL:HG12	4	0.22
(1,747)	1:A:9:LYS:HB3	1:A:39:VAL:HG13	4	0.22
(1,732)	1:A:33:ALA:H	1:A:74:VAL:HG11	10	0.22
(1,732)	1:A:33:ALA:H	1:A:74:VAL:HG12	10	0.22
(1,732)	1:A:33:ALA:H	1:A:74:VAL:HG13	10	0.22
(1,713)	1:A:51:PHE:H	1:A:61:LEU:HB2	3	0.22
(1,713)	1:A:51:PHE:H	1:A:61:LEU:HB3	3	0.22
(1,708)	1:A:43:ILE:HB	1:A:7:THR:HG21	1	0.22
(1,708)	1:A:43:ILE:HB	1:A:7:THR:HG22	1	0.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,708)	1:A:43:ILE:HB	1:A:7:THR:HG23	1	0.22
(1,649)	1:A:44:VAL:HB	1:A:49:PHE:HA	7	0.22
(1,648)	1:A:50:THR:HB	1:A:43:ILE:HB	9	0.22
(1,63)	1:A:32:LYS:H	1:A:31:LYS:HA	1	0.22
(1,63)	1:A:32:LYS:H	1:A:31:LYS:HA	3	0.22
(1,594)	1:A:93:SER:H	1:A:101:GLY:H	1	0.22
(1,568)	1:A:85:GLU:H	1:A:88:LYS:HG2	9	0.22
(1,568)	1:A:85:GLU:H	1:A:88:LYS:HG3	9	0.22
(1,499)	1:A:58:ASN:HD21	1:A:58:ASN:HD22	5	0.22
(1,499)	1:A:58:ASN:HD22	1:A:58:ASN:HD21	5	0.22
(1,498)	1:A:58:ASN:HD21	1:A:58:ASN:HD22	5	0.22
(1,498)	1:A:58:ASN:HD22	1:A:58:ASN:HD21	5	0.22
(1,38)	1:A:15:ASN:H	1:A:15:ASN:HD21	5	0.22
(1,38)	1:A:15:ASN:H	1:A:15:ASN:HD22	5	0.22
(1,38)	1:A:15:ASN:H	1:A:15:ASN:HD21	8	0.22
(1,38)	1:A:15:ASN:H	1:A:15:ASN:HD22	8	0.22
(1,376)	1:A:106:GLU:H	1:A:113:VAL:HB	6	0.22
(1,37)	1:A:16:PHE:H	1:A:15:ASN:HB2	9	0.22
(1,37)	1:A:16:PHE:H	1:A:15:ASN:HB3	9	0.22
(1,264)	1:A:129:ARG:H	1:A:129:ARG:HD2	10	0.22
(1,264)	1:A:129:ARG:H	1:A:129:ARG:HD3	10	0.22
(1,245)	1:A:125:ARG:H	1:A:125:ARG:HD2	5	0.22
(1,245)	1:A:125:ARG:H	1:A:125:ARG:HD3	5	0.22
(1,238)	1:A:124:LYS:H	1:A:124:LYS:HB2	10	0.22
(1,238)	1:A:124:LYS:H	1:A:124:LYS:HB3	10	0.22
(1,237)	1:A:124:LYS:H	1:A:124:LYS:HB2	10	0.22
(1,237)	1:A:124:LYS:H	1:A:124:LYS:HB3	10	0.22
(1,216)	1:A:125:ARG:H	1:A:115:THR:HA	2	0.22
(1,216)	1:A:125:ARG:H	1:A:115:THR:HA	3	0.22
(1,210)	1:A:127:PHE:H	1:A:113:VAL:HA	9	0.22
(1,201)	1:A:110:LYS:H	1:A:109:ASP:HB2	5	0.22
(1,201)	1:A:110:LYS:H	1:A:109:ASP:HB3	5	0.22
(1,1953)	1:A:111:GLY:HA3	1:A:8:TYR:HD1	10	0.22
(1,1953)	1:A:111:GLY:HA3	1:A:8:TYR:HD2	10	0.22
(1,1949)	1:A:87:SER:HA	1:A:4:LEU:HD21	10	0.22
(1,1949)	1:A:87:SER:HA	1:A:4:LEU:HD22	10	0.22
(1,1949)	1:A:87:SER:HA	1:A:4:LEU:HD23	10	0.22
(1,1877)	1:A:3:GLN:HB3	1:A:6:GLY:HA2	9	0.22
(1,1813)	1:A:3:GLN:HE22	1:A:45:ASN:HA	4	0.22
(1,1799)	1:A:47:ASN:HD21	1:A:2:VAL:HB	10	0.22
(1,1786)	1:A:31:LYS:H	1:A:27:GLN:HB2	6	0.22
(1,1760)	1:A:77:ASN:HD21	1:A:76:MET:HB2	2	0.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1703)	1:A:104:THR:H	1:A:115:THR:HB	5	0.22
(1,165)	1:A:83:LYS:H	1:A:91:VAL:HA	2	0.22
(1,1646)	1:A:14:GLU:H	1:A:124:LYS:HB2	8	0.22
(1,1646)	1:A:14:GLU:H	1:A:124:LYS:HB3	8	0.22
(1,1645)	1:A:14:GLU:H	1:A:124:LYS:HB2	8	0.22
(1,1645)	1:A:14:GLU:H	1:A:124:LYS:HB3	8	0.22
(1,1628)	1:A:12:LYS:HG2	1:A:126:TYR:HD1	7	0.22
(1,1628)	1:A:12:LYS:HG3	1:A:126:TYR:HD1	7	0.22
(1,1627)	1:A:12:LYS:HG2	1:A:126:TYR:HD1	7	0.22
(1,1627)	1:A:12:LYS:HG3	1:A:126:TYR:HD1	7	0.22
(1,1356)	1:A:99:ARG:H	1:A:95:LEU:HG	1	0.22
(3,49)	1:A:101:GLY:N	1:A:93:SER:O	1	0.21
(3,33)	1:A:48:LYS:N	1:A:45:ASN:O	4	0.21
(3,24)	1:A:21:ALA:H	1:A:17:GLU:O	2	0.21
(3,11)	1:A:12:LYS:N	1:A:126:TYR:O	1	0.21
(1,91)	1:A:8:TYR:H	1:A:43:ILE:HA	9	0.21
(1,883)	1:A:19:TYR:H	1:A:20:LEU:HD11	2	0.21
(1,883)	1:A:19:TYR:H	1:A:20:LEU:HD12	2	0.21
(1,883)	1:A:19:TYR:H	1:A:20:LEU:HD13	2	0.21
(1,883)	1:A:19:TYR:H	1:A:20:LEU:HD21	2	0.21
(1,883)	1:A:19:TYR:H	1:A:20:LEU:HD22	2	0.21
(1,883)	1:A:19:TYR:H	1:A:20:LEU:HD23	2	0.21
(1,790)	1:A:44:VAL:H	1:A:6:GLY:HA2	6	0.21
(1,790)	1:A:44:VAL:H	1:A:6:GLY:HA3	6	0.21
(1,753)	1:A:79:LYS:HG2	1:A:68:GLU:HA	4	0.21
(1,725)	1:A:29:SER:H	1:A:32:LYS:HG2	8	0.21
(1,706)	1:A:65:GLU:HB2	1:A:62:ILE:HD11	4	0.21
(1,706)	1:A:65:GLU:HB2	1:A:62:ILE:HD12	4	0.21
(1,706)	1:A:65:GLU:HB2	1:A:62:ILE:HD13	4	0.21
(1,706)	1:A:65:GLU:HB3	1:A:62:ILE:HD11	4	0.21
(1,706)	1:A:65:GLU:HB3	1:A:62:ILE:HD12	4	0.21
(1,706)	1:A:65:GLU:HB3	1:A:62:ILE:HD13	4	0.21
(1,70)	1:A:33:ALA:H	1:A:32:LYS:HA	6	0.21
(1,695)	1:A:51:PHE:H	1:A:61:LEU:HG	7	0.21
(1,64)	1:A:33:ALA:H	1:A:31:LYS:HA	5	0.21
(1,635)	1:A:129:ARG:H	1:A:128:ILE:HD11	10	0.21
(1,635)	1:A:129:ARG:H	1:A:128:ILE:HD12	10	0.21
(1,635)	1:A:129:ARG:H	1:A:128:ILE:HD13	10	0.21
(1,627)	1:A:14:GLU:H	1:A:124:LYS:H	5	0.21
(1,572)	1:A:84:LEU:H	1:A:89:LEU:HG	8	0.21
(1,409)	1:A:124:LYS:H	1:A:14:GLU:H	5	0.21
(1,377)	1:A:74:VAL:HG11	1:A:71:LEU:HB2	9	0.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,377)	1:A:74:VAL:HG12	1:A:71:LEU:HB2	9	0.21
(1,377)	1:A:74:VAL:HG13	1:A:71:LEU:HB2	9	0.21
(1,351)	1:A:88:LYS:H	1:A:85:GLU:H	10	0.21
(1,240)	1:A:124:LYS:H	1:A:124:LYS:HD2	6	0.21
(1,240)	1:A:124:LYS:H	1:A:124:LYS:HD3	6	0.21
(1,219)	1:A:104:THR:H	1:A:116:MET:HA	4	0.21
(1,216)	1:A:125:ARG:H	1:A:115:THR:HA	7	0.21
(1,2039)	1:A:125:ARG:HB3	1:A:114:LEU:HG	10	0.21
(1,2032)	1:A:105:TYR:HB2	1:A:112:PHE:HA	1	0.21
(1,2032)	1:A:105:TYR:HB3	1:A:112:PHE:HA	1	0.21
(1,1910)	1:A:27:GLN:HG2	1:A:31:LYS:HG2	3	0.21
(1,1910)	1:A:27:GLN:HG3	1:A:31:LYS:HG2	3	0.21
(1,19)	1:A:128:ILE:H	1:A:10:LEU:HA	1	0.21
(1,1898)	1:A:31:LYS:HG2	1:A:27:GLN:HG2	3	0.21
(1,1898)	1:A:31:LYS:HG2	1:A:27:GLN:HG3	3	0.21
(1,189)	1:A:104:THR:H	1:A:103:ARG:HG2	7	0.21
(1,189)	1:A:104:THR:H	1:A:103:ARG:HG3	7	0.21
(1,1845)	1:A:17:GLU:H	1:A:123:ALA:HB1	5	0.21
(1,1845)	1:A:17:GLU:H	1:A:123:ALA:HB2	5	0.21
(1,1845)	1:A:17:GLU:H	1:A:123:ALA:HB3	5	0.21
(1,1812)	1:A:49:PHE:H	1:A:44:VAL:HG11	8	0.21
(1,1812)	1:A:49:PHE:H	1:A:44:VAL:HG12	8	0.21
(1,1812)	1:A:49:PHE:H	1:A:44:VAL:HG13	8	0.21
(1,1799)	1:A:47:ASN:HD21	1:A:2:VAL:HB	8	0.21
(1,1792)	1:A:72:GLY:H	1:A:75:ASN:HA	7	0.21
(1,179)	1:A:97:ASP:H	1:A:95:LEU:HB2	8	0.21
(1,179)	1:A:97:ASP:H	1:A:95:LEU:HB3	8	0.21
(1,1765)	1:A:3:GLN:HE22	1:A:5:ALA:HB1	5	0.21
(1,1765)	1:A:3:GLN:HE22	1:A:5:ALA:HB2	5	0.21
(1,1765)	1:A:3:GLN:HE22	1:A:5:ALA:HB3	5	0.21
(1,1718)	1:A:126:TYR:HB2	1:A:12:LYS:HG2	10	0.21
(1,1718)	1:A:126:TYR:HB2	1:A:12:LYS:HG3	10	0.21
(1,1718)	1:A:126:TYR:HB3	1:A:12:LYS:HG2	10	0.21
(1,1718)	1:A:126:TYR:HB3	1:A:12:LYS:HG3	10	0.21
(1,1717)	1:A:126:TYR:HB2	1:A:12:LYS:HG2	10	0.21
(1,1717)	1:A:126:TYR:HB2	1:A:12:LYS:HG3	10	0.21
(1,1717)	1:A:126:TYR:HB3	1:A:12:LYS:HG2	10	0.21
(1,1717)	1:A:126:TYR:HB3	1:A:12:LYS:HG3	10	0.21
(1,168)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:HB	1	0.21
(1,168)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:HB	8	0.21
(1,1632)	1:A:9:LYS:HA	1:A:127:PHE:HD1	4	0.21
(1,1632)	1:A:9:LYS:HA	1:A:127:PHE:HD2	4	0.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1626)	1:A:12:LYS:HG2	1:A:126:TYR:HB2	10	0.21
(1,1626)	1:A:12:LYS:HG2	1:A:126:TYR:HB3	10	0.21
(1,1626)	1:A:12:LYS:HG3	1:A:126:TYR:HB2	10	0.21
(1,1626)	1:A:12:LYS:HG3	1:A:126:TYR:HB3	10	0.21
(1,1625)	1:A:12:LYS:HG2	1:A:126:TYR:HB2	10	0.21
(1,1625)	1:A:12:LYS:HG2	1:A:126:TYR:HB3	10	0.21
(1,1625)	1:A:12:LYS:HG3	1:A:126:TYR:HB2	10	0.21
(1,1625)	1:A:12:LYS:HG3	1:A:126:TYR:HB3	10	0.21
(1,1456)	1:A:104:THR:H	1:A:114:LEU:HD11	8	0.21
(1,1456)	1:A:104:THR:H	1:A:114:LEU:HD12	8	0.21
(1,1456)	1:A:104:THR:H	1:A:114:LEU:HD13	8	0.21
(1,1456)	1:A:104:THR:H	1:A:114:LEU:HD21	8	0.21
(1,1456)	1:A:104:THR:H	1:A:114:LEU:HD22	8	0.21
(1,1456)	1:A:104:THR:H	1:A:114:LEU:HD23	8	0.21
(1,145)	1:A:94:GLU:H	1:A:79:LYS:H	1	0.21
(1,1285)	1:A:86:GLY:H	1:A:84:LEU:HG	2	0.21
(1,1219)	1:A:76:MET:H	1:A:75:ASN:HD21	6	0.21
(1,1219)	1:A:76:MET:H	1:A:75:ASN:HD22	6	0.21
(3,33)	1:A:48:LYS:N	1:A:45:ASN:O	1	0.2
(2,3)	1:A:59:SER:H	1:A:54:SER:HA	8	0.2
(1,91)	1:A:8:TYR:H	1:A:43:ILE:HA	8	0.2
(1,91)	1:A:8:TYR:H	1:A:43:ILE:HA	10	0.2
(1,766)	1:A:124:LYS:HA	1:A:115:THR:H	5	0.2
(1,747)	1:A:9:LYS:HB2	1:A:39:VAL:HG11	7	0.2
(1,747)	1:A:9:LYS:HB2	1:A:39:VAL:HG12	7	0.2
(1,747)	1:A:9:LYS:HB2	1:A:39:VAL:HG13	7	0.2
(1,747)	1:A:9:LYS:HB3	1:A:39:VAL:HG11	7	0.2
(1,747)	1:A:9:LYS:HB3	1:A:39:VAL:HG12	7	0.2
(1,747)	1:A:9:LYS:HB3	1:A:39:VAL:HG13	7	0.2
(1,725)	1:A:29:SER:H	1:A:32:LYS:HG2	6	0.2
(1,648)	1:A:50:THR:HB	1:A:43:ILE:HB	6	0.2
(1,644)	1:A:126:TYR:HB2	1:A:12:LYS:HB2	8	0.2
(1,644)	1:A:126:TYR:HB2	1:A:12:LYS:HB3	8	0.2
(1,644)	1:A:126:TYR:HB3	1:A:12:LYS:HB2	8	0.2
(1,644)	1:A:126:TYR:HB3	1:A:12:LYS:HB3	8	0.2
(1,643)	1:A:126:TYR:HB2	1:A:12:LYS:HB2	8	0.2
(1,643)	1:A:126:TYR:HB2	1:A:12:LYS:HB3	8	0.2
(1,643)	1:A:126:TYR:HB3	1:A:12:LYS:HB2	8	0.2
(1,643)	1:A:126:TYR:HB3	1:A:12:LYS:HB3	8	0.2
(1,614)	1:A:121:MET:H	1:A:118:ALA:HA	6	0.2
(1,441)	1:A:29:SER:H	1:A:27:GLN:HA	6	0.2
(1,381)	1:A:39:VAL:HG11	1:A:9:LYS:HG2	2	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,381)	1:A:39:VAL:HG12	1:A:9:LYS:HG2	2	0.2
(1,381)	1:A:39:VAL:HG13	1:A:9:LYS:HG2	2	0.2
(1,37)	1:A:16:PHE:H	1:A:15:ASN:HB2	1	0.2
(1,37)	1:A:16:PHE:H	1:A:15:ASN:HB3	1	0.2
(1,37)	1:A:16:PHE:H	1:A:15:ASN:HB2	3	0.2
(1,37)	1:A:16:PHE:H	1:A:15:ASN:HB3	3	0.2
(1,347)	1:A:43:ILE:H	1:A:50:THR:HB	8	0.2
(1,281)	1:A:84:LEU:HA	1:A:89:LEU:HB2	5	0.2
(1,281)	1:A:84:LEU:HA	1:A:89:LEU:HB3	5	0.2
(1,257)	1:A:112:PHE:H	1:A:128:ILE:HA	5	0.2
(1,230)	1:A:123:ALA:H	1:A:122:VAL:HG11	5	0.2
(1,230)	1:A:123:ALA:H	1:A:122:VAL:HG12	5	0.2
(1,230)	1:A:123:ALA:H	1:A:122:VAL:HG13	5	0.2
(1,230)	1:A:123:ALA:H	1:A:122:VAL:HG21	5	0.2
(1,230)	1:A:123:ALA:H	1:A:122:VAL:HG22	5	0.2
(1,230)	1:A:123:ALA:H	1:A:122:VAL:HG23	5	0.2
(1,229)	1:A:123:ALA:H	1:A:122:VAL:HG11	5	0.2
(1,229)	1:A:123:ALA:H	1:A:122:VAL:HG12	5	0.2
(1,229)	1:A:123:ALA:H	1:A:122:VAL:HG13	5	0.2
(1,229)	1:A:123:ALA:H	1:A:122:VAL:HG21	5	0.2
(1,229)	1:A:123:ALA:H	1:A:122:VAL:HG22	5	0.2
(1,229)	1:A:123:ALA:H	1:A:122:VAL:HG23	5	0.2
(1,221)	1:A:118:ALA:H	1:A:117:CYS:HB2	8	0.2
(1,221)	1:A:118:ALA:H	1:A:117:CYS:HB3	8	0.2
(1,208)	1:A:127:PHE:H	1:A:112:PHE:HB2	3	0.2
(1,208)	1:A:127:PHE:H	1:A:112:PHE:HB3	3	0.2
(1,2052)	1:A:14:GLU:HB2	1:A:126:TYR:HD1	8	0.2
(1,2051)	1:A:12:LYS:HE2	1:A:126:TYR:HD1	6	0.2
(1,2051)	1:A:12:LYS:HE3	1:A:126:TYR:HD1	6	0.2
(1,2045)	1:A:19:TYR:HA	1:A:121:MET:HB2	3	0.2
(1,2044)	1:A:122:VAL:HG21	1:A:117:CYS:HB2	5	0.2
(1,2044)	1:A:122:VAL:HG22	1:A:117:CYS:HB2	5	0.2
(1,2044)	1:A:122:VAL:HG23	1:A:117:CYS:HB2	5	0.2
(1,2023)	1:A:78:ILE:HG13	1:A:93:SER:HB3	4	0.2
(1,1976)	1:A:75:ASN:HB2	1:A:25:VAL:HG11	9	0.2
(1,1976)	1:A:75:ASN:HB2	1:A:25:VAL:HG12	9	0.2
(1,1976)	1:A:75:ASN:HB2	1:A:25:VAL:HG13	9	0.2
(1,1974)	1:A:121:MET:HB2	1:A:19:TYR:HA	3	0.2
(1,1957)	1:A:114:LEU:HD21	1:A:10:LEU:HA	5	0.2
(1,1957)	1:A:114:LEU:HD22	1:A:10:LEU:HA	5	0.2
(1,1957)	1:A:114:LEU:HD23	1:A:10:LEU:HA	5	0.2
(1,1921)	1:A:48:LYS:HD2	1:A:45:ASN:HB3	2	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1921)	1:A:48:LYS:HD3	1:A:45:ASN:HB3	2	0.2
(1,1877)	1:A:3:GLN:HB3	1:A:6:GLY:HA2	1	0.2
(1,1807)	1:A:122:VAL:H	1:A:15:ASN:HD21	1	0.2
(1,1786)	1:A:31:LYS:H	1:A:27:GLN:HB2	1	0.2
(1,165)	1:A:83:LYS:H	1:A:91:VAL:HA	10	0.2
(1,1527)	1:A:47:ASN:HA	1:A:2:VAL:HB	5	0.2
(1,1494)	1:A:124:LYS:H	1:A:124:LYS:HE2	8	0.2
(1,1494)	1:A:124:LYS:H	1:A:124:LYS:HE3	8	0.2
(1,145)	1:A:94:GLU:H	1:A:79:LYS:H	8	0.2
(1,142)	1:A:75:ASN:H	1:A:75:ASN:HB2	7	0.2
(1,142)	1:A:75:ASN:H	1:A:75:ASN:HB3	7	0.2
(1,1337)	1:A:79:LYS:H	1:A:93:SER:HB2	2	0.2
(1,1337)	1:A:79:LYS:H	1:A:93:SER:HB3	2	0.2
(1,132)	1:A:63:VAL:H	1:A:62:ILE:HG21	7	0.2
(1,132)	1:A:63:VAL:H	1:A:62:ILE:HG22	7	0.2
(1,132)	1:A:63:VAL:H	1:A:62:ILE:HG23	7	0.2
(1,128)	1:A:51:PHE:H	1:A:61:LEU:H	10	0.2
(1,124)	1:A:53:SER:H	1:A:59:SER:H	1	0.2
(1,1219)	1:A:76:MET:H	1:A:75:ASN:HD21	4	0.2
(1,1219)	1:A:76:MET:H	1:A:75:ASN:HD22	4	0.2
(1,113)	1:A:59:SER:H	1:A:53:SER:H	1	0.2
(1,1053)	1:A:48:LYS:H	1:A:45:ASN:HA	1	0.2
(1,1053)	1:A:48:LYS:H	1:A:45:ASN:HA	5	0.2
(1,1036)	1:A:50:THR:H	1:A:43:ILE:HB	7	0.2
(3,19)	1:A:19:TYR:N	1:A:15:ASN:O	6	0.19
(1,972)	1:A:35:SER:H	1:A:31:LYS:HB2	7	0.19
(1,972)	1:A:35:SER:H	1:A:31:LYS:HB3	7	0.19
(1,747)	1:A:9:LYS:HB2	1:A:39:VAL:HG11	6	0.19
(1,747)	1:A:9:LYS:HB2	1:A:39:VAL:HG12	6	0.19
(1,747)	1:A:9:LYS:HB2	1:A:39:VAL:HG13	6	0.19
(1,747)	1:A:9:LYS:HB3	1:A:39:VAL:HG11	6	0.19
(1,747)	1:A:9:LYS:HB3	1:A:39:VAL:HG12	6	0.19
(1,747)	1:A:9:LYS:HB3	1:A:39:VAL:HG13	6	0.19
(1,725)	1:A:29:SER:H	1:A:32:LYS:HG2	4	0.19
(1,70)	1:A:33:ALA:H	1:A:32:LYS:HA	2	0.19
(1,65)	1:A:34:ASN:H	1:A:31:LYS:HA	4	0.19
(1,65)	1:A:34:ASN:H	1:A:31:LYS:HA	5	0.19
(1,627)	1:A:14:GLU:H	1:A:124:LYS:H	7	0.19
(1,627)	1:A:14:GLU:H	1:A:124:LYS:H	10	0.19
(1,551)	1:A:83:LYS:H	1:A:83:LYS:HD2	10	0.19
(1,551)	1:A:83:LYS:H	1:A:83:LYS:HD3	10	0.19
(1,55)	1:A:24:GLY:H	1:A:23:LEU:HB2	3	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,55)	1:A:24:GLY:H	1:A:23:LEU:HB3	3	0.19
(1,409)	1:A:124:LYS:H	1:A:14:GLU:H	7	0.19
(1,409)	1:A:124:LYS:H	1:A:14:GLU:H	10	0.19
(1,37)	1:A:16:PHE:H	1:A:15:ASN:HB2	5	0.19
(1,37)	1:A:16:PHE:H	1:A:15:ASN:HB3	5	0.19
(1,261)	1:A:112:PHE:H	1:A:128:ILE:HG12	4	0.19
(1,261)	1:A:112:PHE:H	1:A:128:ILE:HG13	4	0.19
(1,255)	1:A:128:ILE:H	1:A:127:PHE:HB2	8	0.19
(1,255)	1:A:128:ILE:H	1:A:127:PHE:HB3	8	0.19
(1,254)	1:A:128:ILE:H	1:A:127:PHE:HB2	8	0.19
(1,254)	1:A:128:ILE:H	1:A:127:PHE:HB3	8	0.19
(1,238)	1:A:124:LYS:H	1:A:124:LYS:HB2	4	0.19
(1,238)	1:A:124:LYS:H	1:A:124:LYS:HB3	4	0.19
(1,238)	1:A:124:LYS:H	1:A:124:LYS:HB2	5	0.19
(1,238)	1:A:124:LYS:H	1:A:124:LYS:HB3	5	0.19
(1,238)	1:A:124:LYS:H	1:A:124:LYS:HB2	6	0.19
(1,238)	1:A:124:LYS:H	1:A:124:LYS:HB3	6	0.19
(1,237)	1:A:124:LYS:H	1:A:124:LYS:HB2	4	0.19
(1,237)	1:A:124:LYS:H	1:A:124:LYS:HB3	4	0.19
(1,237)	1:A:124:LYS:H	1:A:124:LYS:HB2	5	0.19
(1,237)	1:A:124:LYS:H	1:A:124:LYS:HB3	5	0.19
(1,237)	1:A:124:LYS:H	1:A:124:LYS:HB2	6	0.19
(1,237)	1:A:124:LYS:H	1:A:124:LYS:HB3	6	0.19
(1,223)	1:A:121:MET:H	1:A:118:ALA:H	2	0.19
(1,221)	1:A:118:ALA:H	1:A:117:CYS:HB2	9	0.19
(1,221)	1:A:118:ALA:H	1:A:117:CYS:HB3	9	0.19
(1,202)	1:A:111:GLY:H	1:A:110:LYS:HB2	6	0.19
(1,202)	1:A:111:GLY:H	1:A:110:LYS:HB3	6	0.19
(1,1975)	1:A:33:ALA:HB1	1:A:20:LEU:HD11	2	0.19
(1,1975)	1:A:33:ALA:HB1	1:A:20:LEU:HD12	2	0.19
(1,1975)	1:A:33:ALA:HB1	1:A:20:LEU:HD13	2	0.19
(1,1975)	1:A:33:ALA:HB2	1:A:20:LEU:HD11	2	0.19
(1,1975)	1:A:33:ALA:HB2	1:A:20:LEU:HD12	2	0.19
(1,1975)	1:A:33:ALA:HB2	1:A:20:LEU:HD13	2	0.19
(1,1975)	1:A:33:ALA:HB3	1:A:20:LEU:HD11	2	0.19
(1,1975)	1:A:33:ALA:HB3	1:A:20:LEU:HD12	2	0.19
(1,1975)	1:A:33:ALA:HB3	1:A:20:LEU:HD13	2	0.19
(1,1953)	1:A:111:GLY:HA3	1:A:8:TYR:HD1	6	0.19
(1,1953)	1:A:111:GLY:HA3	1:A:8:TYR:HD2	6	0.19
(1,1934)	1:A:99:ARG:HA	1:A:95:LEU:HD21	5	0.19
(1,1934)	1:A:99:ARG:HA	1:A:95:LEU:HD22	5	0.19
(1,1934)	1:A:99:ARG:HA	1:A:95:LEU:HD23	5	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,193)	1:A:104:THR:H	1:A:104:THR:HG21	6	0.19
(1,193)	1:A:104:THR:H	1:A:104:THR:HG22	6	0.19
(1,193)	1:A:104:THR:H	1:A:104:THR:HG23	6	0.19
(1,190)	1:A:91:VAL:H	1:A:104:THR:HA	6	0.19
(1,189)	1:A:104:THR:H	1:A:103:ARG:HG2	3	0.19
(1,189)	1:A:104:THR:H	1:A:103:ARG:HG3	3	0.19
(1,1877)	1:A:3:GLN:HB3	1:A:6:GLY:HA2	2	0.19
(1,1795)	1:A:92:ASN:HD21	1:A:90:VAL:HG11	6	0.19
(1,1795)	1:A:92:ASN:HD21	1:A:90:VAL:HG12	6	0.19
(1,1795)	1:A:92:ASN:HD21	1:A:90:VAL:HG13	6	0.19
(1,1795)	1:A:92:ASN:HD21	1:A:90:VAL:HG21	6	0.19
(1,1795)	1:A:92:ASN:HD21	1:A:90:VAL:HG22	6	0.19
(1,1795)	1:A:92:ASN:HD21	1:A:90:VAL:HG23	6	0.19
(1,179)	1:A:97:ASP:H	1:A:95:LEU:HB2	6	0.19
(1,179)	1:A:97:ASP:H	1:A:95:LEU:HB3	6	0.19
(1,1782)	1:A:27:GLN:H	1:A:25:VAL:HG11	9	0.19
(1,1782)	1:A:27:GLN:H	1:A:25:VAL:HG12	9	0.19
(1,1782)	1:A:27:GLN:H	1:A:25:VAL:HG13	9	0.19
(1,1771)	1:A:16:PHE:H	1:A:14:GLU:HB3	9	0.19
(1,1753)	1:A:27:GLN:H	1:A:26:PRO:HD2	6	0.19
(1,1706)	1:A:77:ASN:H	1:A:96:PRO:HG2	10	0.19
(1,1706)	1:A:77:ASN:H	1:A:96:PRO:HG3	10	0.19
(1,168)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:HB	3	0.19
(1,168)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:HB	7	0.19
(1,1494)	1:A:124:LYS:H	1:A:124:LYS:HE2	3	0.19
(1,1494)	1:A:124:LYS:H	1:A:124:LYS:HE3	3	0.19
(1,126)	1:A:60:THR:H	1:A:60:THR:HB	3	0.19
(1,125)	1:A:53:SER:H	1:A:60:THR:HA	7	0.19
(1,99)	1:A:45:ASN:H	1:A:48:LYS:HB2	2	0.18
(1,99)	1:A:45:ASN:H	1:A:48:LYS:HB3	2	0.18
(1,91)	1:A:8:TYR:H	1:A:43:ILE:HA	7	0.18
(1,747)	1:A:9:LYS:HB2	1:A:39:VAL:HG11	1	0.18
(1,747)	1:A:9:LYS:HB2	1:A:39:VAL:HG12	1	0.18
(1,747)	1:A:9:LYS:HB2	1:A:39:VAL:HG13	1	0.18
(1,747)	1:A:9:LYS:HB3	1:A:39:VAL:HG11	1	0.18
(1,747)	1:A:9:LYS:HB3	1:A:39:VAL:HG12	1	0.18
(1,747)	1:A:9:LYS:HB3	1:A:39:VAL:HG13	1	0.18
(1,694)	1:A:51:PHE:HB2	1:A:42:ILE:HB	6	0.18
(1,694)	1:A:51:PHE:HB3	1:A:42:ILE:HB	6	0.18
(1,649)	1:A:44:VAL:HB	1:A:49:PHE:HA	8	0.18
(1,63)	1:A:32:LYS:H	1:A:31:LYS:HA	8	0.18
(1,627)	1:A:14:GLU:H	1:A:124:LYS:H	8	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,59)	1:A:27:GLN:H	1:A:26:PRO:HB2	1	0.18
(1,59)	1:A:27:GLN:H	1:A:26:PRO:HB3	1	0.18
(1,409)	1:A:124:LYS:H	1:A:14:GLU:H	8	0.18
(1,394)	1:A:126:TYR:HB2	1:A:113:VAL:HA	4	0.18
(1,370)	1:A:5:ALA:H	1:A:4:LEU:HD21	6	0.18
(1,370)	1:A:5:ALA:H	1:A:4:LEU:HD22	6	0.18
(1,370)	1:A:5:ALA:H	1:A:4:LEU:HD23	6	0.18
(1,351)	1:A:88:LYS:H	1:A:85:GLU:H	4	0.18
(1,351)	1:A:88:LYS:H	1:A:85:GLU:H	9	0.18
(1,233)	1:A:19:TYR:H	1:A:123:ALA:HB1	5	0.18
(1,233)	1:A:19:TYR:H	1:A:123:ALA:HB2	5	0.18
(1,233)	1:A:19:TYR:H	1:A:123:ALA:HB3	5	0.18
(1,219)	1:A:104:THR:H	1:A:116:MET:HA	9	0.18
(1,216)	1:A:125:ARG:H	1:A:115:THR:HA	10	0.18
(1,2051)	1:A:12:LYS:HE2	1:A:126:TYR:HD1	10	0.18
(1,2051)	1:A:12:LYS:HE3	1:A:126:TYR:HD1	10	0.18
(1,2050)	1:A:12:LYS:HD3	1:A:126:TYR:HD1	7	0.18
(1,2028)	1:A:91:VAL:HA	1:A:103:ARG:HB2	6	0.18
(1,1992)	1:A:80:SER:HB2	1:A:61:LEU:HB3	6	0.18
(1,1992)	1:A:80:SER:HB3	1:A:61:LEU:HB3	6	0.18
(1,1901)	1:A:32:LYS:HE2	1:A:29:SER:HB2	10	0.18
(1,1901)	1:A:32:LYS:HE3	1:A:29:SER:HB2	10	0.18
(1,1824)	1:A:77:ASN:H	1:A:71:LEU:HD11	7	0.18
(1,1824)	1:A:77:ASN:H	1:A:71:LEU:HD12	7	0.18
(1,1824)	1:A:77:ASN:H	1:A:71:LEU:HD13	7	0.18
(1,1822)	1:A:34:ASN:HD21	1:A:71:LEU:HB2	3	0.18
(1,1821)	1:A:77:ASN:HD21	1:A:70:VAL:HB	3	0.18
(1,1817)	1:A:81:PHE:H	1:A:61:LEU:HD21	6	0.18
(1,1817)	1:A:81:PHE:H	1:A:61:LEU:HD22	6	0.18
(1,1817)	1:A:81:PHE:H	1:A:61:LEU:HD23	6	0.18
(1,179)	1:A:97:ASP:H	1:A:95:LEU:HB2	5	0.18
(1,179)	1:A:97:ASP:H	1:A:95:LEU:HB3	5	0.18
(1,1753)	1:A:27:GLN:H	1:A:26:PRO:HD2	7	0.18
(1,1753)	1:A:27:GLN:H	1:A:26:PRO:HD2	8	0.18
(1,1448)	1:A:127:PHE:H	1:A:113:VAL:HG11	4	0.18
(1,1448)	1:A:127:PHE:H	1:A:113:VAL:HG12	4	0.18
(1,1448)	1:A:127:PHE:H	1:A:113:VAL:HG13	4	0.18
(1,1337)	1:A:79:LYS:H	1:A:93:SER:HB2	4	0.18
(1,1337)	1:A:79:LYS:H	1:A:93:SER:HB3	4	0.18
(1,126)	1:A:60:THR:H	1:A:60:THR:HB	10	0.18
(1,1091)	1:A:48:LYS:H	1:A:48:LYS:HD2	2	0.18
(1,1091)	1:A:48:LYS:H	1:A:48:LYS:HD3	2	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,34)	1:A:48:LYS:H	1:A:45:ASN:O	10	0.17
(3,10)	1:A:10:LEU:H	1:A:40:TYR:O	7	0.17
(1,99)	1:A:45:ASN:H	1:A:48:LYS:HB2	1	0.17
(1,99)	1:A:45:ASN:H	1:A:48:LYS:HB3	1	0.17
(1,99)	1:A:45:ASN:H	1:A:48:LYS:HB2	10	0.17
(1,99)	1:A:45:ASN:H	1:A:48:LYS:HB3	10	0.17
(1,91)	1:A:8:TYR:H	1:A:43:ILE:HA	2	0.17
(1,757)	1:A:61:LEU:HD21	1:A:89:LEU:HD11	4	0.17
(1,757)	1:A:61:LEU:HD21	1:A:89:LEU:HD12	4	0.17
(1,757)	1:A:61:LEU:HD21	1:A:89:LEU:HD13	4	0.17
(1,757)	1:A:61:LEU:HD21	1:A:89:LEU:HD21	4	0.17
(1,757)	1:A:61:LEU:HD21	1:A:89:LEU:HD22	4	0.17
(1,757)	1:A:61:LEU:HD21	1:A:89:LEU:HD23	4	0.17
(1,757)	1:A:61:LEU:HD22	1:A:89:LEU:HD11	4	0.17
(1,757)	1:A:61:LEU:HD22	1:A:89:LEU:HD12	4	0.17
(1,757)	1:A:61:LEU:HD22	1:A:89:LEU:HD13	4	0.17
(1,757)	1:A:61:LEU:HD22	1:A:89:LEU:HD21	4	0.17
(1,757)	1:A:61:LEU:HD22	1:A:89:LEU:HD22	4	0.17
(1,757)	1:A:61:LEU:HD22	1:A:89:LEU:HD23	4	0.17
(1,757)	1:A:61:LEU:HD23	1:A:89:LEU:HD11	4	0.17
(1,757)	1:A:61:LEU:HD23	1:A:89:LEU:HD12	4	0.17
(1,757)	1:A:61:LEU:HD23	1:A:89:LEU:HD13	4	0.17
(1,757)	1:A:61:LEU:HD23	1:A:89:LEU:HD21	4	0.17
(1,757)	1:A:61:LEU:HD23	1:A:89:LEU:HD22	4	0.17
(1,757)	1:A:61:LEU:HD23	1:A:89:LEU:HD23	4	0.17
(1,583)	1:A:101:GLY:H	1:A:93:SER:HB2	3	0.17
(1,583)	1:A:101:GLY:H	1:A:93:SER:HB3	3	0.17
(1,551)	1:A:83:LYS:H	1:A:83:LYS:HD2	7	0.17
(1,551)	1:A:83:LYS:H	1:A:83:LYS:HD3	7	0.17
(1,376)	1:A:106:GLU:H	1:A:113:VAL:HB	5	0.17
(1,370)	1:A:5:ALA:H	1:A:4:LEU:HD21	5	0.17
(1,370)	1:A:5:ALA:H	1:A:4:LEU:HD22	5	0.17
(1,370)	1:A:5:ALA:H	1:A:4:LEU:HD23	5	0.17
(1,255)	1:A:128:ILE:H	1:A:127:PHE:HB2	2	0.17
(1,255)	1:A:128:ILE:H	1:A:127:PHE:HB3	2	0.17
(1,254)	1:A:128:ILE:H	1:A:127:PHE:HB2	2	0.17
(1,254)	1:A:128:ILE:H	1:A:127:PHE:HB3	2	0.17
(1,245)	1:A:125:ARG:H	1:A:125:ARG:HD2	9	0.17
(1,245)	1:A:125:ARG:H	1:A:125:ARG:HD3	9	0.17
(1,2047)	1:A:113:VAL:HG21	1:A:124:LYS:HB2	6	0.17
(1,2047)	1:A:113:VAL:HG22	1:A:124:LYS:HB2	6	0.17
(1,2047)	1:A:113:VAL:HG23	1:A:124:LYS:HB2	6	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2033)	1:A:126:TYR:HA	1:A:113:VAL:HB	3	0.17
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD11	1:A:83:LYS:HE2	7	0.17
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD11	1:A:83:LYS:HE3	7	0.17
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD12	1:A:83:LYS:HE2	7	0.17
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD12	1:A:83:LYS:HE3	7	0.17
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD13	1:A:83:LYS:HE2	7	0.17
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD13	1:A:83:LYS:HE3	7	0.17
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD21	1:A:83:LYS:HE2	7	0.17
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD21	1:A:83:LYS:HE3	7	0.17
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD22	1:A:83:LYS:HE2	7	0.17
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD22	1:A:83:LYS:HE3	7	0.17
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD23	1:A:83:LYS:HE2	7	0.17
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD23	1:A:83:LYS:HE3	7	0.17
(1,1992)	1:A:80:SER:HB2	1:A:61:LEU:HB3	3	0.17
(1,1992)	1:A:80:SER:HB3	1:A:61:LEU:HB3	3	0.17
(1,1951)	1:A:87:SER:HB3	1:A:4:LEU:HD21	2	0.17
(1,1951)	1:A:87:SER:HB3	1:A:4:LEU:HD22	2	0.17
(1,1951)	1:A:87:SER:HB3	1:A:4:LEU:HD23	2	0.17
(1,1942)	1:A:124:LYS:HB3	1:A:126:TYR:HE1	6	0.17
(1,1823)	1:A:34:ASN:HD22	1:A:71:LEU:HB2	1	0.17
(1,1800)	1:A:45:ASN:HD21	1:A:2:VAL:HG11	5	0.17
(1,1800)	1:A:45:ASN:HD21	1:A:2:VAL:HG12	5	0.17
(1,1800)	1:A:45:ASN:HD21	1:A:2:VAL:HG13	5	0.17
(1,1761)	1:A:75:ASN:H	1:A:76:MET:HB3	8	0.17
(1,1757)	1:A:64:ASN:HD22	1:A:63:VAL:HB	7	0.17
(1,1755)	1:A:60:THR:H	1:A:61:LEU:HG	5	0.17
(1,168)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:VAL:HB	4	0.17
(1,145)	1:A:94:GLU:H	1:A:79:LYS:H	2	0.17
(1,145)	1:A:94:GLU:H	1:A:79:LYS:H	7	0.17
(1,135)	1:A:66:GLU:H	1:A:65:GLU:HB2	6	0.17
(1,135)	1:A:66:GLU:H	1:A:65:GLU:HB3	6	0.17
(1,1168)	1:A:66:GLU:H	1:A:65:GLU:HB2	6	0.17
(1,1168)	1:A:66:GLU:H	1:A:65:GLU:HB3	6	0.17
(3,64)	1:A:129:ARG:H	1:A:109:ASP:O	7	0.16
(3,33)	1:A:48:LYS:N	1:A:45:ASN:O	6	0.16
(3,33)	1:A:48:LYS:N	1:A:45:ASN:O	10	0.16
(3,26)	1:A:22:ALA:H	1:A:18:GLU:O	3	0.16
(1,99)	1:A:45:ASN:H	1:A:48:LYS:HB2	7	0.16
(1,99)	1:A:45:ASN:H	1:A:48:LYS:HB3	7	0.16
(1,766)	1:A:124:LYS:HA	1:A:115:THR:H	1	0.16
(1,766)	1:A:124:LYS:HA	1:A:115:THR:H	7	0.16
(1,749)	1:A:54:SER:HA	1:A:39:VAL:HG11	6	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,749)	1:A:54:SER:HA	1:A:39:VAL:HG12	6	0.16
(1,749)	1:A:54:SER:HA	1:A:39:VAL:HG13	6	0.16
(1,566)	1:A:86:GLY:H	1:A:87:SER:H	3	0.16
(1,55)	1:A:24:GLY:H	1:A:23:LEU:HB2	10	0.16
(1,55)	1:A:24:GLY:H	1:A:23:LEU:HB3	10	0.16
(1,370)	1:A:5:ALA:H	1:A:4:LEU:HD21	7	0.16
(1,370)	1:A:5:ALA:H	1:A:4:LEU:HD22	7	0.16
(1,370)	1:A:5:ALA:H	1:A:4:LEU:HD23	7	0.16
(1,255)	1:A:128:ILE:H	1:A:127:PHE:HB2	5	0.16
(1,255)	1:A:128:ILE:H	1:A:127:PHE:HB3	5	0.16
(1,254)	1:A:128:ILE:H	1:A:127:PHE:HB2	5	0.16
(1,254)	1:A:128:ILE:H	1:A:127:PHE:HB3	5	0.16
(1,253)	1:A:112:PHE:H	1:A:127:PHE:HB2	2	0.16
(1,253)	1:A:112:PHE:H	1:A:127:PHE:HB3	2	0.16
(1,219)	1:A:104:THR:H	1:A:116:MET:HA	10	0.16
(1,1991)	1:A:82:THR:HB	1:A:61:LEU:HB2	8	0.16
(1,1949)	1:A:87:SER:HA	1:A:4:LEU:HD21	1	0.16
(1,1949)	1:A:87:SER:HA	1:A:4:LEU:HD22	1	0.16
(1,1949)	1:A:87:SER:HA	1:A:4:LEU:HD23	1	0.16
(1,1932)	1:A:96:PRO:HA	1:A:94:GLU:HG2	2	0.16
(1,1932)	1:A:96:PRO:HA	1:A:94:GLU:HG3	2	0.16
(1,1924)	1:A:65:GLU:HB3	1:A:67:VAL:HG21	1	0.16
(1,1924)	1:A:65:GLU:HB3	1:A:67:VAL:HG22	1	0.16
(1,1924)	1:A:65:GLU:HB3	1:A:67:VAL:HG23	1	0.16
(1,192)	1:A:104:THR:H	1:A:104:THR:HB	5	0.16
(1,1910)	1:A:27:GLN:HG2	1:A:31:LYS:HG2	4	0.16
(1,1910)	1:A:27:GLN:HG3	1:A:31:LYS:HG2	4	0.16
(1,1898)	1:A:31:LYS:HG2	1:A:27:GLN:HG2	4	0.16
(1,1898)	1:A:31:LYS:HG2	1:A:27:GLN:HG3	4	0.16
(1,188)	1:A:104:THR:H	1:A:103:ARG:HB2	6	0.16
(1,188)	1:A:104:THR:H	1:A:103:ARG:HB3	6	0.16
(1,187)	1:A:104:THR:H	1:A:103:ARG:HB2	6	0.16
(1,187)	1:A:104:THR:H	1:A:103:ARG:HB3	6	0.16
(1,1822)	1:A:34:ASN:HD21	1:A:71:LEU:HB2	5	0.16
(1,1814)	1:A:50:THR:H	1:A:45:ASN:H	3	0.16
(1,165)	1:A:83:LYS:H	1:A:91:VAL:HA	9	0.16
(1,1639)	1:A:7:THR:H	1:A:130:THR:H	8	0.16
(1,1638)	1:A:130:THR:H	1:A:7:THR:H	8	0.16
(1,159)	1:A:88:LYS:H	1:A:88:LYS:HE2	5	0.16
(1,159)	1:A:88:LYS:H	1:A:88:LYS:HE3	5	0.16
(1,1456)	1:A:104:THR:H	1:A:114:LEU:HD11	9	0.16
(1,1456)	1:A:104:THR:H	1:A:114:LEU:HD12	9	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1456)	1:A:104:THR:H	1:A:114:LEU:HD13	9	0.16
(1,1456)	1:A:104:THR:H	1:A:114:LEU:HD21	9	0.16
(1,1456)	1:A:104:THR:H	1:A:114:LEU:HD22	9	0.16
(1,1456)	1:A:104:THR:H	1:A:114:LEU:HD23	9	0.16
(1,126)	1:A:60:THR:H	1:A:60:THR:HB	4	0.16
(1,12)	1:A:130:THR:H	1:A:8:TYR:HA	4	0.16
(1,1049)	1:A:48:LYS:H	1:A:44:VAL:HG11	10	0.16
(1,1049)	1:A:48:LYS:H	1:A:44:VAL:HG12	10	0.16
(1,1049)	1:A:48:LYS:H	1:A:44:VAL:HG13	10	0.16
(1,1049)	1:A:48:LYS:H	1:A:44:VAL:HG21	10	0.16
(1,1049)	1:A:48:LYS:H	1:A:44:VAL:HG22	10	0.16
(1,1049)	1:A:48:LYS:H	1:A:44:VAL:HG23	10	0.16
(3,15)	1:A:14:GLU:N	1:A:124:LYS:O	3	0.15
(3,11)	1:A:12:LYS:N	1:A:126:TYR:O	5	0.15
(2,5)	1:A:94:GLU:H	1:A:80:SER:HA	7	0.15
(1,821)	1:A:12:LYS:H	1:A:12:LYS:HE2	4	0.15
(1,821)	1:A:12:LYS:H	1:A:12:LYS:HE3	4	0.15
(1,766)	1:A:124:LYS:HA	1:A:115:THR:H	6	0.15
(1,764)	1:A:12:LYS:HE2	1:A:126:TYR:HE1	10	0.15
(1,764)	1:A:12:LYS:HE3	1:A:126:TYR:HE1	10	0.15
(1,763)	1:A:18:GLU:HB3	1:A:121:MET:HB3	7	0.15
(1,747)	1:A:9:LYS:HB2	1:A:39:VAL:HG11	8	0.15
(1,747)	1:A:9:LYS:HB2	1:A:39:VAL:HG12	8	0.15
(1,747)	1:A:9:LYS:HB2	1:A:39:VAL:HG13	8	0.15
(1,747)	1:A:9:LYS:HB3	1:A:39:VAL:HG11	8	0.15
(1,747)	1:A:9:LYS:HB3	1:A:39:VAL:HG12	8	0.15
(1,747)	1:A:9:LYS:HB3	1:A:39:VAL:HG13	8	0.15
(1,667)	1:A:88:LYS:HA	1:A:106:GLU:HB2	7	0.15
(1,667)	1:A:88:LYS:HA	1:A:106:GLU:HB3	7	0.15
(1,59)	1:A:27:GLN:H	1:A:26:PRO:HB2	3	0.15
(1,59)	1:A:27:GLN:H	1:A:26:PRO:HB3	3	0.15
(1,59)	1:A:27:GLN:H	1:A:26:PRO:HB2	10	0.15
(1,59)	1:A:27:GLN:H	1:A:26:PRO:HB3	10	0.15
(1,572)	1:A:84:LEU:H	1:A:89:LEU:HG	3	0.15
(1,389)	1:A:33:ALA:HB1	1:A:71:LEU:HD21	9	0.15
(1,389)	1:A:33:ALA:HB1	1:A:71:LEU:HD22	9	0.15
(1,389)	1:A:33:ALA:HB1	1:A:71:LEU:HD23	9	0.15
(1,389)	1:A:33:ALA:HB2	1:A:71:LEU:HD21	9	0.15
(1,389)	1:A:33:ALA:HB2	1:A:71:LEU:HD22	9	0.15
(1,389)	1:A:33:ALA:HB2	1:A:71:LEU:HD23	9	0.15
(1,389)	1:A:33:ALA:HB3	1:A:71:LEU:HD21	9	0.15
(1,389)	1:A:33:ALA:HB3	1:A:71:LEU:HD22	9	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,389)	1:A:33:ALA:HB3	1:A:71:LEU:HD23	9	0.15
(1,381)	1:A:39:VAL:HG11	1:A:9:LYS:HG2	9	0.15
(1,381)	1:A:39:VAL:HG12	1:A:9:LYS:HG2	9	0.15
(1,381)	1:A:39:VAL:HG13	1:A:9:LYS:HG2	9	0.15
(1,356)	1:A:63:VAL:H	1:A:62:ILE:HA	8	0.15
(1,348)	1:A:116:MET:HA	1:A:103:ARG:HG2	4	0.15
(1,348)	1:A:116:MET:HA	1:A:103:ARG:HG3	4	0.15
(1,296)	1:A:6:GLY:H	1:A:44:VAL:HG11	1	0.15
(1,296)	1:A:6:GLY:H	1:A:44:VAL:HG12	1	0.15
(1,296)	1:A:6:GLY:H	1:A:44:VAL:HG13	1	0.15
(1,296)	1:A:6:GLY:H	1:A:44:VAL:HG21	1	0.15
(1,296)	1:A:6:GLY:H	1:A:44:VAL:HG22	1	0.15
(1,296)	1:A:6:GLY:H	1:A:44:VAL:HG23	1	0.15
(1,275)	1:A:77:ASN:HB2	1:A:70:VAL:HA	8	0.15
(1,275)	1:A:77:ASN:HB3	1:A:70:VAL:HA	8	0.15
(1,270)	1:A:73:THR:HG21	1:A:33:ALA:HB1	4	0.15
(1,270)	1:A:73:THR:HG21	1:A:33:ALA:HB2	4	0.15
(1,270)	1:A:73:THR:HG21	1:A:33:ALA:HB3	4	0.15
(1,270)	1:A:73:THR:HG22	1:A:33:ALA:HB1	4	0.15
(1,270)	1:A:73:THR:HG22	1:A:33:ALA:HB2	4	0.15
(1,270)	1:A:73:THR:HG22	1:A:33:ALA:HB3	4	0.15
(1,270)	1:A:73:THR:HG23	1:A:33:ALA:HB1	4	0.15
(1,270)	1:A:73:THR:HG23	1:A:33:ALA:HB2	4	0.15
(1,270)	1:A:73:THR:HG23	1:A:33:ALA:HB3	4	0.15
(1,221)	1:A:118:ALA:H	1:A:117:CYS:HB2	1	0.15
(1,221)	1:A:118:ALA:H	1:A:117:CYS:HB3	1	0.15
(1,219)	1:A:104:THR:H	1:A:116:MET:HA	1	0.15
(1,213)	1:A:125:ARG:H	1:A:114:LEU:HB2	5	0.15
(1,213)	1:A:125:ARG:H	1:A:114:LEU:HB3	5	0.15
(1,212)	1:A:125:ARG:H	1:A:114:LEU:HB2	5	0.15
(1,212)	1:A:125:ARG:H	1:A:114:LEU:HB3	5	0.15
(1,210)	1:A:127:PHE:H	1:A:113:VAL:HA	1	0.15
(1,2059)	1:A:11:GLU:HA	1:A:127:PHE:HA	5	0.15
(1,2057)	1:A:113:VAL:HG11	1:A:126:TYR:HE1	7	0.15
(1,2057)	1:A:113:VAL:HG12	1:A:126:TYR:HE1	7	0.15
(1,2057)	1:A:113:VAL:HG13	1:A:126:TYR:HE1	7	0.15
(1,189)	1:A:104:THR:H	1:A:103:ARG:HG2	8	0.15
(1,189)	1:A:104:THR:H	1:A:103:ARG:HG3	8	0.15
(1,1849)	1:A:8:TYR:H	1:A:129:ARG:HB2	1	0.15
(1,1849)	1:A:8:TYR:H	1:A:129:ARG:HB3	1	0.15
(1,1824)	1:A:77:ASN:H	1:A:71:LEU:HD11	5	0.15
(1,1824)	1:A:77:ASN:H	1:A:71:LEU:HD12	5	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1824)	1:A:77:ASN:H	1:A:71:LEU:HD13	5	0.15
(1,1824)	1:A:77:ASN:H	1:A:71:LEU:HD11	6	0.15
(1,1824)	1:A:77:ASN:H	1:A:71:LEU:HD12	6	0.15
(1,1824)	1:A:77:ASN:H	1:A:71:LEU:HD13	6	0.15
(1,1822)	1:A:34:ASN:HD21	1:A:71:LEU:HB2	10	0.15
(1,1812)	1:A:49:PHE:H	1:A:44:VAL:HG11	1	0.15
(1,1812)	1:A:49:PHE:H	1:A:44:VAL:HG12	1	0.15
(1,1812)	1:A:49:PHE:H	1:A:44:VAL:HG13	1	0.15
(1,1786)	1:A:31:LYS:H	1:A:27:GLN:HB2	5	0.15
(1,1773)	1:A:18:GLU:H	1:A:15:ASN:H	2	0.15
(1,176)	1:A:101:GLY:H	1:A:94:GLU:HA	9	0.15
(1,1651)	1:A:65:GLU:H	1:A:84:LEU:HD11	10	0.15
(1,1651)	1:A:65:GLU:H	1:A:84:LEU:HD12	10	0.15
(1,1651)	1:A:65:GLU:H	1:A:84:LEU:HD13	10	0.15
(1,1651)	1:A:65:GLU:H	1:A:84:LEU:HD21	10	0.15
(1,1651)	1:A:65:GLU:H	1:A:84:LEU:HD22	10	0.15
(1,1651)	1:A:65:GLU:H	1:A:84:LEU:HD23	10	0.15
(1,1647)	1:A:14:GLU:H	1:A:124:LYS:HG2	1	0.15
(1,1647)	1:A:14:GLU:H	1:A:124:LYS:HG3	1	0.15
(1,1630)	1:A:113:VAL:HG11	1:A:126:TYR:HE1	7	0.15
(1,1630)	1:A:113:VAL:HG12	1:A:126:TYR:HE1	7	0.15
(1,1630)	1:A:113:VAL:HG13	1:A:126:TYR:HE1	7	0.15
(1,1566)	1:A:43:ILE:HB	1:A:7:THR:HB	5	0.15
(1,1356)	1:A:99:ARG:H	1:A:95:LEU:HG	5	0.15
(1,132)	1:A:63:VAL:H	1:A:62:ILE:HG21	1	0.15
(1,132)	1:A:63:VAL:H	1:A:62:ILE:HG22	1	0.15
(1,132)	1:A:63:VAL:H	1:A:62:ILE:HG23	1	0.15
(1,126)	1:A:60:THR:H	1:A:60:THR:HB	7	0.15
(3,61)	1:A:116:MET:N	1:A:123:ALA:O	6	0.14
(3,19)	1:A:19:TYR:N	1:A:15:ASN:O	7	0.14
(1,99)	1:A:45:ASN:H	1:A:48:LYS:HB2	5	0.14
(1,99)	1:A:45:ASN:H	1:A:48:LYS:HB3	5	0.14
(1,728)	1:A:45:ASN:H	1:A:2:VAL:HG11	7	0.14
(1,728)	1:A:45:ASN:H	1:A:2:VAL:HG12	7	0.14
(1,728)	1:A:45:ASN:H	1:A:2:VAL:HG13	7	0.14
(1,725)	1:A:29:SER:H	1:A:32:LYS:HG2	7	0.14
(1,710)	1:A:51:PHE:HB2	1:A:61:LEU:HB2	3	0.14
(1,710)	1:A:51:PHE:HB2	1:A:61:LEU:HB3	3	0.14
(1,710)	1:A:51:PHE:HB3	1:A:61:LEU:HB2	3	0.14
(1,710)	1:A:51:PHE:HB3	1:A:61:LEU:HB3	3	0.14
(1,703)	1:A:69:GLU:H	1:A:78:ILE:HD11	5	0.14
(1,703)	1:A:69:GLU:H	1:A:78:ILE:HD12	5	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,703)	1:A:69:GLU:H	1:A:78:ILE:HD13	5	0.14
(1,70)	1:A:33:ALA:H	1:A:32:LYS:HA	10	0.14
(1,667)	1:A:88:LYS:HA	1:A:106:GLU:HB2	2	0.14
(1,667)	1:A:88:LYS:HA	1:A:106:GLU:HB3	2	0.14
(1,649)	1:A:44:VAL:HB	1:A:49:PHE:HA	2	0.14
(1,607)	1:A:114:LEU:H	1:A:114:LEU:HD11	8	0.14
(1,607)	1:A:114:LEU:H	1:A:114:LEU:HD12	8	0.14
(1,607)	1:A:114:LEU:H	1:A:114:LEU:HD13	8	0.14
(1,607)	1:A:114:LEU:H	1:A:114:LEU:HD21	8	0.14
(1,607)	1:A:114:LEU:H	1:A:114:LEU:HD22	8	0.14
(1,607)	1:A:114:LEU:H	1:A:114:LEU:HD23	8	0.14
(1,606)	1:A:114:LEU:H	1:A:114:LEU:HD11	8	0.14
(1,606)	1:A:114:LEU:H	1:A:114:LEU:HD12	8	0.14
(1,606)	1:A:114:LEU:H	1:A:114:LEU:HD13	8	0.14
(1,606)	1:A:114:LEU:H	1:A:114:LEU:HD21	8	0.14
(1,606)	1:A:114:LEU:H	1:A:114:LEU:HD22	8	0.14
(1,606)	1:A:114:LEU:H	1:A:114:LEU:HD23	8	0.14
(1,448)	1:A:31:LYS:H	1:A:30:ILE:HG12	1	0.14
(1,448)	1:A:31:LYS:H	1:A:30:ILE:HG13	1	0.14
(1,448)	1:A:31:LYS:H	1:A:30:ILE:HG12	8	0.14
(1,448)	1:A:31:LYS:H	1:A:30:ILE:HG13	8	0.14
(1,430)	1:A:24:GLY:H	1:A:20:LEU:HA	1	0.14
(1,39)	1:A:17:GLU:H	1:A:15:ASN:H	9	0.14
(1,383)	1:A:36:PRO:HG2	1:A:12:LYS:HA	6	0.14
(1,383)	1:A:36:PRO:HG3	1:A:12:LYS:HA	6	0.14
(1,281)	1:A:84:LEU:HA	1:A:89:LEU:HB2	2	0.14
(1,281)	1:A:84:LEU:HA	1:A:89:LEU:HB3	2	0.14
(1,270)	1:A:73:THR:HG21	1:A:33:ALA:HB1	1	0.14
(1,270)	1:A:73:THR:HG21	1:A:33:ALA:HB2	1	0.14
(1,270)	1:A:73:THR:HG21	1:A:33:ALA:HB3	1	0.14
(1,270)	1:A:73:THR:HG22	1:A:33:ALA:HB1	1	0.14
(1,270)	1:A:73:THR:HG22	1:A:33:ALA:HB2	1	0.14
(1,270)	1:A:73:THR:HG22	1:A:33:ALA:HB3	1	0.14
(1,270)	1:A:73:THR:HG23	1:A:33:ALA:HB1	1	0.14
(1,270)	1:A:73:THR:HG23	1:A:33:ALA:HB2	1	0.14
(1,270)	1:A:73:THR:HG23	1:A:33:ALA:HB3	1	0.14
(1,255)	1:A:128:ILE:H	1:A:127:PHE:HB2	1	0.14
(1,255)	1:A:128:ILE:H	1:A:127:PHE:HB3	1	0.14
(1,255)	1:A:128:ILE:H	1:A:127:PHE:HB2	9	0.14
(1,255)	1:A:128:ILE:H	1:A:127:PHE:HB3	9	0.14
(1,254)	1:A:128:ILE:H	1:A:127:PHE:HB2	1	0.14
(1,254)	1:A:128:ILE:H	1:A:127:PHE:HB3	1	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,254)	1:A:128:ILE:H	1:A:127:PHE:HB2	9	0.14
(1,254)	1:A:128:ILE:H	1:A:127:PHE:HB3	9	0.14
(1,239)	1:A:125:ARG:H	1:A:124:LYS:HB2	2	0.14
(1,239)	1:A:125:ARG:H	1:A:124:LYS:HB3	2	0.14
(1,238)	1:A:124:LYS:H	1:A:124:LYS:HB2	7	0.14
(1,238)	1:A:124:LYS:H	1:A:124:LYS:HB3	7	0.14
(1,237)	1:A:124:LYS:H	1:A:124:LYS:HB2	7	0.14
(1,237)	1:A:124:LYS:H	1:A:124:LYS:HB3	7	0.14
(1,210)	1:A:127:PHE:H	1:A:113:VAL:HA	7	0.14
(1,2056)	1:A:14:GLU:HB3	1:A:126:TYR:HE1	8	0.14
(1,2033)	1:A:126:TYR:HA	1:A:113:VAL:HB	10	0.14
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD11	1:A:83:LYS:HE2	5	0.14
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD11	1:A:83:LYS:HE3	5	0.14
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD12	1:A:83:LYS:HE2	5	0.14
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD12	1:A:83:LYS:HE3	5	0.14
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD13	1:A:83:LYS:HE2	5	0.14
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD13	1:A:83:LYS:HE3	5	0.14
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD21	1:A:83:LYS:HE2	5	0.14
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD21	1:A:83:LYS:HE3	5	0.14
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD22	1:A:83:LYS:HE2	5	0.14
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD22	1:A:83:LYS:HE3	5	0.14
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD23	1:A:83:LYS:HE2	5	0.14
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD23	1:A:83:LYS:HE3	5	0.14
(1,197)	1:A:89:LEU:H	1:A:106:GLU:HA	4	0.14
(1,1895)	1:A:30:ILE:HG12	1:A:27:GLN:HA	10	0.14
(1,1808)	1:A:33:ALA:H	1:A:20:LEU:HD11	4	0.14
(1,1808)	1:A:33:ALA:H	1:A:20:LEU:HD12	4	0.14
(1,1808)	1:A:33:ALA:H	1:A:20:LEU:HD13	4	0.14
(1,1800)	1:A:45:ASN:HD21	1:A:2:VAL:HG11	2	0.14
(1,1800)	1:A:45:ASN:HD21	1:A:2:VAL:HG12	2	0.14
(1,1800)	1:A:45:ASN:HD21	1:A:2:VAL:HG13	2	0.14
(1,1799)	1:A:47:ASN:HD21	1:A:2:VAL:HB	5	0.14
(1,1795)	1:A:92:ASN:HD21	1:A:90:VAL:HG11	1	0.14
(1,1795)	1:A:92:ASN:HD21	1:A:90:VAL:HG12	1	0.14
(1,1795)	1:A:92:ASN:HD21	1:A:90:VAL:HG13	1	0.14
(1,1795)	1:A:92:ASN:HD21	1:A:90:VAL:HG21	1	0.14
(1,1795)	1:A:92:ASN:HD21	1:A:90:VAL:HG22	1	0.14
(1,1795)	1:A:92:ASN:HD21	1:A:90:VAL:HG23	1	0.14
(1,1791)	1:A:45:ASN:HD21	1:A:48:LYS:HG2	2	0.14
(1,1782)	1:A:27:GLN:H	1:A:25:VAL:HG11	6	0.14
(1,1782)	1:A:27:GLN:H	1:A:25:VAL:HG12	6	0.14
(1,1782)	1:A:27:GLN:H	1:A:25:VAL:HG13	6	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1753)	1:A:27:GLN:H	1:A:26:PRO:HD2	5	0.14
(1,1737)	1:A:43:ILE:HG12	1:A:41:GLU:HB2	7	0.14
(1,1737)	1:A:43:ILE:HG12	1:A:41:GLU:HB3	7	0.14
(1,1737)	1:A:43:ILE:HG13	1:A:41:GLU:HB2	7	0.14
(1,1737)	1:A:43:ILE:HG13	1:A:41:GLU:HB3	7	0.14
(1,1718)	1:A:126:TYR:HB2	1:A:12:LYS:HG2	9	0.14
(1,1718)	1:A:126:TYR:HB2	1:A:12:LYS:HG3	9	0.14
(1,1718)	1:A:126:TYR:HB3	1:A:12:LYS:HG2	9	0.14
(1,1718)	1:A:126:TYR:HB3	1:A:12:LYS:HG3	9	0.14
(1,1717)	1:A:126:TYR:HB2	1:A:12:LYS:HG2	9	0.14
(1,1717)	1:A:126:TYR:HB2	1:A:12:LYS:HG3	9	0.14
(1,1717)	1:A:126:TYR:HB3	1:A:12:LYS:HG2	9	0.14
(1,1717)	1:A:126:TYR:HB3	1:A:12:LYS:HG3	9	0.14
(1,1703)	1:A:104:THR:H	1:A:115:THR:HB	1	0.14
(1,1626)	1:A:12:LYS:HG2	1:A:126:TYR:HB2	9	0.14
(1,1626)	1:A:12:LYS:HG2	1:A:126:TYR:HB3	9	0.14
(1,1626)	1:A:12:LYS:HG3	1:A:126:TYR:HB2	9	0.14
(1,1626)	1:A:12:LYS:HG3	1:A:126:TYR:HB3	9	0.14
(1,1625)	1:A:12:LYS:HG2	1:A:126:TYR:HB2	9	0.14
(1,1625)	1:A:12:LYS:HG2	1:A:126:TYR:HB3	9	0.14
(1,1625)	1:A:12:LYS:HG3	1:A:126:TYR:HB2	9	0.14
(1,1625)	1:A:12:LYS:HG3	1:A:126:TYR:HB3	9	0.14
(1,1459)	1:A:125:ARG:H	1:A:114:LEU:HG	8	0.14
(1,131)	1:A:63:VAL:H	1:A:62:ILE:HD11	2	0.14
(1,131)	1:A:63:VAL:H	1:A:62:ILE:HD12	2	0.14
(1,131)	1:A:63:VAL:H	1:A:62:ILE:HD13	2	0.14
(1,1049)	1:A:48:LYS:H	1:A:44:VAL:HG11	9	0.14
(1,1049)	1:A:48:LYS:H	1:A:44:VAL:HG12	9	0.14
(1,1049)	1:A:48:LYS:H	1:A:44:VAL:HG13	9	0.14
(1,1049)	1:A:48:LYS:H	1:A:44:VAL:HG21	9	0.14
(1,1049)	1:A:48:LYS:H	1:A:44:VAL:HG22	9	0.14
(1,1049)	1:A:48:LYS:H	1:A:44:VAL:HG23	9	0.14
(1,102)	1:A:50:THR:H	1:A:49:PHE:HB2	3	0.14
(1,102)	1:A:50:THR:H	1:A:49:PHE:HB3	3	0.14
(3,61)	1:A:116:MET:N	1:A:123:ALA:O	10	0.13
(3,33)	1:A:48:LYS:N	1:A:45:ASN:O	5	0.13
(1,883)	1:A:19:TYR:H	1:A:20:LEU:HD11	4	0.13
(1,883)	1:A:19:TYR:H	1:A:20:LEU:HD12	4	0.13
(1,883)	1:A:19:TYR:H	1:A:20:LEU:HD13	4	0.13
(1,883)	1:A:19:TYR:H	1:A:20:LEU:HD21	4	0.13
(1,883)	1:A:19:TYR:H	1:A:20:LEU:HD22	4	0.13
(1,883)	1:A:19:TYR:H	1:A:20:LEU:HD23	4	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,852)	1:A:15:ASN:H	1:A:16:PHE:HB2	6	0.13
(1,852)	1:A:15:ASN:H	1:A:16:PHE:HB3	6	0.13
(1,722)	1:A:5:ALA:H	1:A:3:GLN:HG2	4	0.13
(1,722)	1:A:5:ALA:H	1:A:3:GLN:HG3	4	0.13
(1,553)	1:A:83:LYS:H	1:A:83:LYS:HG2	2	0.13
(1,553)	1:A:83:LYS:H	1:A:83:LYS:HG3	2	0.13
(1,542)	1:A:79:LYS:H	1:A:79:LYS:HD2	1	0.13
(1,542)	1:A:79:LYS:H	1:A:79:LYS:HD3	1	0.13
(1,542)	1:A:79:LYS:H	1:A:79:LYS:HD2	6	0.13
(1,542)	1:A:79:LYS:H	1:A:79:LYS:HD3	6	0.13
(1,386)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:28:ASP:HA	3	0.13
(1,386)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:28:ASP:HA	3	0.13
(1,385)	1:A:33:ALA:HB1	1:A:25:VAL:HG11	6	0.13
(1,385)	1:A:33:ALA:HB1	1:A:25:VAL:HG12	6	0.13
(1,385)	1:A:33:ALA:HB1	1:A:25:VAL:HG13	6	0.13
(1,385)	1:A:33:ALA:HB2	1:A:25:VAL:HG11	6	0.13
(1,385)	1:A:33:ALA:HB2	1:A:25:VAL:HG12	6	0.13
(1,385)	1:A:33:ALA:HB2	1:A:25:VAL:HG13	6	0.13
(1,385)	1:A:33:ALA:HB3	1:A:25:VAL:HG11	6	0.13
(1,385)	1:A:33:ALA:HB3	1:A:25:VAL:HG12	6	0.13
(1,385)	1:A:33:ALA:HB3	1:A:25:VAL:HG13	6	0.13
(1,376)	1:A:106:GLU:H	1:A:113:VAL:HB	1	0.13
(1,376)	1:A:106:GLU:H	1:A:113:VAL:HB	2	0.13
(1,37)	1:A:16:PHE:H	1:A:15:ASN:HB2	7	0.13
(1,37)	1:A:16:PHE:H	1:A:15:ASN:HB3	7	0.13
(1,269)	1:A:28:ASP:HA	1:A:31:LYS:HB2	3	0.13
(1,269)	1:A:28:ASP:HA	1:A:31:LYS:HB3	3	0.13
(1,268)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:28:ASP:HA	3	0.13
(1,268)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:28:ASP:HA	3	0.13
(1,265)	1:A:130:THR:H	1:A:130:THR:HG21	3	0.13
(1,265)	1:A:130:THR:H	1:A:130:THR:HG22	3	0.13
(1,265)	1:A:130:THR:H	1:A:130:THR:HG23	3	0.13
(1,255)	1:A:128:ILE:H	1:A:127:PHE:HB2	7	0.13
(1,255)	1:A:128:ILE:H	1:A:127:PHE:HB3	7	0.13
(1,254)	1:A:128:ILE:H	1:A:127:PHE:HB2	7	0.13
(1,254)	1:A:128:ILE:H	1:A:127:PHE:HB3	7	0.13
(1,253)	1:A:112:PHE:H	1:A:127:PHE:HB2	10	0.13
(1,253)	1:A:112:PHE:H	1:A:127:PHE:HB3	10	0.13
(1,24)	1:A:128:ILE:H	1:A:11:GLU:HB2	7	0.13
(1,24)	1:A:128:ILE:H	1:A:11:GLU:HB3	7	0.13
(1,24)	1:A:128:ILE:H	1:A:11:GLU:HB2	9	0.13
(1,24)	1:A:128:ILE:H	1:A:11:GLU:HB3	9	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,214)	1:A:125:ARG:H	1:A:114:LEU:H	4	0.13
(1,2019)	1:A:63:VAL:HG21	1:A:89:LEU:HB2	10	0.13
(1,2019)	1:A:63:VAL:HG22	1:A:89:LEU:HB2	10	0.13
(1,2019)	1:A:63:VAL:HG23	1:A:89:LEU:HB2	10	0.13
(1,1963)	1:A:125:ARG:HB2	1:A:10:LEU:HD21	9	0.13
(1,1963)	1:A:125:ARG:HB2	1:A:10:LEU:HD22	9	0.13
(1,1963)	1:A:125:ARG:HB2	1:A:10:LEU:HD23	9	0.13
(1,1957)	1:A:114:LEU:HD21	1:A:10:LEU:HA	4	0.13
(1,1957)	1:A:114:LEU:HD22	1:A:10:LEU:HA	4	0.13
(1,1957)	1:A:114:LEU:HD23	1:A:10:LEU:HA	4	0.13
(1,1923)	1:A:67:VAL:HG21	1:A:65:GLU:HB2	9	0.13
(1,1923)	1:A:67:VAL:HG22	1:A:65:GLU:HB2	9	0.13
(1,1923)	1:A:67:VAL:HG23	1:A:65:GLU:HB2	9	0.13
(1,192)	1:A:104:THR:H	1:A:104:THR:HB	2	0.13
(1,1875)	1:A:98:GLY:HA3	1:A:99:ARG:HB3	9	0.13
(1,1791)	1:A:45:ASN:HD21	1:A:48:LYS:HG2	1	0.13
(1,1755)	1:A:60:THR:H	1:A:61:LEU:HG	3	0.13
(1,1706)	1:A:77:ASN:H	1:A:96:PRO:HG2	6	0.13
(1,1706)	1:A:77:ASN:H	1:A:96:PRO:HG3	6	0.13
(1,169)	1:A:81:PHE:H	1:A:91:VAL:HG11	6	0.13
(1,169)	1:A:81:PHE:H	1:A:91:VAL:HG12	6	0.13
(1,169)	1:A:81:PHE:H	1:A:91:VAL:HG13	6	0.13
(1,169)	1:A:81:PHE:H	1:A:91:VAL:HG21	6	0.13
(1,169)	1:A:81:PHE:H	1:A:91:VAL:HG22	6	0.13
(1,169)	1:A:81:PHE:H	1:A:91:VAL:HG23	6	0.13
(1,1654)	1:A:16:PHE:HB2	1:A:33:ALA:HB1	3	0.13
(1,1654)	1:A:16:PHE:HB2	1:A:33:ALA:HB2	3	0.13
(1,1654)	1:A:16:PHE:HB2	1:A:33:ALA:HB3	3	0.13
(1,1654)	1:A:16:PHE:HB3	1:A:33:ALA:HB1	3	0.13
(1,1654)	1:A:16:PHE:HB3	1:A:33:ALA:HB2	3	0.13
(1,1654)	1:A:16:PHE:HB3	1:A:33:ALA:HB3	3	0.13
(1,1654)	1:A:16:PHE:HB2	1:A:33:ALA:HB1	7	0.13
(1,1654)	1:A:16:PHE:HB2	1:A:33:ALA:HB2	7	0.13
(1,1654)	1:A:16:PHE:HB2	1:A:33:ALA:HB3	7	0.13
(1,1654)	1:A:16:PHE:HB3	1:A:33:ALA:HB1	7	0.13
(1,1654)	1:A:16:PHE:HB3	1:A:33:ALA:HB2	7	0.13
(1,1654)	1:A:16:PHE:HB3	1:A:33:ALA:HB3	7	0.13
(1,165)	1:A:83:LYS:H	1:A:91:VAL:HA	7	0.13
(1,1647)	1:A:14:GLU:H	1:A:124:LYS:HG2	7	0.13
(1,1647)	1:A:14:GLU:H	1:A:124:LYS:HG3	7	0.13
(1,1566)	1:A:43:ILE:HB	1:A:7:THR:HB	9	0.13
(1,145)	1:A:94:GLU:H	1:A:79:LYS:H	10	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1356)	1:A:99:ARG:H	1:A:95:LEU:HG	6	0.13
(1,1322)	1:A:105:TYR:H	1:A:89:LEU:HG	3	0.13
(1,132)	1:A:63:VAL:H	1:A:62:ILE:HG21	6	0.13
(1,132)	1:A:63:VAL:H	1:A:62:ILE:HG22	6	0.13
(1,132)	1:A:63:VAL:H	1:A:62:ILE:HG23	6	0.13
(1,132)	1:A:63:VAL:H	1:A:62:ILE:HG21	9	0.13
(1,132)	1:A:63:VAL:H	1:A:62:ILE:HG22	9	0.13
(1,132)	1:A:63:VAL:H	1:A:62:ILE:HG23	9	0.13
(1,131)	1:A:63:VAL:H	1:A:62:ILE:HD11	1	0.13
(1,131)	1:A:63:VAL:H	1:A:62:ILE:HD12	1	0.13
(1,131)	1:A:63:VAL:H	1:A:62:ILE:HD13	1	0.13
(1,124)	1:A:53:SER:H	1:A:59:SER:H	2	0.13
(1,123)	1:A:60:THR:H	1:A:59:SER:HB2	10	0.13
(1,123)	1:A:60:THR:H	1:A:59:SER:HB3	10	0.13
(1,1219)	1:A:76:MET:H	1:A:75:ASN:HD21	5	0.13
(1,1219)	1:A:76:MET:H	1:A:75:ASN:HD22	5	0.13
(1,113)	1:A:59:SER:H	1:A:53:SER:H	2	0.13
(1,109)	1:A:53:SER:H	1:A:52:LYS:HG2	6	0.13
(1,109)	1:A:53:SER:H	1:A:52:LYS:HG3	6	0.13
(3,51)	1:A:106:GLU:N	1:A:113:VAL:O	5	0.12
(3,49)	1:A:101:GLY:N	1:A:93:SER:O	5	0.12
(3,33)	1:A:48:LYS:N	1:A:45:ASN:O	8	0.12
(3,13)	1:A:126:TYR:N	1:A:12:LYS:O	3	0.12
(3,11)	1:A:12:LYS:N	1:A:126:TYR:O	9	0.12
(1,971)	1:A:28:ASP:H	1:A:31:LYS:HB2	8	0.12
(1,971)	1:A:28:ASP:H	1:A:31:LYS:HB3	8	0.12
(1,852)	1:A:15:ASN:H	1:A:16:PHE:HB2	1	0.12
(1,852)	1:A:15:ASN:H	1:A:16:PHE:HB3	1	0.12
(1,852)	1:A:15:ASN:H	1:A:16:PHE:HB2	7	0.12
(1,852)	1:A:15:ASN:H	1:A:16:PHE:HB3	7	0.12
(1,741)	1:A:44:VAL:HG21	1:A:4:LEU:HD11	7	0.12
(1,741)	1:A:44:VAL:HG21	1:A:4:LEU:HD12	7	0.12
(1,741)	1:A:44:VAL:HG21	1:A:4:LEU:HD13	7	0.12
(1,741)	1:A:44:VAL:HG22	1:A:4:LEU:HD11	7	0.12
(1,741)	1:A:44:VAL:HG22	1:A:4:LEU:HD12	7	0.12
(1,741)	1:A:44:VAL:HG22	1:A:4:LEU:HD13	7	0.12
(1,741)	1:A:44:VAL:HG23	1:A:4:LEU:HD11	7	0.12
(1,741)	1:A:44:VAL:HG23	1:A:4:LEU:HD12	7	0.12
(1,741)	1:A:44:VAL:HG23	1:A:4:LEU:HD13	7	0.12
(1,667)	1:A:88:LYS:HA	1:A:106:GLU:HB2	9	0.12
(1,667)	1:A:88:LYS:HA	1:A:106:GLU:HB3	9	0.12
(1,614)	1:A:121:MET:H	1:A:118:ALA:HA	10	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,602)	1:A:114:LEU:H	1:A:113:VAL:HB	4	0.12
(1,553)	1:A:83:LYS:H	1:A:83:LYS:HG2	9	0.12
(1,553)	1:A:83:LYS:H	1:A:83:LYS:HG3	9	0.12
(1,552)	1:A:83:LYS:H	1:A:83:LYS:HE2	4	0.12
(1,552)	1:A:83:LYS:H	1:A:83:LYS:HE3	4	0.12
(1,542)	1:A:79:LYS:H	1:A:79:LYS:HD2	2	0.12
(1,542)	1:A:79:LYS:H	1:A:79:LYS:HD3	2	0.12
(1,493)	1:A:56:GLY:H	1:A:57:MET:HB2	3	0.12
(1,493)	1:A:56:GLY:H	1:A:57:MET:HB3	3	0.12
(1,429)	1:A:22:ALA:H	1:A:20:LEU:HA	10	0.12
(1,382)	1:A:36:PRO:HB2	1:A:10:LEU:HG	10	0.12
(1,296)	1:A:6:GLY:H	1:A:44:VAL:HG11	6	0.12
(1,296)	1:A:6:GLY:H	1:A:44:VAL:HG12	6	0.12
(1,296)	1:A:6:GLY:H	1:A:44:VAL:HG13	6	0.12
(1,296)	1:A:6:GLY:H	1:A:44:VAL:HG21	6	0.12
(1,296)	1:A:6:GLY:H	1:A:44:VAL:HG22	6	0.12
(1,296)	1:A:6:GLY:H	1:A:44:VAL:HG23	6	0.12
(1,285)	1:A:23:LEU:HB2	1:A:95:LEU:HB2	7	0.12
(1,285)	1:A:23:LEU:HB2	1:A:95:LEU:HB3	7	0.12
(1,285)	1:A:23:LEU:HB3	1:A:95:LEU:HB2	7	0.12
(1,285)	1:A:23:LEU:HB3	1:A:95:LEU:HB3	7	0.12
(1,284)	1:A:23:LEU:HB2	1:A:95:LEU:HB2	7	0.12
(1,284)	1:A:23:LEU:HB2	1:A:95:LEU:HB3	7	0.12
(1,284)	1:A:23:LEU:HB3	1:A:95:LEU:HB2	7	0.12
(1,284)	1:A:23:LEU:HB3	1:A:95:LEU:HB3	7	0.12
(1,257)	1:A:112:PHE:H	1:A:128:ILE:HA	7	0.12
(1,25)	1:A:128:ILE:H	1:A:11:GLU:HG2	5	0.12
(1,25)	1:A:128:ILE:H	1:A:11:GLU:HG3	5	0.12
(1,24)	1:A:128:ILE:H	1:A:11:GLU:HB2	5	0.12
(1,24)	1:A:128:ILE:H	1:A:11:GLU:HB3	5	0.12
(1,223)	1:A:121:MET:H	1:A:118:ALA:H	6	0.12
(1,220)	1:A:123:ALA:H	1:A:117:CYS:HA	6	0.12
(1,2004)	1:A:93:SER:HB2	1:A:78:ILE:HG12	10	0.12
(1,1978)	1:A:74:VAL:HG21	1:A:29:SER:HB3	3	0.12
(1,1978)	1:A:74:VAL:HG22	1:A:29:SER:HB3	3	0.12
(1,1978)	1:A:74:VAL:HG23	1:A:29:SER:HB3	3	0.12
(1,1978)	1:A:74:VAL:HG21	1:A:29:SER:HB3	8	0.12
(1,1978)	1:A:74:VAL:HG22	1:A:29:SER:HB3	8	0.12
(1,1978)	1:A:74:VAL:HG23	1:A:29:SER:HB3	8	0.12
(1,1971)	1:A:123:ALA:HB1	1:A:15:ASN:HD22	6	0.12
(1,1971)	1:A:123:ALA:HB2	1:A:15:ASN:HD22	6	0.12
(1,1971)	1:A:123:ALA:HB3	1:A:15:ASN:HD22	6	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1935)	1:A:94:GLU:HG2	1:A:96:PRO:HB2	1	0.12
(1,1935)	1:A:94:GLU:HG3	1:A:96:PRO:HB2	1	0.12
(1,1934)	1:A:99:ARG:HA	1:A:95:LEU:HD21	2	0.12
(1,1934)	1:A:99:ARG:HA	1:A:95:LEU:HD22	2	0.12
(1,1934)	1:A:99:ARG:HA	1:A:95:LEU:HD23	2	0.12
(1,1922)	1:A:65:GLU:HG2	1:A:63:VAL:HG11	7	0.12
(1,1922)	1:A:65:GLU:HG2	1:A:63:VAL:HG12	7	0.12
(1,1922)	1:A:65:GLU:HG2	1:A:63:VAL:HG13	7	0.12
(1,1843)	1:A:15:ASN:HD22	1:A:123:ALA:HB1	6	0.12
(1,1843)	1:A:15:ASN:HD22	1:A:123:ALA:HB2	6	0.12
(1,1843)	1:A:15:ASN:HD22	1:A:123:ALA:HB3	6	0.12
(1,1647)	1:A:14:GLU:H	1:A:124:LYS:HG2	5	0.12
(1,1647)	1:A:14:GLU:H	1:A:124:LYS:HG3	5	0.12
(1,1646)	1:A:14:GLU:H	1:A:124:LYS:HB2	4	0.12
(1,1646)	1:A:14:GLU:H	1:A:124:LYS:HB3	4	0.12
(1,1645)	1:A:14:GLU:H	1:A:124:LYS:HB2	4	0.12
(1,1645)	1:A:14:GLU:H	1:A:124:LYS:HB3	4	0.12
(1,1531)	1:A:130:THR:HB	1:A:7:THR:HB	5	0.12
(1,1479)	1:A:118:ALA:H	1:A:121:MET:HB2	3	0.12
(1,1479)	1:A:118:ALA:H	1:A:121:MET:HB3	3	0.12
(1,1352)	1:A:98:GLY:H	1:A:95:LEU:HD11	7	0.12
(1,1352)	1:A:98:GLY:H	1:A:95:LEU:HD12	7	0.12
(1,1352)	1:A:98:GLY:H	1:A:95:LEU:HD13	7	0.12
(1,1352)	1:A:98:GLY:H	1:A:95:LEU:HD21	7	0.12
(1,1352)	1:A:98:GLY:H	1:A:95:LEU:HD22	7	0.12
(1,1352)	1:A:98:GLY:H	1:A:95:LEU:HD23	7	0.12
(1,132)	1:A:63:VAL:H	1:A:62:ILE:HG21	10	0.12
(1,132)	1:A:63:VAL:H	1:A:62:ILE:HG22	10	0.12
(1,132)	1:A:63:VAL:H	1:A:62:ILE:HG23	10	0.12
(1,1272)	1:A:82:THR:H	1:A:83:LYS:HB2	2	0.12
(1,1272)	1:A:82:THR:H	1:A:83:LYS:HB3	2	0.12
(1,126)	1:A:60:THR:H	1:A:60:THR:HB	8	0.12
(1,119)	1:A:56:GLY:H	1:A:57:MET:H	9	0.12
(1,112)	1:A:54:SER:H	1:A:53:SER:HB2	3	0.12
(1,112)	1:A:54:SER:H	1:A:53:SER:HB3	3	0.12
(1,102)	1:A:50:THR:H	1:A:49:PHE:HB2	7	0.12
(1,102)	1:A:50:THR:H	1:A:49:PHE:HB3	7	0.12
(1,102)	1:A:50:THR:H	1:A:49:PHE:HB2	8	0.12
(1,102)	1:A:50:THR:H	1:A:49:PHE:HB3	8	0.12
(3,33)	1:A:48:LYS:N	1:A:45:ASN:O	3	0.11
(3,18)	1:A:124:LYS:H	1:A:14:GLU:O	9	0.11
(3,15)	1:A:14:GLU:N	1:A:124:LYS:O	2	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,9)	1:A:80:SER:H	1:A:67:VAL:H	7	0.11
(1,888)	1:A:21:ALA:H	1:A:20:LEU:HG	4	0.11
(1,722)	1:A:5:ALA:H	1:A:3:GLN:HG2	10	0.11
(1,722)	1:A:5:ALA:H	1:A:3:GLN:HG3	10	0.11
(1,667)	1:A:88:LYS:HA	1:A:106:GLU:HB2	8	0.11
(1,667)	1:A:88:LYS:HA	1:A:106:GLU:HB3	8	0.11
(1,381)	1:A:39:VAL:HG11	1:A:9:LYS:HG2	7	0.11
(1,381)	1:A:39:VAL:HG12	1:A:9:LYS:HG2	7	0.11
(1,381)	1:A:39:VAL:HG13	1:A:9:LYS:HG2	7	0.11
(1,38)	1:A:15:ASN:H	1:A:15:ASN:HD21	7	0.11
(1,38)	1:A:15:ASN:H	1:A:15:ASN:HD22	7	0.11
(1,351)	1:A:88:LYS:H	1:A:85:GLU:H	2	0.11
(1,29)	1:A:14:GLU:H	1:A:13:ASN:HB2	2	0.11
(1,29)	1:A:14:GLU:H	1:A:13:ASN:HB3	2	0.11
(1,270)	1:A:73:THR:HG21	1:A:33:ALA:HB1	2	0.11
(1,270)	1:A:73:THR:HG21	1:A:33:ALA:HB2	2	0.11
(1,270)	1:A:73:THR:HG21	1:A:33:ALA:HB3	2	0.11
(1,270)	1:A:73:THR:HG22	1:A:33:ALA:HB1	2	0.11
(1,270)	1:A:73:THR:HG22	1:A:33:ALA:HB2	2	0.11
(1,270)	1:A:73:THR:HG22	1:A:33:ALA:HB3	2	0.11
(1,270)	1:A:73:THR:HG23	1:A:33:ALA:HB1	2	0.11
(1,270)	1:A:73:THR:HG23	1:A:33:ALA:HB2	2	0.11
(1,270)	1:A:73:THR:HG23	1:A:33:ALA:HB3	2	0.11
(1,2057)	1:A:113:VAL:HG11	1:A:126:TYR:HE1	4	0.11
(1,2057)	1:A:113:VAL:HG12	1:A:126:TYR:HE1	4	0.11
(1,2057)	1:A:113:VAL:HG13	1:A:126:TYR:HE1	4	0.11
(1,2057)	1:A:113:VAL:HG11	1:A:126:TYR:HE1	6	0.11
(1,2057)	1:A:113:VAL:HG12	1:A:126:TYR:HE1	6	0.11
(1,2057)	1:A:113:VAL:HG13	1:A:126:TYR:HE1	6	0.11
(1,2028)	1:A:91:VAL:HA	1:A:103:ARG:HB2	3	0.11
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD11	1:A:83:LYS:HE2	9	0.11
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD11	1:A:83:LYS:HE3	9	0.11
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD12	1:A:83:LYS:HE2	9	0.11
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD12	1:A:83:LYS:HE3	9	0.11
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD13	1:A:83:LYS:HE2	9	0.11
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD13	1:A:83:LYS:HE3	9	0.11
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD21	1:A:83:LYS:HE2	9	0.11
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD21	1:A:83:LYS:HE3	9	0.11
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD22	1:A:83:LYS:HE2	9	0.11
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD22	1:A:83:LYS:HE3	9	0.11
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD23	1:A:83:LYS:HE2	9	0.11
(1,2014)	1:A:89:LEU:HD23	1:A:83:LYS:HE3	9	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2012)	1:A:89:LEU:HD11	1:A:82:THR:H	4	0.11
(1,2012)	1:A:89:LEU:HD12	1:A:82:THR:H	4	0.11
(1,2012)	1:A:89:LEU:HD13	1:A:82:THR:H	4	0.11
(1,2012)	1:A:89:LEU:HD21	1:A:82:THR:H	4	0.11
(1,2012)	1:A:89:LEU:HD22	1:A:82:THR:H	4	0.11
(1,2012)	1:A:89:LEU:HD23	1:A:82:THR:H	4	0.11
(1,1978)	1:A:74:VAL:HG21	1:A:29:SER:HB3	10	0.11
(1,1978)	1:A:74:VAL:HG22	1:A:29:SER:HB3	10	0.11
(1,1978)	1:A:74:VAL:HG23	1:A:29:SER:HB3	10	0.11
(1,188)	1:A:104:THR:H	1:A:103:ARG:HB2	4	0.11
(1,188)	1:A:104:THR:H	1:A:103:ARG:HB3	4	0.11
(1,188)	1:A:104:THR:H	1:A:103:ARG:HB2	9	0.11
(1,188)	1:A:104:THR:H	1:A:103:ARG:HB3	9	0.11
(1,187)	1:A:104:THR:H	1:A:103:ARG:HB2	4	0.11
(1,187)	1:A:104:THR:H	1:A:103:ARG:HB3	4	0.11
(1,187)	1:A:104:THR:H	1:A:103:ARG:HB2	9	0.11
(1,187)	1:A:104:THR:H	1:A:103:ARG:HB3	9	0.11
(1,1812)	1:A:49:PHE:H	1:A:44:VAL:HG11	2	0.11
(1,1812)	1:A:49:PHE:H	1:A:44:VAL:HG12	2	0.11
(1,1812)	1:A:49:PHE:H	1:A:44:VAL:HG13	2	0.11
(1,1788)	1:A:47:ASN:H	1:A:45:ASN:HB3	1	0.11
(1,1782)	1:A:27:GLN:H	1:A:25:VAL:HG11	7	0.11
(1,1782)	1:A:27:GLN:H	1:A:25:VAL:HG12	7	0.11
(1,1782)	1:A:27:GLN:H	1:A:25:VAL:HG13	7	0.11
(1,1718)	1:A:126:TYR:HB2	1:A:12:LYS:HG2	6	0.11
(1,1718)	1:A:126:TYR:HB2	1:A:12:LYS:HG3	6	0.11
(1,1718)	1:A:126:TYR:HB3	1:A:12:LYS:HG2	6	0.11
(1,1718)	1:A:126:TYR:HB3	1:A:12:LYS:HG3	6	0.11
(1,1717)	1:A:126:TYR:HB2	1:A:12:LYS:HG2	6	0.11
(1,1717)	1:A:126:TYR:HB2	1:A:12:LYS:HG3	6	0.11
(1,1717)	1:A:126:TYR:HB3	1:A:12:LYS:HG2	6	0.11
(1,1717)	1:A:126:TYR:HB3	1:A:12:LYS:HG3	6	0.11
(1,1654)	1:A:16:PHE:HB2	1:A:33:ALA:HB1	2	0.11
(1,1654)	1:A:16:PHE:HB2	1:A:33:ALA:HB2	2	0.11
(1,1654)	1:A:16:PHE:HB2	1:A:33:ALA:HB3	2	0.11
(1,1654)	1:A:16:PHE:HB3	1:A:33:ALA:HB1	2	0.11
(1,1654)	1:A:16:PHE:HB3	1:A:33:ALA:HB2	2	0.11
(1,1654)	1:A:16:PHE:HB3	1:A:33:ALA:HB3	2	0.11
(1,1654)	1:A:16:PHE:HB2	1:A:33:ALA:HB1	9	0.11
(1,1654)	1:A:16:PHE:HB2	1:A:33:ALA:HB2	9	0.11
(1,1654)	1:A:16:PHE:HB2	1:A:33:ALA:HB3	9	0.11
(1,1654)	1:A:16:PHE:HB3	1:A:33:ALA:HB1	9	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1654)	1:A:16:PHE:HB3	1:A:33:ALA:HB2	9	0.11
(1,1654)	1:A:16:PHE:HB3	1:A:33:ALA:HB3	9	0.11
(1,165)	1:A:83:LYS:H	1:A:91:VAL:HA	3	0.11
(1,1630)	1:A:113:VAL:HG11	1:A:126:TYR:HE1	4	0.11
(1,1630)	1:A:113:VAL:HG12	1:A:126:TYR:HE1	4	0.11
(1,1630)	1:A:113:VAL:HG13	1:A:126:TYR:HE1	4	0.11
(1,1630)	1:A:113:VAL:HG11	1:A:126:TYR:HE1	6	0.11
(1,1630)	1:A:113:VAL:HG12	1:A:126:TYR:HE1	6	0.11
(1,1630)	1:A:113:VAL:HG13	1:A:126:TYR:HE1	6	0.11
(1,1626)	1:A:12:LYS:HG2	1:A:126:TYR:HB2	6	0.11
(1,1626)	1:A:12:LYS:HG2	1:A:126:TYR:HB3	6	0.11
(1,1626)	1:A:12:LYS:HG3	1:A:126:TYR:HB2	6	0.11
(1,1626)	1:A:12:LYS:HG3	1:A:126:TYR:HB3	6	0.11
(1,1625)	1:A:12:LYS:HG2	1:A:126:TYR:HB2	6	0.11
(1,1625)	1:A:12:LYS:HG2	1:A:126:TYR:HB3	6	0.11
(1,1625)	1:A:12:LYS:HG3	1:A:126:TYR:HB2	6	0.11
(1,1625)	1:A:12:LYS:HG3	1:A:126:TYR:HB3	6	0.11
(1,135)	1:A:66:GLU:H	1:A:65:GLU:HB2	3	0.11
(1,135)	1:A:66:GLU:H	1:A:65:GLU:HB3	3	0.11
(1,1337)	1:A:79:LYS:H	1:A:93:SER:HB2	5	0.11
(1,1337)	1:A:79:LYS:H	1:A:93:SER:HB3	5	0.11
(1,129)	1:A:51:PHE:H	1:A:62:ILE:HA	8	0.11
(1,129)	1:A:51:PHE:H	1:A:62:ILE:HA	9	0.11
(1,1286)	1:A:88:LYS:H	1:A:84:LEU:HG	2	0.11
(1,126)	1:A:60:THR:H	1:A:60:THR:HB	1	0.11
(1,126)	1:A:60:THR:H	1:A:60:THR:HB	5	0.11
(1,1168)	1:A:66:GLU:H	1:A:65:GLU:HB2	3	0.11
(1,1168)	1:A:66:GLU:H	1:A:65:GLU:HB3	3	0.11
(1,1036)	1:A:50:THR:H	1:A:43:ILE:HB	2	0.11

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

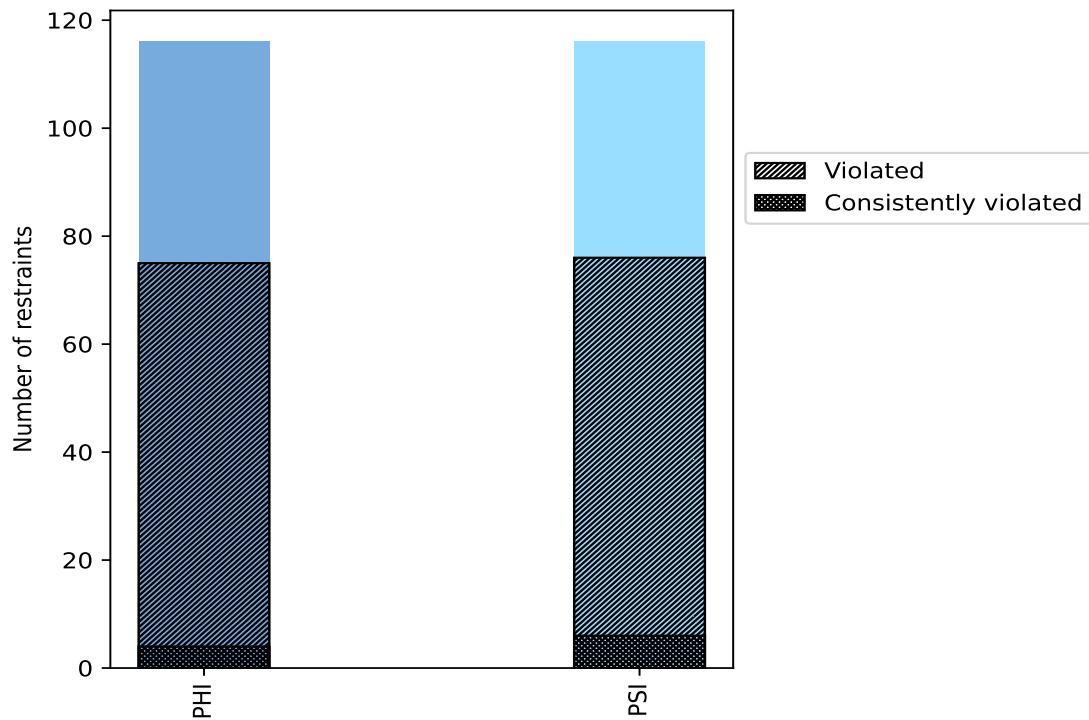
10.1 Summary of dihedral-angle violations [\(i\)](#)

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

Angle type	Count	% ¹	Violated ³			Consistently Violated ⁴		
			Count	% ²	% ¹	Count	% ²	% ¹
PHI	116	50.0	75	64.7	32.3	4	3.4	1.7
PSI	116	50.0	76	65.5	32.8	6	5.2	2.6
Total	232	100.0	151	65.1	65.1	10	4.3	4.3

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

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



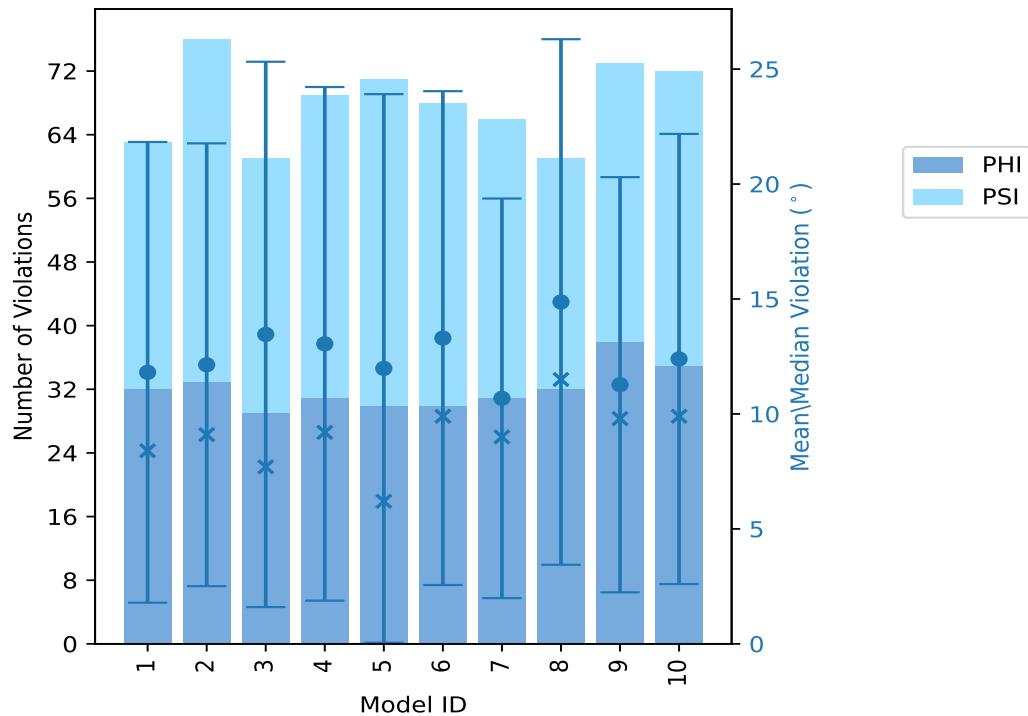
Violated and consistently violated restraints are shown using different hatch patterns in their respective categories

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

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

Model ID	Number of violations			Mean (°)	Max (°)	SD (°)	Median (°)
	PHI	PSI	Total				
1	32	31	63	11.81	53.4	10.02	8.4
2	33	43	76	12.14	54.4	9.63	9.1
3	29	32	61	13.46	54.0	11.86	7.7
4	31	38	69	13.05	59.1	11.17	9.2
5	30	41	71	11.98	51.7	11.93	6.2
6	30	38	68	13.3	50.8	10.74	9.9
7	31	35	66	10.68	39.8	8.69	9.0
8	32	29	61	14.87	55.5	11.43	11.5
9	38	35	73	11.27	49.3	9.03	9.8
10	35	37	72	12.39	52.1	9.79	9.9

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



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

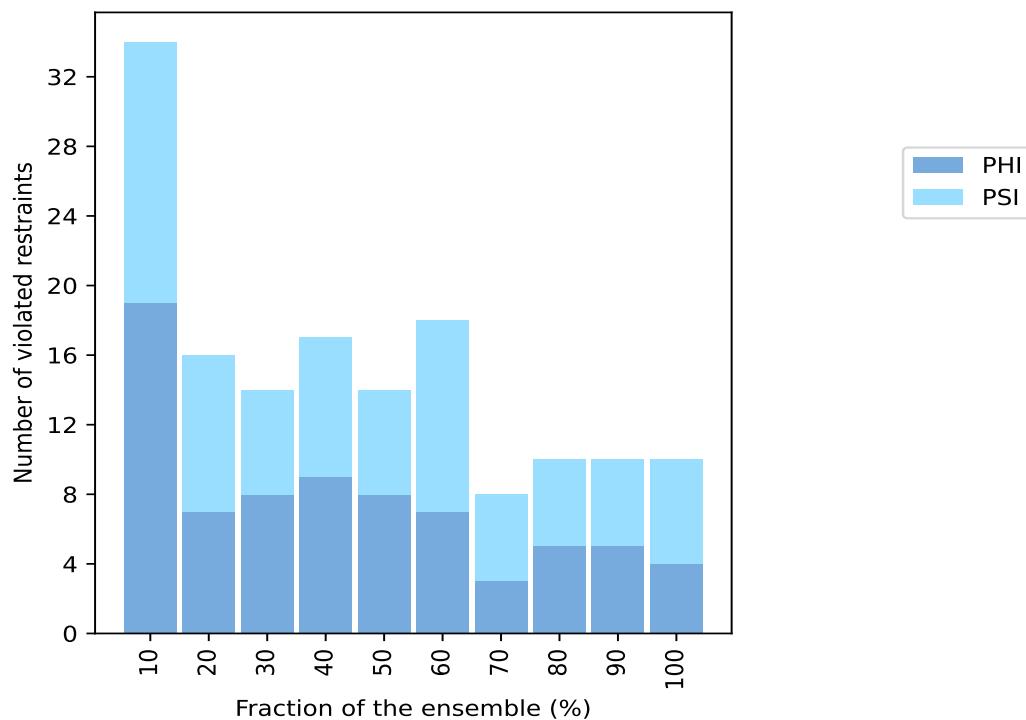
10.3 Dihedral-angle violation statistics for the ensemble [\(i\)](#)

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

Number of violated restraints		Total	Fraction of the ensemble	
PHI	PSI		Count ¹	%
19	15	34	1	10.0
7	9	16	2	20.0
8	6	14	3	30.0
9	8	17	4	40.0
8	6	14	5	50.0
7	11	18	6	60.0
3	5	8	7	70.0
5	5	10	8	80.0
5	5	10	9	90.0
4	6	10	10	100.0

¹ Number of models with violations

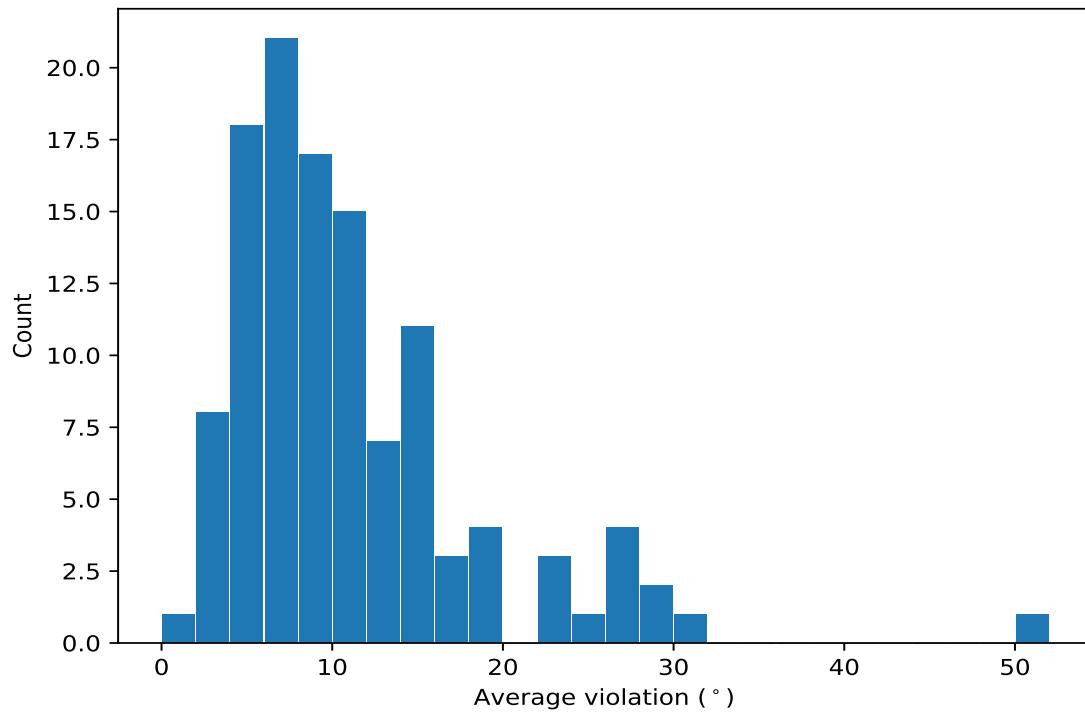
10.3.1 Bar graph : Dihedral-angle Violation statistics for the ensemble [\(i\)](#)



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

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

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



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

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

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,97)	1:A:53:SER:C	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	10	50.41	6.31	51.9
(1,106)	1:A:58:ASN:N	1:A:58:ASN:CA	1:A:58:ASN:C	1:A:59:SER:N	10	30.98	17.18	31.35
(1,67)	1:A:38:VAL:C	1:A:39:VAL:N	1:A:39:VAL:CA	1:A:39:VAL:C	10	26.21	6.5	26.6
(1,98)	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	1:A:55:SER:N	10	26.21	6.2	24.6
(1,214)	1:A:118:ALA:N	1:A:118:ALA:CA	1:A:118:ALA:C	1:A:119:GLY:N	10	25.85	8.24	25.9
(1,14)	1:A:9:LYS:N	1:A:9:LYS:CA	1:A:9:LYS:C	1:A:10:LEU:N	10	16.67	9.17	19.25
(1,190)	1:A:105:TYR:N	1:A:105:TYR:CA	1:A:105:TYR:C	1:A:106:GLU:N	10	15.6	8.09	13.5
(1,181)	1:A:99:ARG:C	1:A:100:LYS:N	1:A:100:LYS:CA	1:A:100:LYS:C	10	15.41	5.94	17.4
(1,169)	1:A:93:SER:C	1:A:94:GLU:N	1:A:94:GLU:CA	1:A:94:GLU:C	10	10.15	4.79	11.25
(1,132)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:ASN:N	10	8.89	5.11	8.15
(1,85)	1:A:47:ASN:C	1:A:48:LYS:N	1:A:48:LYS:CA	1:A:48:LYS:C	9	23.03	11.58	23.0
(1,195)	1:A:107:PHE:C	1:A:108:CYS:N	1:A:108:CYS:CA	1:A:108:CYS:C	9	22.81	7.12	22.4
(1,222)	1:A:124:LYS:N	1:A:124:LYS:CA	1:A:124:LYS:C	1:A:125:ARG:N	9	15.01	9.32	10.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,185)	1:A:102:THR:C	1:A:103:ARG:N	1:A:103:ARG:CA	1:A:103:ARG:C	9	14.77	7.43	13.8
(1,180)	1:A:99:ARG:N	1:A:99:ARG:CA	1:A:99:ARG:C	1:A:100:LYS:N	9	14.07	7.07	17.2
(1,187)	1:A:103:ARG:C	1:A:104:THR:N	1:A:104:THR:CA	1:A:104:THR:C	9	12.64	5.66	10.6
(1,168)	1:A:93:SER:N	1:A:93:SER:CA	1:A:93:SER:C	1:A:94:GLU:N	9	10.92	6.54	9.6
(1,145)	1:A:81:PHE:C	1:A:82:THR:N	1:A:82:THR:CA	1:A:82:THR:C	9	10.69	3.77	9.9
(1,144)	1:A:81:PHE:N	1:A:81:PHE:CA	1:A:81:PHE:C	1:A:82:THR:N	9	7.4	3.74	7.0
(1,82)	1:A:46:GLY:N	1:A:46:GLY:CA	1:A:46:GLY:C	1:A:47:ASN:N	9	6.49	4.97	5.2
(1,128)	1:A:72:GLY:N	1:A:72:GLY:CA	1:A:72:GLY:C	1:A:73:THR:N	8	23.94	13.19	17.15
(1,225)	1:A:125:ARG:C	1:A:126:TYR:N	1:A:126:TYR:CA	1:A:126:TYR:C	8	18.9	9.19	22.2
(1,152)	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	1:A:86:GLY:N	8	16.69	8.07	18.1
(1,5)	1:A:3:GLN:C	1:A:4:LEU:N	1:A:4:LEU:CA	1:A:4:LEU:C	8	14.76	10.65	14.55
(1,167)	1:A:92:ASN:C	1:A:93:SER:N	1:A:93:SER:CA	1:A:93:SER:C	8	12.61	4.63	13.7
(1,6)	1:A:4:LEU:N	1:A:4:LEU:CA	1:A:4:LEU:C	1:A:5:ALA:N	8	10.85	9.86	5.8
(1,7)	1:A:4:LEU:C	1:A:5:ALA:N	1:A:5:ALA:CA	1:A:5:ALA:C	8	10.68	6.11	7.45
(1,89)	1:A:49:PHE:C	1:A:50:THR:N	1:A:50:THR:CA	1:A:50:THR:C	8	9.34	7.61	5.9
(1,154)	1:A:86:GLY:N	1:A:86:GLY:CA	1:A:86:GLY:C	1:A:87:SER:N	8	8.98	4.71	8.6
(1,162)	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	1:A:91:VAL:N	8	8.07	5.19	6.8
(1,202)	1:A:112:PHE:N	1:A:112:PHE:CA	1:A:112:PHE:C	1:A:113:VAL:N	7	27.13	10.64	32.3
(1,116)	1:A:65:GLU:N	1:A:65:GLU:CA	1:A:65:GLU:C	1:A:66:GLU:N	7	15.21	9.07	13.5
(1,191)	1:A:105:TYR:C	1:A:106:GLU:N	1:A:106:GLU:CA	1:A:106:GLU:C	7	10.43	6.91	6.4
(1,3)	1:A:2:VAL:C	1:A:3:GLN:N	1:A:3:GLN:CA	1:A:3:GLN:C	7	9.17	5.36	7.4
(1,165)	1:A:91:VAL:C	1:A:92:ASN:N	1:A:92:ASN:CA	1:A:92:ASN:C	7	8.01	2.89	7.5
(1,134)	1:A:75:ASN:N	1:A:75:ASN:CA	1:A:75:ASN:C	1:A:76:MET:N	7	7.93	3.94	8.2
(1,102)	1:A:56:GLY:N	1:A:56:GLY:CA	1:A:56:GLY:C	1:A:57:MET:N	7	7.67	4.91	6.4
(1,230)	1:A:128:ILE:N	1:A:128:ILE:CA	1:A:128:ILE:C	1:A:129:ARG:N	7	7.46	3.97	6.2
(1,70)	1:A:40:TYR:N	1:A:40:TYR:CA	1:A:40:TYR:C	1:A:41:GLU:N	6	27.93	8.06	26.7
(1,41)	1:A:23:LEU:C	1:A:24:GLY:N	1:A:24:GLY:CA	1:A:24:GLY:C	6	19.08	15.92	17.25
(1,58)	1:A:32:LYS:N	1:A:32:LYS:CA	1:A:32:LYS:C	1:A:33:ALA:N	6	15.87	7.08	14.95
(1,126)	1:A:70:VAL:N	1:A:70:VAL:CA	1:A:70:VAL:C	1:A:71:LEU:N	6	13.85	7.31	18.0
(1,59)	1:A:32:LYS:C	1:A:33:ALA:N	1:A:33:ALA:CA	1:A:33:ALA:C	6	13.38	5.04	14.0
(1,100)	1:A:55:SER:N	1:A:55:SER:CA	1:A:55:SER:C	1:A:56:GLY:N	6	12.47	8.4	10.55
(1,80)	1:A:45:ASN:N	1:A:45:ASN:CA	1:A:45:ASN:C	1:A:46:GLY:N	6	10.82	6.79	10.4
(1,177)	1:A:97:ASP:C	1:A:98:GLY:N	1:A:98:GLY:CA	1:A:98:GLY:C	6	10.78	6.06	11.25
(1,68)	1:A:39:VAL:N	1:A:39:VAL:CA	1:A:39:VAL:C	1:A:40:TYR:N	6	10.77	7.23	11.1
(1,1)	1:A:1:MET:C	1:A:2:VAL:N	1:A:2:VAL:CA	1:A:2:VAL:C	6	10.72	5.67	10.05
(1,206)	1:A:114:LEU:N	1:A:114:LEU:CA	1:A:114:LEU:C	1:A:115:THR:N	6	9.13	3.5	8.55
(1,163)	1:A:90:VAL:C	1:A:91:VAL:N	1:A:91:VAL:CA	1:A:91:VAL:C	6	9.12	5.81	9.85
(1,184)	1:A:102:THR:N	1:A:102:THR:CA	1:A:102:THR:C	1:A:103:ARG:N	6	7.73	3.6	7.55
(1,79)	1:A:44:VAL:C	1:A:45:ASN:N	1:A:45:ASN:CA	1:A:45:ASN:C	6	6.88	3.81	6.65
(1,119)	1:A:66:GLU:C	1:A:67:VAL:N	1:A:67:VAL:CA	1:A:67:VAL:C	6	6.8	3.58	6.3
(1,160)	1:A:89:LEU:N	1:A:89:LEU:CA	1:A:89:LEU:C	1:A:90:VAL:N	6	6.8	4.77	6.85
(1,224)	1:A:125:ARG:N	1:A:125:ARG:CA	1:A:125:ARG:C	1:A:126:TYR:N	6	5.87	2.84	5.45
(1,140)	1:A:79:LYS:N	1:A:79:LYS:CA	1:A:79:LYS:C	1:A:80:SER:N	6	3.3	1.7	3.0
(1,131)	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	5	14.54	7.99	16.2
(1,8)	1:A:5:ALA:N	1:A:5:ALA:CA	1:A:5:ALA:C	1:A:6:GLY:N	5	14.02	8.44	13.3
(1,208)	1:A:115:THR:N	1:A:115:THR:CA	1:A:115:THR:C	1:A:116:MET:N	5	13.88	5.45	11.7
(1,65)	1:A:37:GLY:C	1:A:38:VAL:N	1:A:38:VAL:CA	1:A:38:VAL:C	5	12.44	3.31	13.1
(1,109)	1:A:59:SER:C	1:A:60:THR:N	1:A:60:THR:CA	1:A:60:THR:C	5	10.48	1.54	10.3
(1,147)	1:A:82:THR:C	1:A:83:LYS:N	1:A:83:LYS:CA	1:A:83:LYS:C	5	9.28	4.8	12.0
(1,192)	1:A:106:GLU:N	1:A:106:GLU:CA	1:A:106:GLU:C	1:A:107:PHE:N	5	8.44	3.89	8.8
(1,216)	1:A:120:ASP:N	1:A:120:ASP:CA	1:A:120:ASP:C	1:A:121:MET:N	5	8.02	8.26	3.9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,71)	1:A:40:TYR:C	1:A:41:GLU:N	1:A:41:GLU:CA	1:A:41:GLU:C	5	7.76	4.05	8.1
(1,56)	1:A:31:LYS:N	1:A:31:LYS:CA	1:A:31:LYS:C	1:A:32:LYS:N	5	7.46	3.8	9.5
(1,74)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	1:A:43:ILE:N	5	6.62	3.95	7.5
(1,217)	1:A:121:MET:C	1:A:122:VAL:N	1:A:122:VAL:CA	1:A:122:VAL:C	5	5.86	5.73	1.6
(1,211)	1:A:116:MET:C	1:A:117:CYS:N	1:A:117:CYS:CA	1:A:117:CYS:C	5	5.5	3.65	5.5
(1,123)	1:A:68:GLU:C	1:A:69:GLU:N	1:A:69:GLU:CA	1:A:69:GLU:C	5	4.04	1.55	4.2
(1,201)	1:A:111:GLY:C	1:A:112:PHE:N	1:A:112:PHE:CA	1:A:112:PHE:C	4	19.1	13.0	18.45
(1,40)	1:A:23:LEU:N	1:A:23:LEU:CA	1:A:23:LEU:C	1:A:24:GLY:N	4	16.23	7.6	19.05
(1,135)	1:A:75:ASN:C	1:A:76:MET:N	1:A:76:MET:CA	1:A:76:MET:C	4	14.45	3.36	14.35
(1,50)	1:A:28:ASP:N	1:A:28:ASP:CA	1:A:28:ASP:C	1:A:29:SER:N	4	9.43	3.79	10.95
(1,84)	1:A:47:ASN:N	1:A:47:ASN:CA	1:A:47:ASN:C	1:A:48:LYS:N	4	8.57	2.72	8.85
(1,86)	1:A:48:LYS:N	1:A:48:LYS:CA	1:A:48:LYS:C	1:A:49:PHE:N	4	8.2	4.68	7.5
(1,178)	1:A:98:GLY:N	1:A:98:GLY:CA	1:A:98:GLY:C	1:A:99:ARG:N	4	8.07	4.84	9.0
(1,219)	1:A:122:VAL:C	1:A:123:ALA:N	1:A:123:ALA:CA	1:A:123:ALA:C	4	7.95	3.21	7.05
(1,13)	1:A:8:TYR:C	1:A:9:LYS:N	1:A:9:LYS:CA	1:A:9:LYS:C	4	6.55	2.58	6.6
(1,77)	1:A:43:ILE:C	1:A:44:VAL:N	1:A:44:VAL:CA	1:A:44:VAL:C	4	6.48	1.95	6.8
(1,60)	1:A:33:ALA:N	1:A:33:ALA:CA	1:A:33:ALA:C	1:A:34:ASN:N	4	6.38	1.45	6.8
(1,17)	1:A:10:LEU:C	1:A:11:GLU:N	1:A:11:GLU:CA	1:A:11:GLU:C	4	5.72	5.38	2.9
(1,51)	1:A:28:ASP:C	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	4	5.15	2.12	6.0
(1,42)	1:A:24:GLY:N	1:A:24:GLY:CA	1:A:24:GLY:C	1:A:25:VAL:N	4	4.68	2.94	3.2
(1,83)	1:A:46:GLY:C	1:A:47:ASN:N	1:A:47:ASN:CA	1:A:47:ASN:C	4	4.45	1.67	3.9
(1,171)	1:A:94:GLU:C	1:A:95:LEU:N	1:A:95:LEU:CA	1:A:95:LEU:C	4	4.25	1.66	4.0
(1,130)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	4	3.75	2.59	3.0
(1,193)	1:A:106:GLU:C	1:A:107:PHE:N	1:A:107:PHE:CA	1:A:107:PHE:C	3	29.03	18.34	39.9
(1,179)	1:A:98:GLY:C	1:A:99:ARG:N	1:A:99:ARG:CA	1:A:99:ARG:C	3	10.67	5.47	12.0
(1,166)	1:A:92:ASN:N	1:A:92:ASN:CA	1:A:92:ASN:C	1:A:93:SER:N	3	6.87	3.16	5.1
(1,205)	1:A:113:VAL:C	1:A:114:LEU:N	1:A:114:LEU:CA	1:A:114:LEU:C	3	6.5	1.85	6.2
(1,157)	1:A:87:SER:C	1:A:88:LYS:N	1:A:88:LYS:CA	1:A:88:LYS:C	3	6.1	4.69	4.4
(1,175)	1:A:96:PRO:C	1:A:97:ASP:N	1:A:97:ASP:CA	1:A:97:ASP:C	3	5.97	2.82	6.0
(1,188)	1:A:104:THR:N	1:A:104:THR:CA	1:A:104:THR:C	1:A:105:TYR:N	3	5.83	1.19	5.2
(1,127)	1:A:71:LEU:C	1:A:72:GLY:N	1:A:72:GLY:CA	1:A:72:GLY:C	3	5.8	3.31	5.0
(1,156)	1:A:87:SER:N	1:A:87:SER:CA	1:A:87:SER:C	1:A:88:LYS:N	3	5.73	5.21	2.1
(1,204)	1:A:113:VAL:N	1:A:113:VAL:CA	1:A:113:VAL:C	1:A:114:LEU:N	3	5.7	2.0	5.6
(1,94)	1:A:52:LYS:N	1:A:52:LYS:CA	1:A:52:LYS:C	1:A:53:SER:N	3	3.87	1.99	3.4
(1,81)	1:A:45:ASN:C	1:A:46:GLY:N	1:A:46:GLY:CA	1:A:46:GLY:C	3	3.8	3.07	2.2
(1,53)	1:A:29:SER:C	1:A:30:ILE:N	1:A:30:ILE:CA	1:A:30:ILE:C	3	3.67	0.74	3.6
(1,164)	1:A:91:VAL:N	1:A:91:VAL:CA	1:A:91:VAL:C	1:A:92:ASN:N	3	2.73	1.65	2.1
(1,76)	1:A:43:ILE:N	1:A:43:ILE:CA	1:A:43:ILE:C	1:A:44:VAL:N	2	29.25	3.25	29.25
(1,32)	1:A:19:TYR:N	1:A:19:TYR:CA	1:A:19:TYR:C	1:A:20:LEU:N	2	19.15	11.35	19.15
(1,57)	1:A:31:LYS:C	1:A:32:LYS:N	1:A:32:LYS:CA	1:A:32:LYS:C	2	11.95	10.65	11.95
(1,221)	1:A:123:ALA:C	1:A:124:LYS:N	1:A:124:LYS:CA	1:A:124:LYS:C	2	11.2	3.2	11.2
(1,49)	1:A:27:GLN:C	1:A:28:ASP:N	1:A:28:ASP:CA	1:A:28:ASP:C	2	10.7	4.8	10.7
(1,218)	1:A:122:VAL:N	1:A:122:VAL:CA	1:A:122:VAL:C	1:A:123:ALA:N	2	9.7	7.1	9.7
(1,10)	1:A:7:THR:N	1:A:7:THR:CA	1:A:7:THR:C	1:A:8:TYR:N	2	8.5	4.6	8.5
(1,35)	1:A:20:LEU:C	1:A:21:ALA:N	1:A:21:ALA:CA	1:A:21:ALA:C	2	6.4	1.8	6.4
(1,30)	1:A:18:GLU:N	1:A:18:GLU:CA	1:A:18:GLU:C	1:A:19:TYR:N	2	6.35	1.35	6.35
(1,12)	1:A:8:TYR:N	1:A:8:TYR:CA	1:A:8:TYR:C	1:A:9:LYS:N	2	5.55	0.55	5.55
(1,101)	1:A:55:SER:C	1:A:56:GLY:N	1:A:56:GLY:CA	1:A:56:GLY:C	2	4.85	3.55	4.85
(1,146)	1:A:82:THR:N	1:A:82:THR:CA	1:A:82:THR:C	1:A:83:LYS:N	2	4.1	1.9	4.1
(1,15)	1:A:9:LYS:C	1:A:10:LEU:N	1:A:10:LEU:CA	1:A:10:LEU:C	2	4.05	0.15	4.05
(1,122)	1:A:68:GLU:N	1:A:68:GLU:CA	1:A:68:GLU:C	1:A:69:GLU:N	2	3.1	1.5	3.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

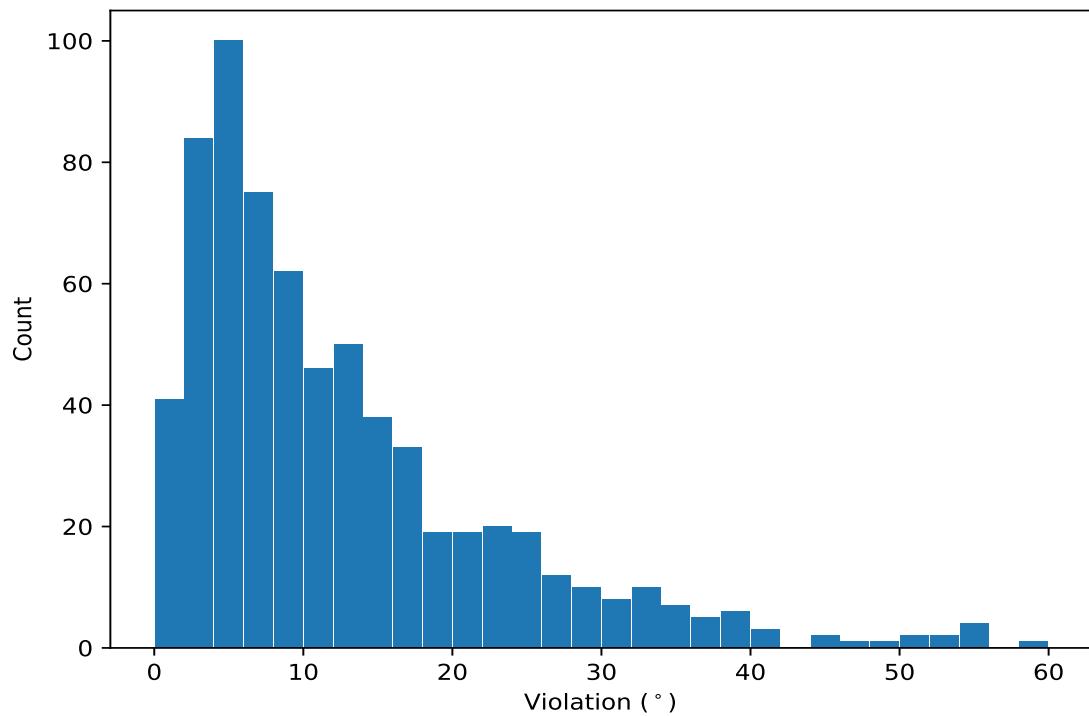
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,210)	1:A:116:MET:N	1:A:116:MET:CA	1:A:116:MET:C	1:A:117:CYS:N	2	2.95	1.65	2.95
(1,115)	1:A:64:ASN:C	1:A:65:GLU:N	1:A:65:GLU:CA	1:A:65:GLU:C	2	1.95	0.25	1.95

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

10.5 All violated dihedral-angle restraints [\(i\)](#)

10.5.1 Histogram : Distribution of violations [\(i\)](#)

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



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

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

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,97)	1:A:53:SER:C	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	4	59.1
(1,97)	1:A:53:SER:C	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	8	55.5
(1,106)	1:A:58:ASN:N	1:A:58:ASN:CA	1:A:58:ASN:C	1:A:59:SER:N	8	55.5
(1,97)	1:A:53:SER:C	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	2	54.4
(1,106)	1:A:58:ASN:N	1:A:58:ASN:CA	1:A:58:ASN:C	1:A:59:SER:N	3	54.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,97)	1:A:53:SER:C	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	1	53.4
(1,97)	1:A:53:SER:C	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	10	52.1
(1,97)	1:A:53:SER:C	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	5	51.7
(1,97)	1:A:53:SER:C	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	6	50.8
(1,97)	1:A:53:SER:C	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	9	49.3
(1,106)	1:A:58:ASN:N	1:A:58:ASN:CA	1:A:58:ASN:C	1:A:59:SER:N	5	47.6
(1,128)	1:A:72:GLY:N	1:A:72:GLY:CA	1:A:72:GLY:C	1:A:73:THR:N	3	45.7
(1,193)	1:A:106:GLU:C	1:A:107:PHE:N	1:A:107:PHE:CA	1:A:107:PHE:C	4	44.0
(1,85)	1:A:47:ASN:C	1:A:48:LYS:N	1:A:48:LYS:CA	1:A:48:LYS:C	6	41.4
(1,41)	1:A:23:LEU:C	1:A:24:GLY:N	1:A:24:GLY:CA	1:A:24:GLY:C	5	40.2
(1,128)	1:A:72:GLY:N	1:A:72:GLY:CA	1:A:72:GLY:C	1:A:73:THR:N	2	40.1
(1,193)	1:A:106:GLU:C	1:A:107:PHE:N	1:A:107:PHE:CA	1:A:107:PHE:C	3	39.9
(1,106)	1:A:58:ASN:N	1:A:58:ASN:CA	1:A:58:ASN:C	1:A:59:SER:N	1	39.9
(1,97)	1:A:53:SER:C	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	7	39.8
(1,214)	1:A:118:ALA:N	1:A:118:ALA:CA	1:A:118:ALA:C	1:A:119:GLY:N	6	39.0
(1,70)	1:A:40:TYR:N	1:A:40:TYR:CA	1:A:40:TYR:C	1:A:41:GLU:N	7	38.3
(1,97)	1:A:53:SER:C	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	3	38.0
(1,70)	1:A:40:TYR:N	1:A:40:TYR:CA	1:A:40:TYR:C	1:A:41:GLU:N	9	37.1
(1,214)	1:A:118:ALA:N	1:A:118:ALA:CA	1:A:118:ALA:C	1:A:119:GLY:N	5	37.1
(1,201)	1:A:111:GLY:C	1:A:112:PHE:N	1:A:112:PHE:CA	1:A:112:PHE:C	9	36.7
(1,202)	1:A:112:PHE:N	1:A:112:PHE:CA	1:A:112:PHE:C	1:A:113:VAL:N	10	36.6
(1,5)	1:A:3:GLN:C	1:A:4:LEU:N	1:A:4:LEU:CA	1:A:4:LEU:C	10	36.3
(1,41)	1:A:23:LEU:C	1:A:24:GLY:N	1:A:24:GLY:CA	1:A:24:GLY:C	4	35.4
(1,202)	1:A:112:PHE:N	1:A:112:PHE:CA	1:A:112:PHE:C	1:A:113:VAL:N	3	35.4
(1,128)	1:A:72:GLY:N	1:A:72:GLY:CA	1:A:72:GLY:C	1:A:73:THR:N	8	35.4
(1,98)	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	1:A:55:SER:N	4	34.9
(1,98)	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	1:A:55:SER:N	5	34.8
(1,202)	1:A:112:PHE:N	1:A:112:PHE:CA	1:A:112:PHE:C	1:A:113:VAL:N	4	34.4
(1,85)	1:A:47:ASN:C	1:A:48:LYS:N	1:A:48:LYS:CA	1:A:48:LYS:C	5	34.2
(1,67)	1:A:38:VAL:C	1:A:39:VAL:N	1:A:39:VAL:CA	1:A:39:VAL:C	2	33.9
(1,222)	1:A:124:LYS:N	1:A:124:LYS:CA	1:A:124:LYS:C	1:A:125:ARG:N	10	33.6
(1,98)	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	1:A:55:SER:N	6	33.4
(1,67)	1:A:38:VAL:C	1:A:39:VAL:N	1:A:39:VAL:CA	1:A:39:VAL:C	6	32.6
(1,76)	1:A:43:ILE:N	1:A:43:ILE:CA	1:A:43:ILE:C	1:A:44:VAL:N	2	32.5
(1,67)	1:A:38:VAL:C	1:A:39:VAL:N	1:A:39:VAL:CA	1:A:39:VAL:C	1	32.5
(1,6)	1:A:4:LEU:N	1:A:4:LEU:CA	1:A:4:LEU:C	1:A:5:ALA:N	4	32.4
(1,202)	1:A:112:PHE:N	1:A:112:PHE:CA	1:A:112:PHE:C	1:A:113:VAL:N	5	32.3
(1,106)	1:A:58:ASN:N	1:A:58:ASN:CA	1:A:58:ASN:C	1:A:59:SER:N	7	32.2
(1,195)	1:A:107:PHE:C	1:A:108:CYS:N	1:A:108:CYS:CA	1:A:108:CYS:C	6	32.1
(1,85)	1:A:47:ASN:C	1:A:48:LYS:N	1:A:48:LYS:CA	1:A:48:LYS:C	1	31.5
(1,195)	1:A:107:PHE:C	1:A:108:CYS:N	1:A:108:CYS:CA	1:A:108:CYS:C	7	30.9
(1,214)	1:A:118:ALA:N	1:A:118:ALA:CA	1:A:118:ALA:C	1:A:119:GLY:N	3	30.7
(1,32)	1:A:19:TYR:N	1:A:19:TYR:CA	1:A:19:TYR:C	1:A:20:LEU:N	2	30.5
(1,106)	1:A:58:ASN:N	1:A:58:ASN:CA	1:A:58:ASN:C	1:A:59:SER:N	10	30.5
(1,116)	1:A:65:GLU:N	1:A:65:GLU:CA	1:A:65:GLU:C	1:A:66:GLU:N	3	30.3
(1,195)	1:A:107:PHE:C	1:A:108:CYS:N	1:A:108:CYS:CA	1:A:108:CYS:C	8	30.1
(1,190)	1:A:105:TYR:N	1:A:105:TYR:CA	1:A:105:TYR:C	1:A:106:GLU:N	6	30.0
(1,67)	1:A:38:VAL:C	1:A:39:VAL:N	1:A:39:VAL:CA	1:A:39:VAL:C	7	29.3
(1,98)	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	1:A:55:SER:N	1	29.2
(1,190)	1:A:105:TYR:N	1:A:105:TYR:CA	1:A:105:TYR:C	1:A:106:GLU:N	8	29.0
(1,100)	1:A:55:SER:N	1:A:55:SER:CA	1:A:55:SER:C	1:A:56:GLY:N	6	29.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,185)	1:A:102:THR:C	1:A:103:ARG:N	1:A:103:ARG:CA	1:A:103:ARG:C	4	28.9
(1,14)	1:A:9:LYS:N	1:A:9:LYS:CA	1:A:9:LYS:C	1:A:10:LEU:N	5	28.9
(1,8)	1:A:5:ALA:N	1:A:5:ALA:CA	1:A:5:ALA:C	1:A:6:GLY:N	3	28.2
(1,225)	1:A:125:ARG:C	1:A:126:TYR:N	1:A:126:TYR:CA	1:A:126:TYR:C	2	28.2
(1,202)	1:A:112:PHE:N	1:A:112:PHE:CA	1:A:112:PHE:C	1:A:113:VAL:N	8	28.2
(1,41)	1:A:23:LEU:C	1:A:24:GLY:N	1:A:24:GLY:CA	1:A:24:GLY:C	6	28.0
(1,225)	1:A:125:ARG:C	1:A:126:TYR:N	1:A:126:TYR:CA	1:A:126:TYR:C	9	27.8
(1,214)	1:A:118:ALA:N	1:A:118:ALA:CA	1:A:118:ALA:C	1:A:119:GLY:N	2	27.8
(1,70)	1:A:40:TYR:N	1:A:40:TYR:CA	1:A:40:TYR:C	1:A:41:GLU:N	5	27.7
(1,67)	1:A:38:VAL:C	1:A:39:VAL:N	1:A:39:VAL:CA	1:A:39:VAL:C	10	27.7
(1,222)	1:A:124:LYS:N	1:A:124:LYS:CA	1:A:124:LYS:C	1:A:125:ARG:N	4	27.3
(1,187)	1:A:103:ARG:C	1:A:104:THR:N	1:A:104:THR:CA	1:A:104:THR:C	5	27.3
(1,14)	1:A:9:LYS:N	1:A:9:LYS:CA	1:A:9:LYS:C	1:A:10:LEU:N	3	27.0
(1,214)	1:A:118:ALA:N	1:A:118:ALA:CA	1:A:118:ALA:C	1:A:119:GLY:N	9	26.8
(1,98)	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	1:A:55:SER:N	9	26.6
(1,58)	1:A:32:LYS:N	1:A:32:LYS:CA	1:A:32:LYS:C	1:A:33:ALA:N	8	26.4
(1,89)	1:A:49:PHE:C	1:A:50:THR:N	1:A:50:THR:CA	1:A:50:THR:C	2	26.1
(1,76)	1:A:43:ILE:N	1:A:43:ILE:CA	1:A:43:ILE:C	1:A:44:VAL:N	6	26.0
(1,185)	1:A:102:THR:C	1:A:103:ARG:N	1:A:103:ARG:CA	1:A:103:ARG:C	2	25.9
(1,152)	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	1:A:86:GLY:N	3	25.9
(1,70)	1:A:40:TYR:N	1:A:40:TYR:CA	1:A:40:TYR:C	1:A:41:GLU:N	10	25.7
(1,67)	1:A:38:VAL:C	1:A:39:VAL:N	1:A:39:VAL:CA	1:A:39:VAL:C	8	25.5
(1,225)	1:A:125:ARG:C	1:A:126:TYR:N	1:A:126:TYR:CA	1:A:126:TYR:C	8	25.5
(1,201)	1:A:111:GLY:C	1:A:112:PHE:N	1:A:112:PHE:CA	1:A:112:PHE:C	1	25.5
(1,168)	1:A:93:SER:N	1:A:93:SER:CA	1:A:93:SER:C	1:A:94:GLU:N	6	25.4
(1,214)	1:A:118:ALA:N	1:A:118:ALA:CA	1:A:118:ALA:C	1:A:119:GLY:N	8	25.0
(1,85)	1:A:47:ASN:C	1:A:48:LYS:N	1:A:48:LYS:CA	1:A:48:LYS:C	10	24.9
(1,67)	1:A:38:VAL:C	1:A:39:VAL:N	1:A:39:VAL:CA	1:A:39:VAL:C	3	24.8
(1,214)	1:A:118:ALA:N	1:A:118:ALA:CA	1:A:118:ALA:C	1:A:119:GLY:N	4	24.6
(1,67)	1:A:38:VAL:C	1:A:39:VAL:N	1:A:39:VAL:CA	1:A:39:VAL:C	4	24.4
(1,152)	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	1:A:86:GLY:N	6	24.4
(1,131)	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	9	24.4
(1,70)	1:A:40:TYR:N	1:A:40:TYR:CA	1:A:40:TYR:C	1:A:41:GLU:N	3	24.3
(1,195)	1:A:107:PHE:C	1:A:108:CYS:N	1:A:108:CYS:CA	1:A:108:CYS:C	10	24.2
(1,191)	1:A:105:TYR:C	1:A:106:GLU:N	1:A:106:GLU:CA	1:A:106:GLU:C	3	24.2
(1,5)	1:A:3:GLN:C	1:A:4:LEU:N	1:A:4:LEU:CA	1:A:4:LEU:C	1	24.1
(1,216)	1:A:120:ASP:N	1:A:120:ASP:CA	1:A:120:ASP:C	1:A:121:MET:N	8	24.0
(1,152)	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	1:A:86:GLY:N	4	23.8
(1,225)	1:A:125:ARG:C	1:A:126:TYR:N	1:A:126:TYR:CA	1:A:126:TYR:C	10	23.7
(1,183)	1:A:101:GLY:C	1:A:102:THR:N	1:A:102:THR:CA	1:A:102:THR:C	5	23.5
(1,14)	1:A:9:LYS:N	1:A:9:LYS:CA	1:A:9:LYS:C	1:A:10:LEU:N	4	23.5
(1,180)	1:A:99:ARG:N	1:A:99:ARG:CA	1:A:99:ARG:C	1:A:100:LYS:N	8	23.4
(1,85)	1:A:47:ASN:C	1:A:48:LYS:N	1:A:48:LYS:CA	1:A:48:LYS:C	2	23.0
(1,14)	1:A:9:LYS:N	1:A:9:LYS:CA	1:A:9:LYS:C	1:A:10:LEU:N	6	23.0
(1,40)	1:A:23:LEU:N	1:A:23:LEU:CA	1:A:23:LEU:C	1:A:24:GLY:N	5	22.9
(1,116)	1:A:65:GLU:N	1:A:65:GLU:CA	1:A:65:GLU:C	1:A:66:GLU:N	6	22.8
(1,85)	1:A:47:ASN:C	1:A:48:LYS:N	1:A:48:LYS:CA	1:A:48:LYS:C	4	22.7
(1,98)	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	1:A:55:SER:N	8	22.6
(1,58)	1:A:32:LYS:N	1:A:32:LYS:CA	1:A:32:LYS:C	1:A:33:ALA:N	5	22.6
(1,57)	1:A:31:LYS:C	1:A:32:LYS:N	1:A:32:LYS:CA	1:A:32:LYS:C	8	22.6
(1,180)	1:A:99:ARG:N	1:A:99:ARG:CA	1:A:99:ARG:C	1:A:100:LYS:N	7	22.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,98)	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	1:A:55:SER:N	10	22.4
(1,195)	1:A:107:PHE:C	1:A:108:CYS:N	1:A:108:CYS:CA	1:A:108:CYS:C	4	22.4
(1,181)	1:A:99:ARG:C	1:A:100:LYS:N	1:A:100:LYS:CA	1:A:100:LYS:C	7	22.4
(1,80)	1:A:45:ASN:N	1:A:45:ASN:CA	1:A:45:ASN:C	1:A:46:GLY:N	8	22.3
(1,40)	1:A:23:LEU:N	1:A:23:LEU:CA	1:A:23:LEU:C	1:A:24:GLY:N	6	22.1
(1,181)	1:A:99:ARG:C	1:A:100:LYS:N	1:A:100:LYS:CA	1:A:100:LYS:C	9	22.0
(1,208)	1:A:115:THR:N	1:A:115:THR:CA	1:A:115:THR:C	1:A:116:MET:N	5	21.9
(1,181)	1:A:99:ARG:C	1:A:100:LYS:N	1:A:100:LYS:CA	1:A:100:LYS:C	8	21.6
(1,7)	1:A:4:LEU:C	1:A:5:ALA:N	1:A:5:ALA:CA	1:A:5:ALA:C	1	21.5
(1,131)	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	8	21.5
(1,1)	1:A:1:MET:C	1:A:2:VAL:N	1:A:2:VAL:CA	1:A:2:VAL:C	1	21.4
(1,6)	1:A:4:LEU:N	1:A:4:LEU:CA	1:A:4:LEU:C	1:A:5:ALA:N	3	21.3
(1,190)	1:A:105:TYR:N	1:A:105:TYR:CA	1:A:105:TYR:C	1:A:106:GLU:N	9	21.3
(1,116)	1:A:65:GLU:N	1:A:65:GLU:CA	1:A:65:GLU:C	1:A:66:GLU:N	8	21.3
(1,20)	1:A:12:LYS:N	1:A:12:LYS:CA	1:A:12:LYS:C	1:A:13:ASN:N	1	21.2
(1,98)	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	1:A:55:SER:N	3	20.9
(1,68)	1:A:39:VAL:N	1:A:39:VAL:CA	1:A:39:VAL:C	1:A:40:TYR:N	8	20.9
(1,225)	1:A:125:ARG:C	1:A:126:TYR:N	1:A:126:TYR:CA	1:A:126:TYR:C	5	20.7
(1,195)	1:A:107:PHE:C	1:A:108:CYS:N	1:A:108:CYS:CA	1:A:108:CYS:C	1	20.5
(1,67)	1:A:38:VAL:C	1:A:39:VAL:N	1:A:39:VAL:CA	1:A:39:VAL:C	9	20.4
(1,106)	1:A:58:ASN:N	1:A:58:ASN:CA	1:A:58:ASN:C	1:A:59:SER:N	2	20.4
(1,14)	1:A:9:LYS:N	1:A:9:LYS:CA	1:A:9:LYS:C	1:A:10:LEU:N	10	20.2
(1,98)	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	1:A:55:SER:N	7	20.1
(1,214)	1:A:118:ALA:N	1:A:118:ALA:CA	1:A:118:ALA:C	1:A:119:GLY:N	1	20.1
(1,126)	1:A:70:VAL:N	1:A:70:VAL:CA	1:A:70:VAL:C	1:A:71:LEU:N	5	20.0
(1,126)	1:A:70:VAL:N	1:A:70:VAL:CA	1:A:70:VAL:C	1:A:71:LEU:N	7	19.9
(1,85)	1:A:47:ASN:C	1:A:48:LYS:N	1:A:48:LYS:CA	1:A:48:LYS:C	8	19.8
(1,82)	1:A:46:GLY:N	1:A:46:GLY:CA	1:A:46:GLY:C	1:A:47:ASN:N	6	19.8
(1,222)	1:A:124:LYS:N	1:A:124:LYS:CA	1:A:124:LYS:C	1:A:125:ARG:N	6	19.8
(1,197)	1:A:108:CYS:C	1:A:109:ASP:N	1:A:109:ASP:CA	1:A:109:ASP:C	4	19.8
(1,59)	1:A:32:LYS:C	1:A:33:ALA:N	1:A:33:ALA:CA	1:A:33:ALA:C	10	19.6
(1,195)	1:A:107:PHE:C	1:A:108:CYS:N	1:A:108:CYS:CA	1:A:108:CYS:C	2	19.5
(1,7)	1:A:4:LEU:C	1:A:5:ALA:N	1:A:5:ALA:CA	1:A:5:ALA:C	5	19.4
(1,135)	1:A:75:ASN:C	1:A:76:MET:N	1:A:76:MET:CA	1:A:76:MET:C	7	19.3
(1,181)	1:A:99:ARG:C	1:A:100:LYS:N	1:A:100:LYS:CA	1:A:100:LYS:C	1	19.0
(1,126)	1:A:70:VAL:N	1:A:70:VAL:CA	1:A:70:VAL:C	1:A:71:LEU:N	8	18.8
(1,194)	1:A:107:PHE:N	1:A:107:PHE:CA	1:A:107:PHE:C	1:A:108:CYS:N	4	18.7
(1,167)	1:A:92:ASN:C	1:A:93:SER:N	1:A:93:SER:CA	1:A:93:SER:C	3	18.7
(1,208)	1:A:115:THR:N	1:A:115:THR:CA	1:A:115:THR:C	1:A:116:MET:N	10	18.5
(1,181)	1:A:99:ARG:C	1:A:100:LYS:N	1:A:100:LYS:CA	1:A:100:LYS:C	3	18.5
(1,163)	1:A:90:VAL:C	1:A:91:VAL:N	1:A:91:VAL:CA	1:A:91:VAL:C	2	18.5
(1,152)	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	1:A:86:GLY:N	5	18.4
(1,14)	1:A:9:LYS:N	1:A:9:LYS:CA	1:A:9:LYS:C	1:A:10:LEU:N	8	18.3
(1,177)	1:A:97:ASP:C	1:A:98:GLY:N	1:A:98:GLY:CA	1:A:98:GLY:C	10	18.2
(1,152)	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	1:A:86:GLY:N	7	17.8
(1,58)	1:A:32:LYS:N	1:A:32:LYS:CA	1:A:32:LYS:C	1:A:33:ALA:N	10	17.7
(1,3)	1:A:2:VAL:C	1:A:3:GLN:N	1:A:3:GLN:CA	1:A:3:GLN:C	9	17.7
(1,180)	1:A:99:ARG:N	1:A:99:ARG:CA	1:A:99:ARG:C	1:A:100:LYS:N	2	17.7
(1,180)	1:A:99:ARG:N	1:A:99:ARG:CA	1:A:99:ARG:C	1:A:100:LYS:N	10	17.6
(1,169)	1:A:93:SER:C	1:A:94:GLU:N	1:A:94:GLU:CA	1:A:94:GLU:C	1	17.6
(1,59)	1:A:32:LYS:C	1:A:33:ALA:N	1:A:33:ALA:CA	1:A:33:ALA:C	8	17.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,132)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:ASN:N	8	17.3
(1,98)	1:A:54:SER:N	1:A:54:SER:CA	1:A:54:SER:C	1:A:55:SER:N	2	17.2
(1,202)	1:A:112:PHE:N	1:A:112:PHE:CA	1:A:112:PHE:C	1:A:113:VAL:N	7	17.2
(1,180)	1:A:99:ARG:N	1:A:99:ARG:CA	1:A:99:ARG:C	1:A:100:LYS:N	3	17.2
(1,154)	1:A:86:GLY:N	1:A:86:GLY:CA	1:A:86:GLY:C	1:A:87:SER:N	2	17.2
(1,128)	1:A:72:GLY:N	1:A:72:GLY:CA	1:A:72:GLY:C	1:A:73:THR:N	1	17.2
(1,126)	1:A:70:VAL:N	1:A:70:VAL:CA	1:A:70:VAL:C	1:A:71:LEU:N	10	17.2
(1,128)	1:A:72:GLY:N	1:A:72:GLY:CA	1:A:72:GLY:C	1:A:73:THR:N	5	17.1
(1,167)	1:A:92:ASN:C	1:A:93:SER:N	1:A:93:SER:CA	1:A:93:SER:C	10	17.0
(1,8)	1:A:5:ALA:N	1:A:5:ALA:CA	1:A:5:ALA:C	1:A:6:GLY:N	4	16.9
(1,214)	1:A:118:ALA:N	1:A:118:ALA:CA	1:A:118:ALA:C	1:A:119:GLY:N	10	16.9
(1,162)	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	1:A:91:VAL:N	2	16.9
(1,218)	1:A:122:VAL:N	1:A:122:VAL:CA	1:A:122:VAL:C	1:A:123:ALA:N	9	16.8
(1,195)	1:A:107:PHE:C	1:A:108:CYS:N	1:A:108:CYS:CA	1:A:108:CYS:C	9	16.8
(1,179)	1:A:98:GLY:C	1:A:99:ARG:N	1:A:99:ARG:CA	1:A:99:ARG:C	3	16.6
(1,145)	1:A:81:PHE:C	1:A:82:THR:N	1:A:82:THR:CA	1:A:82:THR:C	9	16.6
(1,68)	1:A:39:VAL:N	1:A:39:VAL:CA	1:A:39:VAL:C	1:A:40:TYR:N	2	16.5
(1,191)	1:A:105:TYR:C	1:A:106:GLU:N	1:A:106:GLU:CA	1:A:106:GLU:C	6	16.4
(1,181)	1:A:99:ARG:C	1:A:100:LYS:N	1:A:100:LYS:CA	1:A:100:LYS:C	10	16.3
(1,177)	1:A:97:ASP:C	1:A:98:GLY:N	1:A:98:GLY:CA	1:A:98:GLY:C	9	16.3
(1,167)	1:A:92:ASN:C	1:A:93:SER:N	1:A:93:SER:CA	1:A:93:SER:C	9	16.2
(1,131)	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	2	16.2
(1,65)	1:A:37:GLY:C	1:A:38:VAL:N	1:A:38:VAL:CA	1:A:38:VAL:C	10	16.1
(1,40)	1:A:23:LEU:N	1:A:23:LEU:CA	1:A:23:LEU:C	1:A:24:GLY:N	4	16.0
(1,225)	1:A:125:ARG:C	1:A:126:TYR:N	1:A:126:TYR:CA	1:A:126:TYR:C	4	16.0
(1,168)	1:A:93:SER:N	1:A:93:SER:CA	1:A:93:SER:C	1:A:94:GLU:N	2	16.0
(1,185)	1:A:102:THR:C	1:A:103:ARG:N	1:A:103:ARG:CA	1:A:103:ARG:C	7	15.9
(1,65)	1:A:37:GLY:C	1:A:38:VAL:N	1:A:38:VAL:CA	1:A:38:VAL:C	4	15.8
(1,160)	1:A:89:LEU:N	1:A:89:LEU:CA	1:A:89:LEU:C	1:A:90:VAL:N	6	15.8
(1,59)	1:A:32:LYS:C	1:A:33:ALA:N	1:A:33:ALA:CA	1:A:33:ALA:C	2	15.7
(1,100)	1:A:55:SER:N	1:A:55:SER:CA	1:A:55:SER:C	1:A:56:GLY:N	4	15.7
(1,102)	1:A:56:GLY:N	1:A:56:GLY:CA	1:A:56:GLY:C	1:A:57:MET:N	9	15.6
(1,68)	1:A:39:VAL:N	1:A:39:VAL:CA	1:A:39:VAL:C	1:A:40:TYR:N	4	15.5
(1,49)	1:A:27:GLN:C	1:A:28:ASP:N	1:A:28:ASP:CA	1:A:28:ASP:C	9	15.5
(1,187)	1:A:103:ARG:C	1:A:104:THR:N	1:A:104:THR:CA	1:A:104:THR:C	9	15.5
(1,86)	1:A:48:LYS:N	1:A:48:LYS:CA	1:A:48:LYS:C	1:A:49:PHE:N	10	15.4
(1,3)	1:A:2:VAL:C	1:A:3:GLN:N	1:A:3:GLN:CA	1:A:3:GLN:C	7	15.4
(1,206)	1:A:114:LEU:N	1:A:114:LEU:CA	1:A:114:LEU:C	1:A:115:THR:N	8	15.4
(1,134)	1:A:75:ASN:N	1:A:75:ASN:CA	1:A:75:ASN:C	1:A:76:MET:N	4	15.4
(1,89)	1:A:49:PHE:C	1:A:50:THR:N	1:A:50:THR:CA	1:A:50:THR:C	1	15.3
(1,144)	1:A:81:PHE:N	1:A:81:PHE:CA	1:A:81:PHE:C	1:A:82:THR:N	2	15.3
(1,5)	1:A:3:GLN:C	1:A:4:LEU:N	1:A:4:LEU:CA	1:A:4:LEU:C	3	15.2
(1,217)	1:A:121:MET:C	1:A:122:VAL:N	1:A:122:VAL:CA	1:A:122:VAL:C	7	15.1
(1,152)	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	1:A:86:GLY:N	1	15.1
(1,185)	1:A:102:THR:C	1:A:103:ARG:N	1:A:103:ARG:CA	1:A:103:ARG:C	10	15.0
(1,17)	1:A:10:LEU:C	1:A:11:GLU:N	1:A:11:GLU:CA	1:A:11:GLU:C	6	15.0
(1,168)	1:A:93:SER:N	1:A:93:SER:CA	1:A:93:SER:C	1:A:94:GLU:N	1	15.0
(1,5)	1:A:3:GLN:C	1:A:4:LEU:N	1:A:4:LEU:CA	1:A:4:LEU:C	8	14.9
(1,177)	1:A:97:ASP:C	1:A:98:GLY:N	1:A:98:GLY:CA	1:A:98:GLY:C	1	14.9
(1,162)	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	1:A:91:VAL:N	9	14.8
(1,145)	1:A:81:PHE:C	1:A:82:THR:N	1:A:82:THR:CA	1:A:82:THR:C	5	14.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,190)	1:A:105:TYR:N	1:A:105:TYR:CA	1:A:105:TYR:C	1:A:106:GLU:N	7	14.7
(1,167)	1:A:92:ASN:C	1:A:93:SER:N	1:A:93:SER:CA	1:A:93:SER:C	6	14.7
(1,147)	1:A:82:THR:C	1:A:83:LYS:N	1:A:83:LYS:CA	1:A:83:LYS:C	1	14.7
(1,135)	1:A:75:ASN:C	1:A:76:MET:N	1:A:76:MET:CA	1:A:76:MET:C	4	14.6
(1,70)	1:A:40:TYR:N	1:A:40:TYR:CA	1:A:40:TYR:C	1:A:41:GLU:N	4	14.5
(1,132)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:ASN:N	7	14.5
(1,221)	1:A:123:ALA:C	1:A:124:LYS:N	1:A:124:LYS:CA	1:A:124:LYS:C	8	14.4
(1,192)	1:A:106:GLU:N	1:A:106:GLU:CA	1:A:106:GLU:C	1:A:107:PHE:N	10	14.3
(1,80)	1:A:45:ASN:N	1:A:45:ASN:CA	1:A:45:ASN:C	1:A:46:GLY:N	1	14.2
(1,5)	1:A:3:GLN:C	1:A:4:LEU:N	1:A:4:LEU:CA	1:A:4:LEU:C	5	14.2
(1,169)	1:A:93:SER:C	1:A:94:GLU:N	1:A:94:GLU:CA	1:A:94:GLU:C	4	14.1
(1,135)	1:A:75:ASN:C	1:A:76:MET:N	1:A:76:MET:CA	1:A:76:MET:C	2	14.1
(1,190)	1:A:105:TYR:N	1:A:105:TYR:CA	1:A:105:TYR:C	1:A:106:GLU:N	4	14.0
(1,80)	1:A:45:ASN:N	1:A:45:ASN:CA	1:A:45:ASN:C	1:A:46:GLY:N	5	13.9
(1,230)	1:A:128:ILE:N	1:A:128:ILE:CA	1:A:128:ILE:C	1:A:129:ARG:N	8	13.8
(1,185)	1:A:102:THR:C	1:A:103:ARG:N	1:A:103:ARG:CA	1:A:103:ARG:C	5	13.8
(1,169)	1:A:93:SER:C	1:A:94:GLU:N	1:A:94:GLU:CA	1:A:94:GLU:C	6	13.8
(1,71)	1:A:40:TYR:C	1:A:41:GLU:N	1:A:41:GLU:CA	1:A:41:GLU:C	9	13.7
(1,79)	1:A:44:VAL:C	1:A:45:ASN:N	1:A:45:ASN:CA	1:A:45:ASN:C	9	13.6
(1,184)	1:A:102:THR:N	1:A:102:THR:CA	1:A:102:THR:C	1:A:103:ARG:N	2	13.6
(1,154)	1:A:86:GLY:N	1:A:86:GLY:CA	1:A:86:GLY:C	1:A:87:SER:N	5	13.6
(1,116)	1:A:65:GLU:N	1:A:65:GLU:CA	1:A:65:GLU:C	1:A:66:GLU:N	9	13.5
(1,132)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:ASN:N	6	13.4
(1,8)	1:A:5:ALA:N	1:A:5:ALA:CA	1:A:5:ALA:C	1:A:6:GLY:N	6	13.3
(1,180)	1:A:99:ARG:N	1:A:99:ARG:CA	1:A:99:ARG:C	1:A:100:LYS:N	6	13.3
(1,169)	1:A:93:SER:C	1:A:94:GLU:N	1:A:94:GLU:CA	1:A:94:GLU:C	7	13.3
(1,106)	1:A:58:ASN:N	1:A:58:ASN:CA	1:A:58:ASN:C	1:A:59:SER:N	6	13.3
(1,219)	1:A:122:VAL:C	1:A:123:ALA:N	1:A:123:ALA:CA	1:A:123:ALA:C	1	13.2
(1,1)	1:A:1:MET:C	1:A:2:VAL:N	1:A:2:VAL:CA	1:A:2:VAL:C	4	13.2
(1,65)	1:A:37:GLY:C	1:A:38:VAL:N	1:A:38:VAL:CA	1:A:38:VAL:C	2	13.1
(1,156)	1:A:87:SER:N	1:A:87:SER:CA	1:A:87:SER:C	1:A:88:LYS:N	3	13.1
(1,128)	1:A:72:GLY:N	1:A:72:GLY:CA	1:A:72:GLY:C	1:A:73:THR:N	4	13.1
(1,10)	1:A:7:THR:N	1:A:7:THR:CA	1:A:7:THR:C	1:A:8:TYR:N	4	13.1
(1,73)	1:A:41:GLU:C	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	8	13.0
(1,190)	1:A:105:TYR:N	1:A:105:TYR:CA	1:A:105:TYR:C	1:A:106:GLU:N	2	13.0
(1,178)	1:A:98:GLY:N	1:A:98:GLY:CA	1:A:98:GLY:C	1:A:99:ARG:N	2	13.0
(1,109)	1:A:59:SER:C	1:A:60:THR:N	1:A:60:THR:CA	1:A:60:THR:C	1	13.0
(1,50)	1:A:28:ASP:N	1:A:28:ASP:CA	1:A:28:ASP:C	1:A:29:SER:N	2	12.8
(1,7)	1:A:4:LEU:C	1:A:5:ALA:N	1:A:5:ALA:CA	1:A:5:ALA:C	9	12.7
(1,222)	1:A:124:LYS:N	1:A:124:LYS:CA	1:A:124:LYS:C	1:A:125:ARG:N	5	12.7
(1,167)	1:A:92:ASN:C	1:A:93:SER:N	1:A:93:SER:CA	1:A:93:SER:C	2	12.7
(1,147)	1:A:82:THR:C	1:A:83:LYS:N	1:A:83:LYS:CA	1:A:83:LYS:C	7	12.7
(1,128)	1:A:72:GLY:N	1:A:72:GLY:CA	1:A:72:GLY:C	1:A:73:THR:N	10	12.7
(1,187)	1:A:103:ARG:C	1:A:104:THR:N	1:A:104:THR:CA	1:A:104:THR:C	10	12.6
(1,74)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	1:A:43:ILE:N	6	12.5
(1,163)	1:A:90:VAL:C	1:A:91:VAL:N	1:A:91:VAL:CA	1:A:91:VAL:C	10	12.5
(1,157)	1:A:87:SER:C	1:A:88:LYS:N	1:A:88:LYS:CA	1:A:88:LYS:C	3	12.5
(1,119)	1:A:66:GLU:C	1:A:67:VAL:N	1:A:67:VAL:CA	1:A:67:VAL:C	7	12.5
(1,132)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:ASN:N	9	12.4
(1,59)	1:A:32:LYS:C	1:A:33:ALA:N	1:A:33:ALA:CA	1:A:33:ALA:C	7	12.3
(1,187)	1:A:103:ARG:C	1:A:104:THR:N	1:A:104:THR:CA	1:A:104:THR:C	3	12.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,178)	1:A:98:GLY:N	1:A:98:GLY:CA	1:A:98:GLY:C	1:A:99:ARG:N	1	12.3
(1,58)	1:A:32:LYS:N	1:A:32:LYS:CA	1:A:32:LYS:C	1:A:33:ALA:N	2	12.2
(1,169)	1:A:93:SER:C	1:A:94:GLU:N	1:A:94:GLU:CA	1:A:94:GLU:C	8	12.2
(1,165)	1:A:91:VAL:C	1:A:92:ASN:N	1:A:92:ASN:CA	1:A:92:ASN:C	5	12.2
(1,145)	1:A:81:PHE:C	1:A:82:THR:N	1:A:82:THR:CA	1:A:82:THR:C	1	12.2
(1,84)	1:A:47:ASN:N	1:A:47:ASN:CA	1:A:47:ASN:C	1:A:48:LYS:N	5	12.1
(1,102)	1:A:56:GLY:N	1:A:56:GLY:CA	1:A:56:GLY:C	1:A:57:MET:N	7	12.1
(1,211)	1:A:116:MET:C	1:A:117:CYS:N	1:A:117:CYS:CA	1:A:117:CYS:C	6	12.0
(1,179)	1:A:98:GLY:C	1:A:99:ARG:N	1:A:99:ARG:CA	1:A:99:ARG:C	9	12.0
(1,147)	1:A:82:THR:C	1:A:83:LYS:N	1:A:83:LYS:CA	1:A:83:LYS:C	5	12.0
(1,14)	1:A:9:LYS:N	1:A:9:LYS:CA	1:A:9:LYS:C	1:A:10:LEU:N	9	12.0
(1,100)	1:A:55:SER:N	1:A:55:SER:CA	1:A:55:SER:C	1:A:56:GLY:N	9	12.0
(1,154)	1:A:86:GLY:N	1:A:86:GLY:CA	1:A:86:GLY:C	1:A:87:SER:N	6	11.8
(1,89)	1:A:49:PHE:C	1:A:50:THR:N	1:A:50:THR:CA	1:A:50:THR:C	3	11.7
(1,56)	1:A:31:LYS:N	1:A:31:LYS:CA	1:A:31:LYS:C	1:A:32:LYS:N	3	11.7
(1,208)	1:A:115:THR:N	1:A:115:THR:CA	1:A:115:THR:C	1:A:116:MET:N	9	11.7
(1,145)	1:A:81:PHE:C	1:A:82:THR:N	1:A:82:THR:CA	1:A:82:THR:C	10	11.7
(1,230)	1:A:128:ILE:N	1:A:128:ILE:CA	1:A:128:ILE:C	1:A:129:ARG:N	6	11.6
(1,190)	1:A:105:TYR:N	1:A:105:TYR:CA	1:A:105:TYR:C	1:A:106:GLU:N	10	11.5
(1,168)	1:A:93:SER:N	1:A:93:SER:CA	1:A:93:SER:C	1:A:94:GLU:N	8	11.5
(1,201)	1:A:111:GLY:C	1:A:112:PHE:N	1:A:112:PHE:CA	1:A:112:PHE:C	2	11.4
(1,3)	1:A:2:VAL:C	1:A:3:GLN:N	1:A:3:GLN:CA	1:A:3:GLN:C	2	11.3
(1,166)	1:A:92:ASN:N	1:A:92:ASN:CA	1:A:92:ASN:C	1:A:93:SER:N	10	11.3
(1,191)	1:A:105:TYR:C	1:A:106:GLU:N	1:A:106:GLU:CA	1:A:106:GLU:C	8	11.2
(1,102)	1:A:56:GLY:N	1:A:56:GLY:CA	1:A:56:GLY:C	1:A:57:MET:N	10	11.2
(1,224)	1:A:125:ARG:N	1:A:125:ARG:CA	1:A:125:ARG:C	1:A:126:TYR:N	9	11.1
(1,67)	1:A:38:VAL:C	1:A:39:VAL:N	1:A:39:VAL:CA	1:A:39:VAL:C	5	11.0
(1,59)	1:A:32:LYS:C	1:A:33:ALA:N	1:A:33:ALA:CA	1:A:33:ALA:C	5	11.0
(1,50)	1:A:28:ASP:N	1:A:28:ASP:CA	1:A:28:ASP:C	1:A:29:SER:N	9	11.0
(1,50)	1:A:28:ASP:N	1:A:28:ASP:CA	1:A:28:ASP:C	1:A:29:SER:N	10	10.9
(1,1)	1:A:1:MET:C	1:A:2:VAL:N	1:A:2:VAL:CA	1:A:2:VAL:C	8	10.9
(1,222)	1:A:124:LYS:N	1:A:124:LYS:CA	1:A:124:LYS:C	1:A:125:ARG:N	8	10.8
(1,206)	1:A:114:LEU:N	1:A:114:LEU:CA	1:A:114:LEU:C	1:A:115:THR:N	10	10.8
(1,109)	1:A:59:SER:C	1:A:60:THR:N	1:A:60:THR:CA	1:A:60:THR:C	6	10.8
(1,192)	1:A:106:GLU:N	1:A:106:GLU:CA	1:A:106:GLU:C	1:A:107:PHE:N	9	10.7
(1,165)	1:A:91:VAL:C	1:A:92:ASN:N	1:A:92:ASN:CA	1:A:92:ASN:C	8	10.7
(1,222)	1:A:124:LYS:N	1:A:124:LYS:CA	1:A:124:LYS:C	1:A:125:ARG:N	9	10.6
(1,187)	1:A:103:ARG:C	1:A:104:THR:N	1:A:104:THR:CA	1:A:104:THR:C	1	10.6
(1,214)	1:A:118:ALA:N	1:A:118:ALA:CA	1:A:118:ALA:C	1:A:119:GLY:N	7	10.5
(1,185)	1:A:102:THR:C	1:A:103:ARG:N	1:A:103:ARG:CA	1:A:103:ARG:C	1	10.4
(1,190)	1:A:105:TYR:N	1:A:105:TYR:CA	1:A:105:TYR:C	1:A:106:GLU:N	1	10.3
(1,169)	1:A:93:SER:C	1:A:94:GLU:N	1:A:94:GLU:CA	1:A:94:GLU:C	3	10.3
(1,163)	1:A:90:VAL:C	1:A:91:VAL:N	1:A:91:VAL:CA	1:A:91:VAL:C	9	10.3
(1,109)	1:A:59:SER:C	1:A:60:THR:N	1:A:60:THR:CA	1:A:60:THR:C	3	10.3
(1,58)	1:A:32:LYS:N	1:A:32:LYS:CA	1:A:32:LYS:C	1:A:33:ALA:N	6	10.2
(1,56)	1:A:31:LYS:N	1:A:31:LYS:CA	1:A:31:LYS:C	1:A:32:LYS:N	8	10.2
(1,184)	1:A:102:THR:N	1:A:102:THR:CA	1:A:102:THR:C	1:A:103:ARG:N	9	10.2
(1,144)	1:A:81:PHE:N	1:A:81:PHE:CA	1:A:81:PHE:C	1:A:82:THR:N	7	10.2
(1,128)	1:A:72:GLY:N	1:A:72:GLY:CA	1:A:72:GLY:C	1:A:73:THR:N	7	10.2
(1,127)	1:A:71:LEU:C	1:A:72:GLY:N	1:A:72:GLY:CA	1:A:72:GLY:C	6	10.2
(1,28)	1:A:17:GLU:N	1:A:17:GLU:CA	1:A:17:GLU:C	1:A:18:GLU:N	2	10.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,217)	1:A:121:MET:C	1:A:122:VAL:N	1:A:122:VAL:CA	1:A:122:VAL:C	2	10.1
(1,181)	1:A:99:ARG:C	1:A:100:LYS:N	1:A:100:LYS:CA	1:A:100:LYS:C	6	10.1
(1,132)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:ASN:N	3	10.1
(1,13)	1:A:8:TYR:C	1:A:9:LYS:N	1:A:9:LYS:CA	1:A:9:LYS:C	4	10.1
(1,109)	1:A:59:SER:C	1:A:60:THR:N	1:A:60:THR:CA	1:A:60:THR:C	10	10.1
(1,187)	1:A:103:ARG:C	1:A:104:THR:N	1:A:104:THR:CA	1:A:104:THR:C	8	10.0
(1,165)	1:A:91:VAL:C	1:A:92:ASN:N	1:A:92:ASN:CA	1:A:92:ASN:C	10	10.0
(1,208)	1:A:115:THR:N	1:A:115:THR:CA	1:A:115:THR:C	1:A:116:MET:N	7	9.9
(1,145)	1:A:81:PHE:C	1:A:82:THR:N	1:A:82:THR:CA	1:A:82:THR:C	4	9.9
(1,144)	1:A:81:PHE:N	1:A:81:PHE:CA	1:A:81:PHE:C	1:A:82:THR:N	9	9.9
(1,222)	1:A:124:LYS:N	1:A:124:LYS:CA	1:A:124:LYS:C	1:A:125:ARG:N	2	9.8
(1,181)	1:A:99:ARG:C	1:A:100:LYS:N	1:A:100:LYS:CA	1:A:100:LYS:C	4	9.8
(1,162)	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	1:A:91:VAL:N	10	9.8
(1,154)	1:A:86:GLY:N	1:A:86:GLY:CA	1:A:86:GLY:C	1:A:87:SER:N	9	9.8
(1,145)	1:A:81:PHE:C	1:A:82:THR:N	1:A:82:THR:CA	1:A:82:THR:C	2	9.8
(1,145)	1:A:81:PHE:C	1:A:82:THR:N	1:A:82:THR:CA	1:A:82:THR:C	7	9.8
(1,135)	1:A:75:ASN:C	1:A:76:MET:N	1:A:76:MET:CA	1:A:76:MET:C	5	9.8
(1,42)	1:A:24:GLY:N	1:A:24:GLY:CA	1:A:24:GLY:C	1:A:25:VAL:N	2	9.7
(1,187)	1:A:103:ARG:C	1:A:104:THR:N	1:A:104:THR:CA	1:A:104:THR:C	7	9.7
(1,167)	1:A:92:ASN:C	1:A:93:SER:N	1:A:93:SER:CA	1:A:93:SER:C	1	9.7
(1,119)	1:A:66:GLU:C	1:A:67:VAL:N	1:A:67:VAL:CA	1:A:67:VAL:C	6	9.7
(1,6)	1:A:4:LEU:N	1:A:4:LEU:CA	1:A:4:LEU:C	1:A:5:ALA:N	8	9.6
(1,168)	1:A:93:SER:N	1:A:93:SER:CA	1:A:93:SER:C	1:A:94:GLU:N	10	9.6
(1,56)	1:A:31:LYS:N	1:A:31:LYS:CA	1:A:31:LYS:C	1:A:32:LYS:N	1	9.5
(1,206)	1:A:114:LEU:N	1:A:114:LEU:CA	1:A:114:LEU:C	1:A:115:THR:N	7	9.5
(1,71)	1:A:40:TYR:C	1:A:41:GLU:N	1:A:41:GLU:CA	1:A:41:GLU:C	7	9.4
(1,5)	1:A:3:GLN:C	1:A:4:LEU:N	1:A:4:LEU:CA	1:A:4:LEU:C	7	9.4
(1,175)	1:A:96:PRO:C	1:A:97:ASP:N	1:A:97:ASP:CA	1:A:97:ASP:C	6	9.4
(1,163)	1:A:90:VAL:C	1:A:91:VAL:N	1:A:91:VAL:CA	1:A:91:VAL:C	4	9.4
(1,84)	1:A:47:ASN:N	1:A:47:ASN:CA	1:A:47:ASN:C	1:A:48:LYS:N	6	9.3
(1,72)	1:A:41:GLU:N	1:A:41:GLU:CA	1:A:41:GLU:C	1:A:42:ILE:N	7	9.3
(1,230)	1:A:128:ILE:N	1:A:128:ILE:CA	1:A:128:ILE:C	1:A:129:ARG:N	2	9.3
(1,162)	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	1:A:91:VAL:N	4	9.2
(1,1)	1:A:1:MET:C	1:A:2:VAL:N	1:A:2:VAL:CA	1:A:2:VAL:C	10	9.2
(1,184)	1:A:102:THR:N	1:A:102:THR:CA	1:A:102:THR:C	1:A:103:ARG:N	4	9.1
(1,134)	1:A:75:ASN:N	1:A:75:ASN:CA	1:A:75:ASN:C	1:A:76:MET:N	3	9.1
(1,134)	1:A:75:ASN:N	1:A:75:ASN:CA	1:A:75:ASN:C	1:A:76:MET:N	7	9.1
(1,100)	1:A:55:SER:N	1:A:55:SER:CA	1:A:55:SER:C	1:A:56:GLY:N	10	9.1
(1,24)	1:A:14:GLU:N	1:A:14:GLU:CA	1:A:14:GLU:C	1:A:15:ASN:N	2	8.9
(1,205)	1:A:113:VAL:C	1:A:114:LEU:N	1:A:114:LEU:CA	1:A:114:LEU:C	7	8.9
(1,145)	1:A:81:PHE:C	1:A:82:THR:N	1:A:82:THR:CA	1:A:82:THR:C	6	8.9
(1,77)	1:A:43:ILE:C	1:A:44:VAL:N	1:A:44:VAL:CA	1:A:44:VAL:C	2	8.8
(1,65)	1:A:37:GLY:C	1:A:38:VAL:N	1:A:38:VAL:CA	1:A:38:VAL:C	1	8.8
(1,195)	1:A:107:PHE:C	1:A:108:CYS:N	1:A:108:CYS:CA	1:A:108:CYS:C	5	8.8
(1,192)	1:A:106:GLU:N	1:A:106:GLU:CA	1:A:106:GLU:C	1:A:107:PHE:N	6	8.8
(1,181)	1:A:99:ARG:C	1:A:100:LYS:N	1:A:100:LYS:CA	1:A:100:LYS:C	2	8.8
(1,74)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	1:A:43:ILE:N	7	8.6
(1,14)	1:A:9:LYS:N	1:A:9:LYS:CA	1:A:9:LYS:C	1:A:10:LEU:N	2	8.6
(1,79)	1:A:44:VAL:C	1:A:45:ASN:N	1:A:45:ASN:CA	1:A:45:ASN:C	4	8.5
(1,106)	1:A:58:ASN:N	1:A:58:ASN:CA	1:A:58:ASN:C	1:A:59:SER:N	4	8.5
(1,84)	1:A:47:ASN:N	1:A:47:ASN:CA	1:A:47:ASN:C	1:A:48:LYS:N	1	8.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,8)	1:A:5:ALA:N	1:A:5:ALA:CA	1:A:5:ALA:C	1:A:6:GLY:N	10	8.4
(1,65)	1:A:37:GLY:C	1:A:38:VAL:N	1:A:38:VAL:CA	1:A:38:VAL:C	9	8.4
(1,101)	1:A:55:SER:C	1:A:56:GLY:N	1:A:56:GLY:CA	1:A:56:GLY:C	8	8.4
(1,86)	1:A:48:LYS:N	1:A:48:LYS:CA	1:A:48:LYS:C	1:A:49:PHE:N	5	8.3
(1,169)	1:A:93:SER:C	1:A:94:GLU:N	1:A:94:GLU:CA	1:A:94:GLU:C	10	8.3
(1,116)	1:A:65:GLU:N	1:A:65:GLU:CA	1:A:65:GLU:C	1:A:66:GLU:N	10	8.3
(1,35)	1:A:20:LEU:C	1:A:21:ALA:N	1:A:21:ALA:CA	1:A:21:ALA:C	2	8.2
(1,225)	1:A:125:ARG:C	1:A:126:TYR:N	1:A:126:TYR:CA	1:A:126:TYR:C	6	8.2
(1,204)	1:A:113:VAL:N	1:A:113:VAL:CA	1:A:113:VAL:C	1:A:114:LEU:N	4	8.2
(1,187)	1:A:103:ARG:C	1:A:104:THR:N	1:A:104:THR:CA	1:A:104:THR:C	4	8.2
(1,185)	1:A:102:THR:C	1:A:103:ARG:N	1:A:103:ARG:CA	1:A:103:ARG:C	8	8.2
(1,134)	1:A:75:ASN:N	1:A:75:ASN:CA	1:A:75:ASN:C	1:A:76:MET:N	2	8.2
(1,109)	1:A:59:SER:C	1:A:60:THR:N	1:A:60:THR:CA	1:A:60:THR:C	2	8.2
(1,81)	1:A:45:ASN:C	1:A:46:GLY:N	1:A:46:GLY:CA	1:A:46:GLY:C	7	8.1
(1,71)	1:A:40:TYR:C	1:A:41:GLU:N	1:A:41:GLU:CA	1:A:41:GLU:C	10	8.1
(1,79)	1:A:44:VAL:C	1:A:45:ASN:N	1:A:45:ASN:CA	1:A:45:ASN:C	7	8.0
(1,221)	1:A:123:ALA:C	1:A:124:LYS:N	1:A:124:LYS:CA	1:A:124:LYS:C	10	8.0
(1,160)	1:A:89:LEU:N	1:A:89:LEU:CA	1:A:89:LEU:C	1:A:90:VAL:N	1	8.0
(1,82)	1:A:46:GLY:N	1:A:46:GLY:CA	1:A:46:GLY:C	1:A:47:ASN:N	8	7.9
(1,60)	1:A:33:ALA:N	1:A:33:ALA:CA	1:A:33:ALA:C	1:A:34:ASN:N	6	7.9
(1,216)	1:A:120:ASP:N	1:A:120:ASP:CA	1:A:120:ASP:C	1:A:121:MET:N	5	7.9
(1,144)	1:A:81:PHE:N	1:A:81:PHE:CA	1:A:81:PHE:C	1:A:82:THR:N	6	7.9
(1,106)	1:A:58:ASN:N	1:A:58:ASN:CA	1:A:58:ASN:C	1:A:59:SER:N	9	7.9
(1,32)	1:A:19:TYR:N	1:A:19:TYR:CA	1:A:19:TYR:C	1:A:20:LEU:N	3	7.8
(1,130)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	9	7.8
(1,7)	1:A:4:LEU:C	1:A:5:ALA:N	1:A:5:ALA:CA	1:A:5:ALA:C	6	7.7
(1,30)	1:A:18:GLU:N	1:A:18:GLU:CA	1:A:18:GLU:C	1:A:19:TYR:N	7	7.7
(1,185)	1:A:102:THR:C	1:A:103:ARG:N	1:A:103:ARG:CA	1:A:103:ARG:C	3	7.7
(1,134)	1:A:75:ASN:N	1:A:75:ASN:CA	1:A:75:ASN:C	1:A:76:MET:N	5	7.7
(1,206)	1:A:114:LEU:N	1:A:114:LEU:CA	1:A:114:LEU:C	1:A:115:THR:N	3	7.6
(1,187)	1:A:103:ARG:C	1:A:104:THR:N	1:A:104:THR:CA	1:A:104:THR:C	2	7.6
(1,177)	1:A:97:ASP:C	1:A:98:GLY:N	1:A:98:GLY:CA	1:A:98:GLY:C	6	7.6
(1,74)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	1:A:43:ILE:N	3	7.5
(1,206)	1:A:114:LEU:N	1:A:114:LEU:CA	1:A:114:LEU:C	1:A:115:THR:N	9	7.5
(1,188)	1:A:104:THR:N	1:A:104:THR:CA	1:A:104:THR:C	1:A:105:TYR:N	1	7.5
(1,165)	1:A:91:VAL:C	1:A:92:ASN:N	1:A:92:ASN:CA	1:A:92:ASN:C	1	7.5
(1,77)	1:A:43:ILE:C	1:A:44:VAL:N	1:A:44:VAL:CA	1:A:44:VAL:C	4	7.4
(1,3)	1:A:2:VAL:C	1:A:3:GLN:N	1:A:3:GLN:CA	1:A:3:GLN:C	6	7.4
(1,208)	1:A:115:THR:N	1:A:115:THR:CA	1:A:115:THR:C	1:A:116:MET:N	8	7.4
(1,154)	1:A:86:GLY:N	1:A:86:GLY:CA	1:A:86:GLY:C	1:A:87:SER:N	10	7.4
(1,219)	1:A:122:VAL:C	1:A:123:ALA:N	1:A:123:ALA:CA	1:A:123:ALA:C	9	7.3
(1,119)	1:A:66:GLU:C	1:A:67:VAL:N	1:A:67:VAL:CA	1:A:67:VAL:C	3	7.3
(1,83)	1:A:46:GLY:C	1:A:47:ASN:N	1:A:47:ASN:CA	1:A:47:ASN:C	9	7.2
(1,7)	1:A:4:LEU:C	1:A:5:ALA:N	1:A:5:ALA:CA	1:A:5:ALA:C	2	7.2
(1,7)	1:A:4:LEU:C	1:A:5:ALA:N	1:A:5:ALA:CA	1:A:5:ALA:C	8	7.2
(1,160)	1:A:89:LEU:N	1:A:89:LEU:CA	1:A:89:LEU:C	1:A:90:VAL:N	3	7.2
(1,13)	1:A:8:TYR:C	1:A:9:LYS:N	1:A:9:LYS:CA	1:A:9:LYS:C	3	7.2
(1,224)	1:A:125:ARG:N	1:A:125:ARG:CA	1:A:125:ARG:C	1:A:126:TYR:N	6	7.1
(1,185)	1:A:102:THR:C	1:A:103:ARG:N	1:A:103:ARG:CA	1:A:103:ARG:C	9	7.1
(1,60)	1:A:33:ALA:N	1:A:33:ALA:CA	1:A:33:ALA:C	1:A:34:ASN:N	2	7.0
(1,144)	1:A:81:PHE:N	1:A:81:PHE:CA	1:A:81:PHE:C	1:A:82:THR:N	10	7.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,80)	1:A:45:ASN:N	1:A:45:ASN:CA	1:A:45:ASN:C	1:A:46:GLY:N	3	6.9
(1,51)	1:A:28:ASP:C	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	2	6.9
(1,51)	1:A:28:ASP:C	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	4	6.9
(1,103)	1:A:56:GLY:C	1:A:57:MET:N	1:A:57:MET:CA	1:A:57:MET:C	1	6.9
(1,219)	1:A:122:VAL:C	1:A:123:ALA:N	1:A:123:ALA:CA	1:A:123:ALA:C	8	6.8
(1,165)	1:A:91:VAL:C	1:A:92:ASN:N	1:A:92:ASN:CA	1:A:92:ASN:C	9	6.8
(1,140)	1:A:79:LYS:N	1:A:79:LYS:CA	1:A:79:LYS:C	1:A:80:SER:N	10	6.8
(1,86)	1:A:48:LYS:N	1:A:48:LYS:CA	1:A:48:LYS:C	1:A:49:PHE:N	1	6.7
(1,68)	1:A:39:VAL:N	1:A:39:VAL:CA	1:A:39:VAL:C	1:A:40:TYR:N	9	6.7
(1,34)	1:A:20:LEU:N	1:A:20:LEU:CA	1:A:20:LEU:C	1:A:21:ALA:N	2	6.7
(1,224)	1:A:125:ARG:N	1:A:125:ARG:CA	1:A:125:ARG:C	1:A:126:TYR:N	8	6.7
(1,60)	1:A:33:ALA:N	1:A:33:ALA:CA	1:A:33:ALA:C	1:A:34:ASN:N	9	6.6
(1,171)	1:A:94:GLU:C	1:A:95:LEU:N	1:A:95:LEU:CA	1:A:95:LEU:C	9	6.6
(1,167)	1:A:92:ASN:C	1:A:93:SER:N	1:A:93:SER:CA	1:A:93:SER:C	4	6.6
(1,148)	1:A:83:LYS:N	1:A:83:LYS:CA	1:A:83:LYS:C	1:A:84:LEU:N	7	6.6
(1,94)	1:A:52:LYS:N	1:A:52:LYS:CA	1:A:52:LYS:C	1:A:53:SER:N	4	6.5
(1,41)	1:A:23:LEU:C	1:A:24:GLY:N	1:A:24:GLY:CA	1:A:24:GLY:C	7	6.5
(1,220)	1:A:123:ALA:N	1:A:123:ALA:CA	1:A:123:ALA:C	1:A:124:LYS:N	1	6.5
(1,160)	1:A:89:LEU:N	1:A:89:LEU:CA	1:A:89:LEU:C	1:A:90:VAL:N	8	6.5
(1,222)	1:A:124:LYS:N	1:A:124:LYS:CA	1:A:124:LYS:C	1:A:125:ARG:N	3	6.4
(1,191)	1:A:105:TYR:C	1:A:106:GLU:N	1:A:106:GLU:CA	1:A:106:GLU:C	7	6.4
(1,102)	1:A:56:GLY:N	1:A:56:GLY:CA	1:A:56:GLY:C	1:A:57:MET:N	3	6.4
(1,82)	1:A:46:GLY:N	1:A:46:GLY:CA	1:A:46:GLY:C	1:A:47:ASN:N	7	6.3
(1,71)	1:A:40:TYR:C	1:A:41:GLU:N	1:A:41:GLU:CA	1:A:41:GLU:C	3	6.3
(1,69)	1:A:39:VAL:C	1:A:40:TYR:N	1:A:40:TYR:CA	1:A:40:TYR:C	8	6.3
(1,190)	1:A:105:TYR:N	1:A:105:TYR:CA	1:A:105:TYR:C	1:A:106:GLU:N	3	6.3
(1,177)	1:A:97:ASP:C	1:A:98:GLY:N	1:A:98:GLY:CA	1:A:98:GLY:C	4	6.3
(1,117)	1:A:65:GLU:C	1:A:66:GLU:N	1:A:66:GLU:CA	1:A:66:GLU:C	3	6.3
(1,77)	1:A:43:ILE:C	1:A:44:VAL:N	1:A:44:VAL:CA	1:A:44:VAL:C	1	6.2
(1,230)	1:A:128:ILE:N	1:A:128:ILE:CA	1:A:128:ILE:C	1:A:129:ARG:N	5	6.2
(1,205)	1:A:113:VAL:C	1:A:114:LEU:N	1:A:114:LEU:CA	1:A:114:LEU:C	2	6.2
(1,141)	1:A:79:LYS:C	1:A:80:SER:N	1:A:80:SER:CA	1:A:80:SER:C	10	6.2
(1,136)	1:A:76:MET:N	1:A:76:MET:CA	1:A:76:MET:C	1:A:77:ASN:N	7	6.2
(1,132)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:ASN:N	2	6.2
(1,58)	1:A:32:LYS:N	1:A:32:LYS:CA	1:A:32:LYS:C	1:A:33:ALA:N	7	6.1
(1,12)	1:A:8:TYR:N	1:A:8:TYR:CA	1:A:8:TYR:C	1:A:9:LYS:N	4	6.1
(1,89)	1:A:49:PHE:C	1:A:50:THR:N	1:A:50:THR:CA	1:A:50:THR:C	8	6.0
(1,80)	1:A:45:ASN:N	1:A:45:ASN:CA	1:A:45:ASN:C	1:A:46:GLY:N	10	6.0
(1,184)	1:A:102:THR:N	1:A:102:THR:CA	1:A:102:THR:C	1:A:103:ARG:N	5	6.0
(1,175)	1:A:96:PRO:C	1:A:97:ASP:N	1:A:97:ASP:CA	1:A:97:ASP:C	9	6.0
(1,146)	1:A:82:THR:N	1:A:82:THR:CA	1:A:82:THR:C	1:A:83:LYS:N	1	6.0
(1,13)	1:A:8:TYR:C	1:A:9:LYS:N	1:A:9:LYS:CA	1:A:9:LYS:C	1	6.0
(1,6)	1:A:4:LEU:N	1:A:4:LEU:CA	1:A:4:LEU:C	1:A:5:ALA:N	6	5.9
(1,49)	1:A:27:GLN:C	1:A:28:ASP:N	1:A:28:ASP:CA	1:A:28:ASP:C	10	5.9
(1,211)	1:A:116:MET:C	1:A:117:CYS:N	1:A:117:CYS:CA	1:A:117:CYS:C	2	5.9
(1,191)	1:A:105:TYR:C	1:A:106:GLU:N	1:A:106:GLU:CA	1:A:106:GLU:C	4	5.9
(1,190)	1:A:105:TYR:N	1:A:105:TYR:CA	1:A:105:TYR:C	1:A:106:GLU:N	5	5.9
(1,123)	1:A:68:GLU:C	1:A:69:GLU:N	1:A:69:GLU:CA	1:A:69:GLU:C	9	5.9
(1,89)	1:A:49:PHE:C	1:A:50:THR:N	1:A:50:THR:CA	1:A:50:THR:C	10	5.8
(1,3)	1:A:2:VAL:C	1:A:3:GLN:N	1:A:3:GLN:CA	1:A:3:GLN:C	3	5.8
(1,230)	1:A:128:ILE:N	1:A:128:ILE:CA	1:A:128:ILE:C	1:A:129:ARG:N	9	5.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,202)	1:A:112:PHE:N	1:A:112:PHE:CA	1:A:112:PHE:C	1:A:113:VAL:N	6	5.8
(1,180)	1:A:99:ARG:N	1:A:99:ARG:CA	1:A:99:ARG:C	1:A:100:LYS:N	4	5.8
(1,132)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:ASN:N	10	5.8
(1,6)	1:A:4:LEU:N	1:A:4:LEU:CA	1:A:4:LEU:C	1:A:5:ALA:N	5	5.7
(1,45)	1:A:25:VAL:C	1:A:26:PRO:N	1:A:26:PRO:CA	1:A:26:PRO:C	2	5.7
(1,180)	1:A:99:ARG:N	1:A:99:ARG:CA	1:A:99:ARG:C	1:A:100:LYS:N	1	5.7
(1,178)	1:A:98:GLY:N	1:A:98:GLY:CA	1:A:98:GLY:C	1:A:99:ARG:N	6	5.7
(1,131)	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	3	5.7
(1,85)	1:A:47:ASN:C	1:A:48:LYS:N	1:A:48:LYS:CA	1:A:48:LYS:C	9	5.6
(1,82)	1:A:46:GLY:N	1:A:46:GLY:CA	1:A:46:GLY:C	1:A:47:ASN:N	4	5.6
(1,64)	1:A:37:GLY:N	1:A:37:GLY:CA	1:A:37:GLY:C	1:A:38:VAL:N	4	5.6
(1,204)	1:A:113:VAL:N	1:A:113:VAL:CA	1:A:113:VAL:C	1:A:114:LEU:N	2	5.6
(1,181)	1:A:99:ARG:C	1:A:100:LYS:N	1:A:100:LYS:CA	1:A:100:LYS:C	5	5.6
(1,165)	1:A:91:VAL:C	1:A:92:ASN:N	1:A:92:ASN:CA	1:A:92:ASN:C	3	5.6
(1,116)	1:A:65:GLU:N	1:A:65:GLU:CA	1:A:65:GLU:C	1:A:66:GLU:N	1	5.6
(1,6)	1:A:4:LEU:N	1:A:4:LEU:CA	1:A:4:LEU:C	1:A:5:ALA:N	2	5.5
(1,55)	1:A:30:ILE:C	1:A:31:LYS:N	1:A:31:LYS:CA	1:A:31:LYS:C	5	5.5
(1,211)	1:A:116:MET:C	1:A:117:CYS:N	1:A:117:CYS:CA	1:A:117:CYS:C	8	5.5
(1,168)	1:A:93:SER:N	1:A:93:SER:CA	1:A:93:SER:C	1:A:94:GLU:N	3	5.5
(1,9)	1:A:6:GLY:C	1:A:7:THR:N	1:A:7:THR:CA	1:A:7:THR:C	9	5.4
(1,89)	1:A:49:PHE:C	1:A:50:THR:N	1:A:50:THR:CA	1:A:50:THR:C	6	5.4
(1,169)	1:A:93:SER:C	1:A:94:GLU:N	1:A:94:GLU:CA	1:A:94:GLU:C	2	5.4
(1,169)	1:A:93:SER:C	1:A:94:GLU:N	1:A:94:GLU:CA	1:A:94:GLU:C	9	5.4
(1,79)	1:A:44:VAL:C	1:A:45:ASN:N	1:A:45:ASN:CA	1:A:45:ASN:C	3	5.3
(1,168)	1:A:93:SER:N	1:A:93:SER:CA	1:A:93:SER:C	1:A:94:GLU:N	9	5.3
(1,167)	1:A:92:ASN:C	1:A:93:SER:N	1:A:93:SER:CA	1:A:93:SER:C	5	5.3
(1,16)	1:A:10:LEU:N	1:A:10:LEU:CA	1:A:10:LEU:C	1:A:11:GLU:N	6	5.3
(1,154)	1:A:86:GLY:N	1:A:86:GLY:CA	1:A:86:GLY:C	1:A:87:SER:N	4	5.3
(1,144)	1:A:81:PHE:N	1:A:81:PHE:CA	1:A:81:PHE:C	1:A:82:THR:N	1	5.3
(1,119)	1:A:66:GLU:C	1:A:67:VAL:N	1:A:67:VAL:CA	1:A:67:VAL:C	1	5.3
(1,100)	1:A:55:SER:N	1:A:55:SER:CA	1:A:55:SER:C	1:A:56:GLY:N	2	5.3
(1,82)	1:A:46:GLY:N	1:A:46:GLY:CA	1:A:46:GLY:C	1:A:47:ASN:N	2	5.2
(1,188)	1:A:104:THR:N	1:A:104:THR:CA	1:A:104:THR:C	1:A:105:TYR:N	5	5.2
(1,51)	1:A:28:ASP:C	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	9	5.1
(1,166)	1:A:92:ASN:N	1:A:92:ASN:CA	1:A:92:ASN:C	1:A:93:SER:N	3	5.1
(1,30)	1:A:18:GLU:N	1:A:18:GLU:CA	1:A:18:GLU:C	1:A:19:TYR:N	2	5.0
(1,171)	1:A:94:GLU:C	1:A:95:LEU:N	1:A:95:LEU:CA	1:A:95:LEU:C	10	5.0
(1,168)	1:A:93:SER:N	1:A:93:SER:CA	1:A:93:SER:C	1:A:94:GLU:N	4	5.0
(1,168)	1:A:93:SER:N	1:A:93:SER:CA	1:A:93:SER:C	1:A:94:GLU:N	7	5.0
(1,164)	1:A:91:VAL:N	1:A:91:VAL:CA	1:A:91:VAL:C	1:A:92:ASN:N	10	5.0
(1,132)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:ASN:N	4	5.0
(1,127)	1:A:71:LEU:C	1:A:72:GLY:N	1:A:72:GLY:CA	1:A:72:GLY:C	9	5.0
(1,12)	1:A:8:TYR:N	1:A:8:TYR:CA	1:A:8:TYR:C	1:A:9:LYS:N	1	5.0
(1,1)	1:A:1:MET:C	1:A:2:VAL:N	1:A:2:VAL:CA	1:A:2:VAL:C	6	5.0
(1,7)	1:A:4:LEU:C	1:A:5:ALA:N	1:A:5:ALA:CA	1:A:5:ALA:C	10	4.9
(1,223)	1:A:124:LYS:C	1:A:125:ARG:N	1:A:125:ARG:CA	1:A:125:ARG:C	6	4.9
(1,131)	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	5	4.9
(1,7)	1:A:4:LEU:C	1:A:5:ALA:N	1:A:5:ALA:CA	1:A:5:ALA:C	7	4.8
(1,6)	1:A:4:LEU:N	1:A:4:LEU:CA	1:A:4:LEU:C	1:A:5:ALA:N	7	4.8
(1,188)	1:A:104:THR:N	1:A:104:THR:CA	1:A:104:THR:C	1:A:105:TYR:N	3	4.8
(1,82)	1:A:46:GLY:N	1:A:46:GLY:CA	1:A:46:GLY:C	1:A:47:ASN:N	3	4.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,123)	1:A:68:GLU:C	1:A:69:GLU:N	1:A:69:GLU:CA	1:A:69:GLU:C	1	4.7
(1,116)	1:A:65:GLU:N	1:A:65:GLU:CA	1:A:65:GLU:C	1:A:66:GLU:N	5	4.7
(1,53)	1:A:29:SER:C	1:A:30:ILE:N	1:A:30:ILE:CA	1:A:30:ILE:C	5	4.6
(1,35)	1:A:20:LEU:C	1:A:21:ALA:N	1:A:21:ALA:CA	1:A:21:ALA:C	8	4.6
(1,215)	1:A:119:GLY:C	1:A:120:ASP:N	1:A:120:ASP:CA	1:A:120:ASP:C	8	4.6
(1,210)	1:A:116:MET:N	1:A:116:MET:CA	1:A:116:MET:C	1:A:117:CYS:N	6	4.6
(1,191)	1:A:105:TYR:C	1:A:106:GLU:N	1:A:106:GLU:CA	1:A:106:GLU:C	9	4.6
(1,144)	1:A:81:PHE:N	1:A:81:PHE:CA	1:A:81:PHE:C	1:A:82:THR:N	4	4.6
(1,122)	1:A:68:GLU:N	1:A:68:GLU:CA	1:A:68:GLU:C	1:A:69:GLU:N	2	4.6
(1,1)	1:A:1:MET:C	1:A:2:VAL:N	1:A:2:VAL:CA	1:A:2:VAL:C	2	4.6
(1,84)	1:A:47:ASN:N	1:A:47:ASN:CA	1:A:47:ASN:C	1:A:48:LYS:N	10	4.5
(1,79)	1:A:44:VAL:C	1:A:45:ASN:N	1:A:45:ASN:CA	1:A:45:ASN:C	2	4.5
(1,219)	1:A:122:VAL:C	1:A:123:ALA:N	1:A:123:ALA:CA	1:A:123:ALA:C	10	4.5
(1,119)	1:A:66:GLU:C	1:A:67:VAL:N	1:A:67:VAL:CA	1:A:67:VAL:C	4	4.5
(1,205)	1:A:113:VAL:C	1:A:114:LEU:N	1:A:114:LEU:CA	1:A:114:LEU:C	3	4.4
(1,184)	1:A:102:THR:N	1:A:102:THR:CA	1:A:102:THR:C	1:A:103:ARG:N	7	4.4
(1,162)	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	1:A:91:VAL:N	6	4.4
(1,157)	1:A:87:SER:C	1:A:88:LYS:N	1:A:88:LYS:CA	1:A:88:LYS:C	7	4.4
(1,152)	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	1:A:86:GLY:N	10	4.4
(1,83)	1:A:46:GLY:C	1:A:47:ASN:N	1:A:47:ASN:CA	1:A:47:ASN:C	2	4.3
(1,192)	1:A:106:GLU:N	1:A:106:GLU:CA	1:A:106:GLU:C	1:A:107:PHE:N	5	4.3
(1,191)	1:A:105:TYR:C	1:A:106:GLU:N	1:A:106:GLU:CA	1:A:106:GLU:C	10	4.3
(1,85)	1:A:47:ASN:C	1:A:48:LYS:N	1:A:48:LYS:CA	1:A:48:LYS:C	7	4.2
(1,59)	1:A:32:LYS:C	1:A:33:ALA:N	1:A:33:ALA:CA	1:A:33:ALA:C	6	4.2
(1,3)	1:A:2:VAL:C	1:A:3:GLN:N	1:A:3:GLN:CA	1:A:3:GLN:C	1	4.2
(1,224)	1:A:125:ARG:N	1:A:125:ARG:CA	1:A:125:ARG:C	1:A:126:TYR:N	5	4.2
(1,166)	1:A:92:ASN:N	1:A:92:ASN:CA	1:A:92:ASN:C	1:A:93:SER:N	2	4.2
(1,15)	1:A:9:LYS:C	1:A:10:LEU:N	1:A:10:LEU:CA	1:A:10:LEU:C	8	4.2
(1,142)	1:A:80:SER:N	1:A:80:SER:CA	1:A:80:SER:C	1:A:81:PHE:N	7	4.2
(1,130)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	2	4.2
(1,123)	1:A:68:GLU:C	1:A:69:GLU:N	1:A:69:GLU:CA	1:A:69:GLU:C	4	4.2
(1,123)	1:A:68:GLU:C	1:A:69:GLU:N	1:A:69:GLU:CA	1:A:69:GLU:C	10	4.2
(1,222)	1:A:124:LYS:N	1:A:124:LYS:CA	1:A:124:LYS:C	1:A:125:ARG:N	1	4.1
(1,192)	1:A:106:GLU:N	1:A:106:GLU:CA	1:A:106:GLU:C	1:A:107:PHE:N	2	4.1
(1,60)	1:A:33:ALA:N	1:A:33:ALA:CA	1:A:33:ALA:C	1:A:34:ASN:N	5	4.0
(1,206)	1:A:114:LEU:N	1:A:114:LEU:CA	1:A:114:LEU:C	1:A:115:THR:N	5	4.0
(1,162)	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	1:A:91:VAL:N	1	4.0
(1,154)	1:A:86:GLY:N	1:A:86:GLY:CA	1:A:86:GLY:C	1:A:87:SER:N	1	4.0
(1,144)	1:A:81:PHE:N	1:A:81:PHE:CA	1:A:81:PHE:C	1:A:82:THR:N	5	4.0
(1,137)	1:A:77:ASN:C	1:A:78:ILE:N	1:A:78:ILE:CA	1:A:78:ILE:C	7	4.0
(1,56)	1:A:31:LYS:N	1:A:31:LYS:CA	1:A:31:LYS:C	1:A:32:LYS:N	2	3.9
(1,40)	1:A:23:LEU:N	1:A:23:LEU:CA	1:A:23:LEU:C	1:A:24:GLY:N	2	3.9
(1,216)	1:A:120:ASP:N	1:A:120:ASP:CA	1:A:120:ASP:C	1:A:121:MET:N	6	3.9
(1,15)	1:A:9:LYS:C	1:A:10:LEU:N	1:A:10:LEU:CA	1:A:10:LEU:C	9	3.9
(1,10)	1:A:7:THR:N	1:A:7:THR:CA	1:A:7:THR:C	1:A:8:TYR:N	6	3.9
(1,52)	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	1:A:30:ILE:N	5	3.8
(1,42)	1:A:24:GLY:N	1:A:24:GLY:CA	1:A:24:GLY:C	1:A:25:VAL:N	4	3.8
(1,134)	1:A:75:ASN:N	1:A:75:ASN:CA	1:A:75:ASN:C	1:A:76:MET:N	6	3.8
(1,68)	1:A:39:VAL:N	1:A:39:VAL:CA	1:A:39:VAL:C	1:A:40:TYR:N	3	3.7
(1,152)	1:A:85:GLU:N	1:A:85:GLU:CA	1:A:85:GLU:C	1:A:86:GLY:N	2	3.7
(1,100)	1:A:55:SER:N	1:A:55:SER:CA	1:A:55:SER:C	1:A:56:GLY:N	7	3.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,53)	1:A:29:SER:C	1:A:30:ILE:N	1:A:30:ILE:CA	1:A:30:ILE:C	1	3.6
(1,162)	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	1:A:91:VAL:N	7	3.6
(1,147)	1:A:82:THR:C	1:A:83:LYS:N	1:A:83:LYS:CA	1:A:83:LYS:C	3	3.6
(1,126)	1:A:70:VAL:N	1:A:70:VAL:CA	1:A:70:VAL:C	1:A:71:LEU:N	2	3.6
(1,126)	1:A:70:VAL:N	1:A:70:VAL:CA	1:A:70:VAL:C	1:A:71:LEU:N	4	3.6
(1,83)	1:A:46:GLY:C	1:A:47:ASN:N	1:A:47:ASN:CA	1:A:47:ASN:C	1	3.5
(1,77)	1:A:43:ILE:C	1:A:44:VAL:N	1:A:44:VAL:CA	1:A:44:VAL:C	9	3.5
(1,230)	1:A:128:ILE:N	1:A:128:ILE:CA	1:A:128:ILE:C	1:A:129:ARG:N	10	3.5
(1,102)	1:A:56:GLY:N	1:A:56:GLY:CA	1:A:56:GLY:C	1:A:57:MET:N	4	3.5
(1,94)	1:A:52:LYS:N	1:A:52:LYS:CA	1:A:52:LYS:C	1:A:53:SER:N	1	3.4
(1,224)	1:A:125:ARG:N	1:A:125:ARG:CA	1:A:125:ARG:C	1:A:126:TYR:N	2	3.4
(1,207)	1:A:114:LEU:C	1:A:115:THR:N	1:A:115:THR:CA	1:A:115:THR:C	8	3.4
(1,179)	1:A:98:GLY:C	1:A:99:ARG:N	1:A:99:ARG:CA	1:A:99:ARG:C	4	3.4
(1,17)	1:A:10:LEU:C	1:A:11:GLU:N	1:A:11:GLU:CA	1:A:11:GLU:C	1	3.4
(1,147)	1:A:82:THR:C	1:A:83:LYS:N	1:A:83:LYS:CA	1:A:83:LYS:C	6	3.4
(1,140)	1:A:79:LYS:N	1:A:79:LYS:CA	1:A:79:LYS:C	1:A:80:SER:N	6	3.4
(1,82)	1:A:46:GLY:N	1:A:46:GLY:CA	1:A:46:GLY:C	1:A:47:ASN:N	9	3.3
(1,8)	1:A:5:ALA:N	1:A:5:ALA:CA	1:A:5:ALA:C	1:A:6:GLY:N	7	3.3
(1,204)	1:A:113:VAL:N	1:A:113:VAL:CA	1:A:113:VAL:C	1:A:114:LEU:N	3	3.3
(1,180)	1:A:99:ARG:N	1:A:99:ARG:CA	1:A:99:ARG:C	1:A:100:LYS:N	9	3.3
(1,165)	1:A:91:VAL:C	1:A:92:ASN:N	1:A:92:ASN:CA	1:A:92:ASN:C	4	3.3
(1,121)	1:A:67:VAL:C	1:A:68:GLU:N	1:A:68:GLU:CA	1:A:68:GLU:C	9	3.3
(1,193)	1:A:106:GLU:C	1:A:107:PHE:N	1:A:107:PHE:CA	1:A:107:PHE:C	6	3.2
(1,140)	1:A:79:LYS:N	1:A:79:LYS:CA	1:A:79:LYS:C	1:A:80:SER:N	3	3.2
(1,184)	1:A:102:THR:N	1:A:102:THR:CA	1:A:102:THR:C	1:A:103:ARG:N	10	3.1
(1,14)	1:A:9:LYS:N	1:A:9:LYS:CA	1:A:9:LYS:C	1:A:10:LEU:N	1	3.1
(1,82)	1:A:46:GLY:N	1:A:46:GLY:CA	1:A:46:GLY:C	1:A:47:ASN:N	5	3.0
(1,50)	1:A:28:ASP:N	1:A:28:ASP:CA	1:A:28:ASP:C	1:A:29:SER:N	4	3.0
(1,171)	1:A:94:GLU:C	1:A:95:LEU:N	1:A:95:LEU:CA	1:A:95:LEU:C	6	3.0
(1,5)	1:A:3:GLN:C	1:A:4:LEU:N	1:A:4:LEU:CA	1:A:4:LEU:C	9	2.9
(1,13)	1:A:8:TYR:C	1:A:9:LYS:N	1:A:9:LYS:CA	1:A:9:LYS:C	5	2.9
(1,102)	1:A:56:GLY:N	1:A:56:GLY:CA	1:A:56:GLY:C	1:A:57:MET:N	6	2.9
(1,83)	1:A:46:GLY:C	1:A:47:ASN:N	1:A:47:ASN:CA	1:A:47:ASN:C	3	2.8
(1,53)	1:A:29:SER:C	1:A:30:ILE:N	1:A:30:ILE:CA	1:A:30:ILE:C	7	2.8
(1,201)	1:A:111:GLY:C	1:A:112:PHE:N	1:A:112:PHE:CA	1:A:112:PHE:C	3	2.8
(1,140)	1:A:79:LYS:N	1:A:79:LYS:CA	1:A:79:LYS:C	1:A:80:SER:N	7	2.8
(1,74)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	1:A:43:ILE:N	8	2.7
(1,224)	1:A:125:ARG:N	1:A:125:ARG:CA	1:A:125:ARG:C	1:A:126:TYR:N	10	2.7
(1,154)	1:A:86:GLY:N	1:A:86:GLY:CA	1:A:86:GLY:C	1:A:87:SER:N	7	2.7
(1,89)	1:A:49:PHE:C	1:A:50:THR:N	1:A:50:THR:CA	1:A:50:THR:C	5	2.6
(1,82)	1:A:46:GLY:N	1:A:46:GLY:CA	1:A:46:GLY:C	1:A:47:ASN:N	10	2.6
(1,42)	1:A:24:GLY:N	1:A:24:GLY:CA	1:A:24:GLY:C	1:A:25:VAL:N	6	2.6
(1,42)	1:A:24:GLY:N	1:A:24:GLY:CA	1:A:24:GLY:C	1:A:25:VAL:N	9	2.6
(1,41)	1:A:23:LEU:C	1:A:24:GLY:N	1:A:24:GLY:CA	1:A:24:GLY:C	1	2.6
(1,218)	1:A:122:VAL:N	1:A:122:VAL:CA	1:A:122:VAL:C	1:A:123:ALA:N	1	2.6
(1,216)	1:A:120:ASP:N	1:A:120:ASP:CA	1:A:120:ASP:C	1:A:121:MET:N	2	2.5
(1,211)	1:A:116:MET:C	1:A:117:CYS:N	1:A:117:CYS:CA	1:A:117:CYS:C	7	2.5
(1,175)	1:A:96:PRO:C	1:A:97:ASP:N	1:A:97:ASP:CA	1:A:97:ASP:C	4	2.5
(1,145)	1:A:81:PHE:C	1:A:82:THR:N	1:A:82:THR:CA	1:A:82:THR:C	8	2.5
(1,86)	1:A:48:LYS:N	1:A:48:LYS:CA	1:A:48:LYS:C	1:A:49:PHE:N	9	2.4
(1,3)	1:A:2:VAL:C	1:A:3:GLN:N	1:A:3:GLN:CA	1:A:3:GLN:C	5	2.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,171)	1:A:94:GLU:C	1:A:95:LEU:N	1:A:95:LEU:CA	1:A:95:LEU:C	5	2.4
(1,17)	1:A:10:LEU:C	1:A:11:GLU:N	1:A:11:GLU:CA	1:A:11:GLU:C	8	2.4
(1,144)	1:A:81:PHE:N	1:A:81:PHE:CA	1:A:81:PHE:C	1:A:82:THR:N	8	2.4
(1,132)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:ASN:N	1	2.4
(1,81)	1:A:45:ASN:C	1:A:46:GLY:N	1:A:46:GLY:CA	1:A:46:GLY:C	2	2.2
(1,176)	1:A:97:ASP:N	1:A:97:ASP:CA	1:A:97:ASP:C	1:A:98:GLY:N	9	2.2
(1,160)	1:A:89:LEU:N	1:A:89:LEU:CA	1:A:89:LEU:C	1:A:90:VAL:N	4	2.2
(1,146)	1:A:82:THR:N	1:A:82:THR:CA	1:A:82:THR:C	1:A:83:LYS:N	7	2.2
(1,140)	1:A:79:LYS:N	1:A:79:LYS:CA	1:A:79:LYS:C	1:A:80:SER:N	1	2.2
(1,134)	1:A:75:ASN:N	1:A:75:ASN:CA	1:A:75:ASN:C	1:A:76:MET:N	9	2.2
(1,127)	1:A:71:LEU:C	1:A:72:GLY:N	1:A:72:GLY:CA	1:A:72:GLY:C	7	2.2
(1,115)	1:A:64:ASN:C	1:A:65:GLU:N	1:A:65:GLU:CA	1:A:65:GLU:C	1	2.2
(1,17)	1:A:10:LEU:C	1:A:11:GLU:N	1:A:11:GLU:CA	1:A:11:GLU:C	9	2.1
(1,164)	1:A:91:VAL:N	1:A:91:VAL:CA	1:A:91:VAL:C	1:A:92:ASN:N	5	2.1
(1,163)	1:A:90:VAL:C	1:A:91:VAL:N	1:A:91:VAL:CA	1:A:91:VAL:C	6	2.1
(1,161)	1:A:89:LEU:C	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	4	2.1
(1,156)	1:A:87:SER:N	1:A:87:SER:CA	1:A:87:SER:C	1:A:88:LYS:N	9	2.1
(1,14)	1:A:9:LYS:N	1:A:9:LYS:CA	1:A:9:LYS:C	1:A:10:LEU:N	7	2.1
(1,56)	1:A:31:LYS:N	1:A:31:LYS:CA	1:A:31:LYS:C	1:A:32:LYS:N	5	2.0
(1,230)	1:A:128:ILE:N	1:A:128:ILE:CA	1:A:128:ILE:C	1:A:129:ARG:N	7	2.0
(1,156)	1:A:87:SER:N	1:A:87:SER:CA	1:A:87:SER:C	1:A:88:LYS:N	1	2.0
(1,102)	1:A:56:GLY:N	1:A:56:GLY:CA	1:A:56:GLY:C	1:A:57:MET:N	5	2.0
(1,163)	1:A:90:VAL:C	1:A:91:VAL:N	1:A:91:VAL:CA	1:A:91:VAL:C	7	1.9
(1,162)	1:A:90:VAL:N	1:A:90:VAL:CA	1:A:90:VAL:C	1:A:91:VAL:N	5	1.9
(1,93)	1:A:51:PHE:C	1:A:52:LYS:N	1:A:52:LYS:CA	1:A:52:LYS:C	10	1.8
(1,89)	1:A:49:PHE:C	1:A:50:THR:N	1:A:50:THR:CA	1:A:50:THR:C	7	1.8
(1,74)	1:A:42:ILE:N	1:A:42:ILE:CA	1:A:42:ILE:C	1:A:43:ILE:N	4	1.8
(1,41)	1:A:23:LEU:C	1:A:24:GLY:N	1:A:24:GLY:CA	1:A:24:GLY:C	10	1.8
(1,216)	1:A:120:ASP:N	1:A:120:ASP:CA	1:A:120:ASP:C	1:A:121:MET:N	3	1.8
(1,132)	1:A:74:VAL:N	1:A:74:VAL:CA	1:A:74:VAL:C	1:A:75:ASN:N	5	1.8
(1,130)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	8	1.8
(1,125)	1:A:69:GLU:C	1:A:70:VAL:N	1:A:70:VAL:CA	1:A:70:VAL:C	3	1.8
(1,94)	1:A:52:LYS:N	1:A:52:LYS:CA	1:A:52:LYS:C	1:A:53:SER:N	5	1.7
(1,92)	1:A:51:PHE:N	1:A:51:PHE:CA	1:A:51:PHE:C	1:A:52:LYS:N	8	1.7
(1,51)	1:A:28:ASP:C	1:A:29:SER:N	1:A:29:SER:CA	1:A:29:SER:C	10	1.7
(1,115)	1:A:64:ASN:C	1:A:65:GLU:N	1:A:65:GLU:CA	1:A:65:GLU:C	8	1.7
(1,80)	1:A:45:ASN:N	1:A:45:ASN:CA	1:A:45:ASN:C	1:A:46:GLY:N	4	1.6
(1,6)	1:A:4:LEU:N	1:A:4:LEU:CA	1:A:4:LEU:C	1:A:5:ALA:N	1	1.6
(1,217)	1:A:121:MET:C	1:A:122:VAL:N	1:A:122:VAL:CA	1:A:122:VAL:C	6	1.6
(1,211)	1:A:116:MET:C	1:A:117:CYS:N	1:A:117:CYS:CA	1:A:117:CYS:C	4	1.6
(1,122)	1:A:68:GLU:N	1:A:68:GLU:CA	1:A:68:GLU:C	1:A:69:GLU:N	4	1.6
(1,119)	1:A:66:GLU:C	1:A:67:VAL:N	1:A:67:VAL:CA	1:A:67:VAL:C	10	1.5
(1,79)	1:A:44:VAL:C	1:A:45:ASN:N	1:A:45:ASN:CA	1:A:45:ASN:C	10	1.4
(1,177)	1:A:97:ASP:C	1:A:98:GLY:N	1:A:98:GLY:CA	1:A:98:GLY:C	8	1.4
(1,157)	1:A:87:SER:C	1:A:88:LYS:N	1:A:88:LYS:CA	1:A:88:LYS:C	6	1.4
(1,140)	1:A:79:LYS:N	1:A:79:LYS:CA	1:A:79:LYS:C	1:A:80:SER:N	9	1.4
(1,71)	1:A:40:TYR:C	1:A:41:GLU:N	1:A:41:GLU:CA	1:A:41:GLU:C	5	1.3
(1,68)	1:A:39:VAL:N	1:A:39:VAL:CA	1:A:39:VAL:C	1:A:40:TYR:N	5	1.3
(1,57)	1:A:31:LYS:C	1:A:32:LYS:N	1:A:32:LYS:CA	1:A:32:LYS:C	3	1.3
(1,217)	1:A:121:MET:C	1:A:122:VAL:N	1:A:122:VAL:CA	1:A:122:VAL:C	3	1.3
(1,210)	1:A:116:MET:N	1:A:116:MET:CA	1:A:116:MET:C	1:A:117:CYS:N	2	1.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,178)	1:A:98:GLY:N	1:A:98:GLY:CA	1:A:98:GLY:C	1:A:99:ARG:N	10	1.3
(1,101)	1:A:55:SER:C	1:A:56:GLY:N	1:A:56:GLY:CA	1:A:56:GLY:C	5	1.3
(1,217)	1:A:121:MET:C	1:A:122:VAL:N	1:A:122:VAL:CA	1:A:122:VAL:C	5	1.2
(1,130)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:VAL:N	5	1.2
(1,123)	1:A:68:GLU:C	1:A:69:GLU:N	1:A:69:GLU:CA	1:A:69:GLU:C	5	1.2
(1,81)	1:A:45:ASN:C	1:A:46:GLY:N	1:A:46:GLY:CA	1:A:46:GLY:C	9	1.1
(1,5)	1:A:3:GLN:C	1:A:4:LEU:N	1:A:4:LEU:CA	1:A:4:LEU:C	2	1.1
(1,225)	1:A:125:ARG:C	1:A:126:TYR:N	1:A:126:TYR:CA	1:A:126:TYR:C	7	1.1
(1,169)	1:A:93:SER:C	1:A:94:GLU:N	1:A:94:GLU:CA	1:A:94:GLU:C	5	1.1
(1,164)	1:A:91:VAL:N	1:A:91:VAL:CA	1:A:91:VAL:C	1:A:92:ASN:N	9	1.1
(1,160)	1:A:89:LEU:N	1:A:89:LEU:CA	1:A:89:LEU:C	1:A:90:VAL:N	5	1.1
(1,129)	1:A:72:GLY:C	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	10	1.1