



wwPDB NMR Structure Validation Summary Report ⓘ

Jun 3, 2023 – 04:00 PM EDT

PDB ID : 6CV8
BMRB ID : 30404
Title : HADDOCK structure of the Rous sarcoma virus matrix protein (M-domain)
in complex with inositol 1,4,5-trisphosphate
Authors : Vlach, J.; Saad, J.S.
Deposited on : 2018-03-27

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

We welcome your comments at validation@mail.wwpdb.org

A user guide is available at

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

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The types of validation reports are described at

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

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

MolProbity : 4.02b-467
Mogul : 1.8.5 (274361), CSD as541be (2020)
buster-report : 1.1.7 (2018)
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

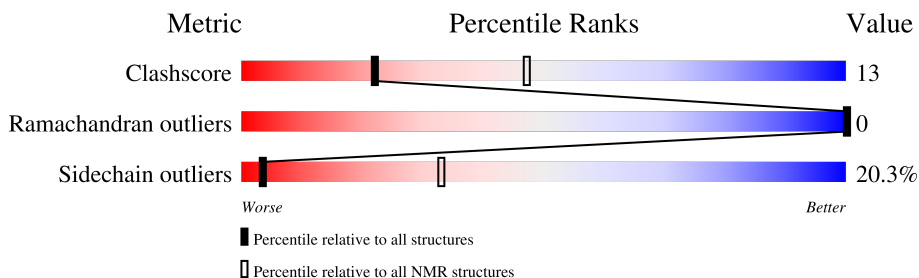
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment is 15%.

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



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

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

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	87	

2 Ensemble composition and analysis

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

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:21-A:87 (67)	0.03	2

Ill-defined regions of proteins are excluded from the global statistics.

Ligands and non-protein polymers are included in the analysis.

The models can be grouped into 3 clusters and 3 single-model clusters were found.

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

3 Entry composition [i](#)

There are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 1355 atoms, of which 689 are hydrogens and 0 are deuteriums.

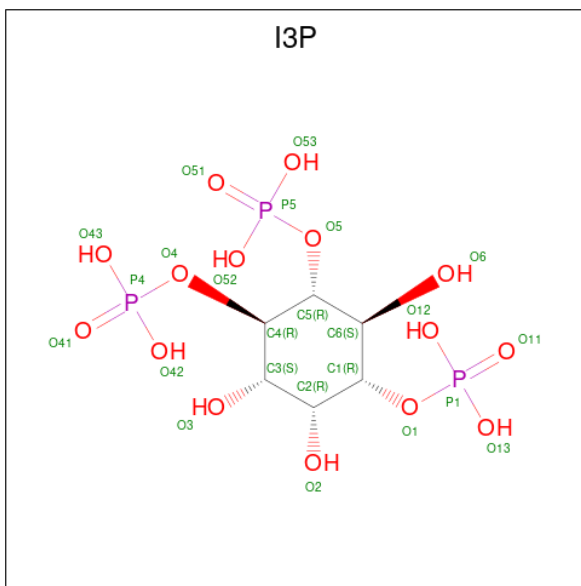
- Molecule 1 is a protein called Matrix protein p19.

Mol	Chain	Residues	Atoms					Trace	
			Total	C	H	N	O		S
1	A	87	1321	407	679	106	124	5	0

There is a discrepancy between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	1	SER	MET	engineered mutation	UNP P03354

- Molecule 2 is D-MYO-INOSITOL-1,4,5-TRIPHOSPHATE (three-letter code: I3P) (formula: $C_6H_{15}O_{15}P_3$).



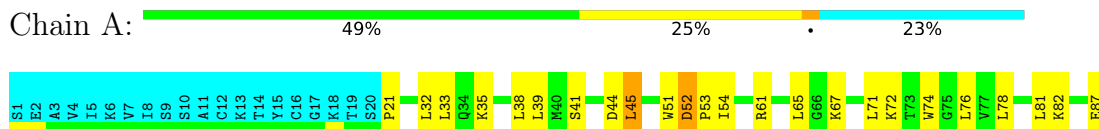
Mol	Chain	Residues	Atoms				
			Total	C	H	O	P
2	A	1	34	6	10	15	3

4 Residue-property plots

4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

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

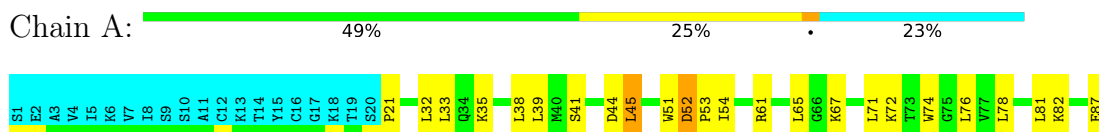
- Molecule 1: Matrix protein p19



4.2 Residue scores for the representative (medoid) model from the NMR ensemble

The representative model is number 2. Colouring as in section 4.1 above.

- Molecule 1: Matrix protein p19



5 Refinement protocol and experimental data overview

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

Of the 200 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *structures with the lowest energy*.

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

Software name	Classification	Version
HADDOCK	structure calculation	
CNS	refinement	

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

Chemical shift file(s)	working_cs.cif
Number of chemical shift lists	1
Total number of shifts	166
Number of shifts mapped to atoms	166
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Assignment completeness (well-defined parts)	15%

6 Model quality [i](#)

6.1 Standard geometry [i](#)

Bond lengths and bond angles in the following residue types are not validated in this section:
I3P

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

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

6.2 Too-close contacts [i](#)

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	500	526	526	14±0
All	All	10480	10720	10700	272

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 13.

5 of 14 unique clashes are listed below, sorted by their clash magnitude.

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:39:LEU:HD22	1:A:44:ASP:HB3	0.57	1.75	12	20
1:A:74:TRP:CZ2	1:A:78:LEU:HD13	0.52	2.39	12	20
1:A:51:TRP:CD2	1:A:78:LEU:HD11	0.50	2.42	7	20
1:A:45:LEU:HD12	1:A:81:LEU:HD12	0.50	1.83	12	20
1:A:39:LEU:HD22	1:A:44:ASP:CB	0.49	2.37	2	20

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	66/87 (76%)	63±0 (96±0%)	3±0 (4±0%)	0±0 (0±0%)	100	100
All	All	1320/1740 (76%)	1261 (96%)	59 (4%)	0 (0%)	100	100

There are no Ramachandran outliers.

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	53/70 (76%)	42±0 (80±1%)	11±0 (20±1%)	3	33
All	All	1060/1400 (76%)	845 (80%)	215 (20%)	3	33

5 of 11 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	35	LYS	20
1	A	41	SER	20
1	A	45	LEU	20
1	A	61	ARG	20
1	A	65	LEU	20

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](#)

1 ligand is modelled in this entry.

In the following table, the Counts columns list the number of bonds for which Mogul statistics could be retrieved, the number of bonds that are observed in the model and the number of bonds that are defined in the chemical component dictionary. The Link column lists molecule types, if any, to which the group is linked. The Z score for a bond length is the number of standard deviations the observed value is removed from the expected value. A bond length with $|Z| > 2$ is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the average root-mean-square of all Z scores of the bond lengths.

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths		
					Counts	RMSZ	#Z>2
2	I3P	A	101	-	24,24,24	4.17±0.00	9±0 (37±0%)

In the following table, the Counts columns list the number of angles for which Mogul statistics could be retrieved, the number of angles that are observed in the model and the number of angles that are defined in the chemical component dictionary. The Link column lists molecule types, if any, to which the group is linked. The Z score for a bond angle is the number of standard deviations the observed value is removed from the expected value. A bond angle with $|Z| > 2$ is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the average root-mean-square of all Z scores of the bond angles.

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond angles		
					Counts	RMSZ	#Z>2
2	I3P	A	101	-	36,39,39	0.65±0.00	0±0 (0±0%)

In the following table, the Chirals column lists the number of chiral outliers, the number of chiral centers analysed, the number of these observed in the model and the number defined in the chemical component dictionary. Similar counts are reported in the Torsion and Rings columns. '-' means no outliers of that kind were identified.

Mol	Type	Chain	Res	Link	Chirals	Torsions	Rings
2	I3P	A	101	-	-	0±0,15,39,39	0±0,1,1,1

5 of 9 unique bond 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(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
2	A	101	I3P	P5-O5	8.77	1.75	1.59	11	20
2	A	101	I3P	P4-O4	8.70	1.75	1.59	3	20
2	A	101	I3P	P1-O1	8.69	1.75	1.59	12	20
2	A	101	I3P	P1-O11	7.35	1.74	1.50	1	20
2	A	101	I3P	P4-O42	5.04	1.74	1.54	14	20

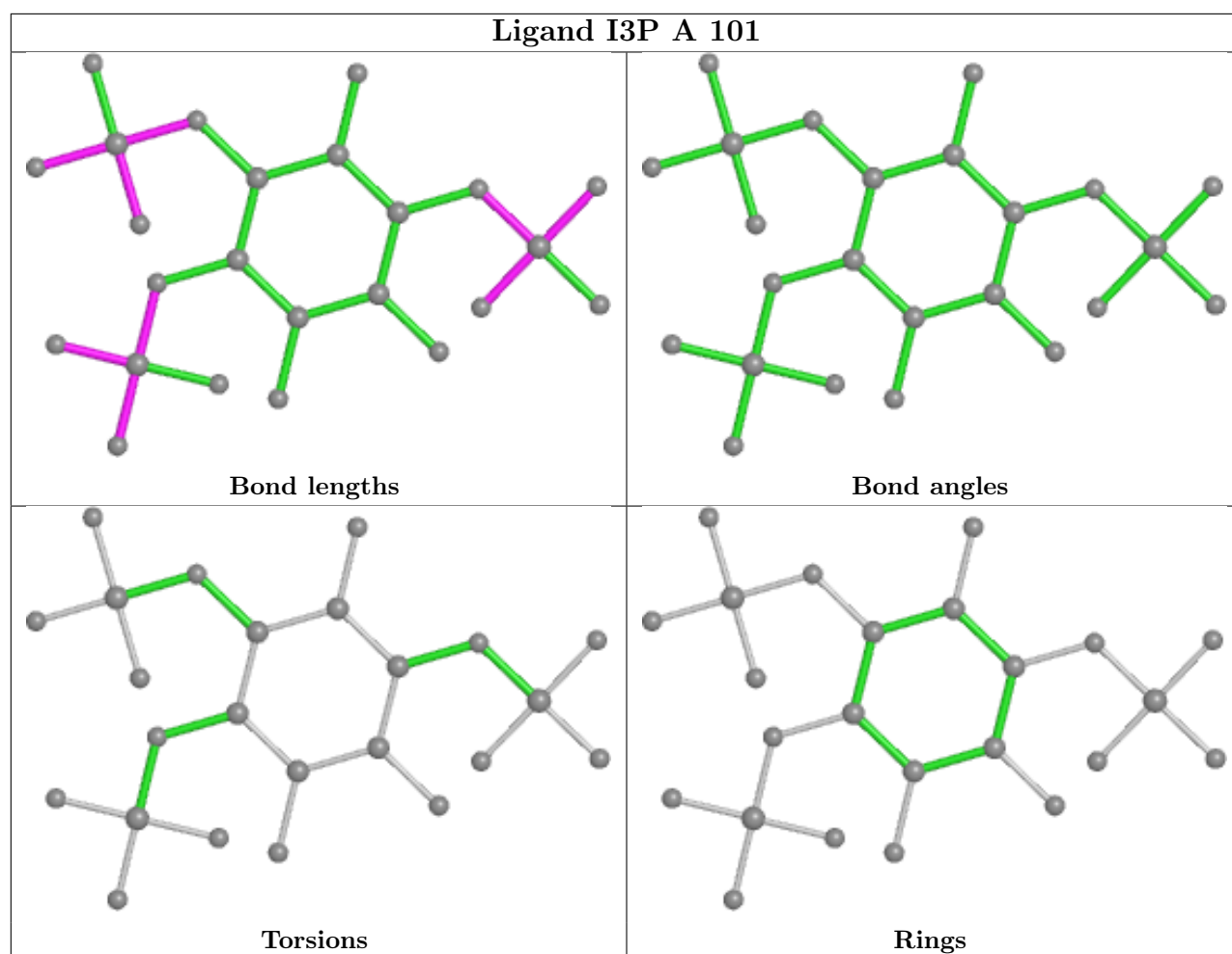
There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no torsion outliers.

There are no ring outliers.

The following is a two-dimensional graphical depiction of Mogul quality analysis of bond lengths, bond angles, torsion angles, and ring geometry for all instances of the Ligand of Interest. In addition, ligands with molecular weight > 250 and outliers as shown on the validation Tables will also be included. For torsion angles, if less than 5% of the Mogul distribution of torsion angles is within 10 degrees of the torsion angle in question, then that torsion angle is considered an outlier. Any bond that is central to one or more torsion angles identified as an outlier by Mogul will be highlighted in the graph. For rings, the root-mean-square deviation (RMSD) between the ring in question and similar rings identified by Mogul is calculated over all ring torsion angles. If the average RMSD is greater than 60 degrees and the minimal RMSD between the ring in question and any Mogul-identified rings is also greater than 60 degrees, then that ring is considered an outlier. The outliers are highlighted in purple. The color gray indicates Mogul did not find sufficient equivalents in the CSD to analyse the geometry.



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 15% for the well-defined parts and 15% for the entire structure.

7.1 Chemical shift list 1

File name: working_cs.cif

Chemical shift list name: *assigned_chem_shift_list*

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	166
Number of shifts mapped to atoms	166
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
$^{13}\text{C}_\alpha$	0	—	None (insufficient data)
$^{13}\text{C}_\beta$	0	—	None (insufficient data)
$^{13}\text{C}'$	0	—	None (insufficient data)
^{15}N	81	1.24 \pm 0.64	None needed (imprecise)

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 15%, i.e. 130 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 888. 0 out of 13 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	^1H	^{13}C	^{15}N
Backbone	126/334 (38%)	63/137 (46%)	0/134 (0%)	63/63 (100%)
Sidechain	0/521 (0%)	0/344 (0%)	0/163 (0%)	0/14 (0%)

Continued on next page...

Continued from previous page...

	Total	¹ H	¹³ C	¹⁵ N
Aromatic	4/33 (12%)	2/16 (12%)	0/15 (0%)	2/2 (100%)
Overall	130/888 (15%)	65/497 (13%)	0/312 (0%)	65/79 (82%)

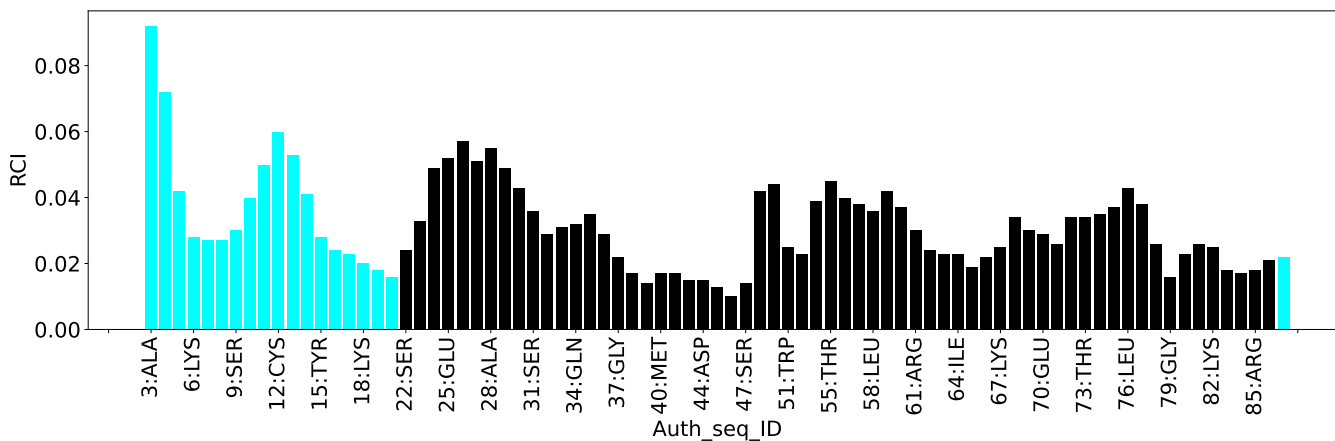
7.1.4 Statistically unusual chemical shifts [i](#)

There are no statistically unusual chemical shifts.

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

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

Random coil index (RCI) for chain A:



8 NMR restraints analysis

8.1 Conformationally restricting restraints

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

Description	Value
Total distance restraints	4
Intra-residue ($ i-j =0$)	0
Sequential ($ i-j =1$)	1
Medium range ($ i-j >1$ and $ i-j <5$)	0
Long range ($ i-j \geq 5$)	3
Inter-chain	0
Hydrogen bond restraints	0
Disulfide bond restraints	0
Total dihedral-angle restraints	0
Number of unmapped restraints	0
Number of restraints per residue	0.0
Number of long range restraints per residue ¹	0.0

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

8.2 Residual restraint violations

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

8.2.1 Average number of distance violations per model

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

Bins (Å)	Average number of violations per model	Max (Å)
0.1-0.2 (Small)	0.1	0.19
0.2-0.5 (Medium)	0.2	0.49
>0.5 (Large)	0.7	1.13

8.2.2 Average number of dihedral-angle violations per model

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

9 Distance violation analysis [i](#)

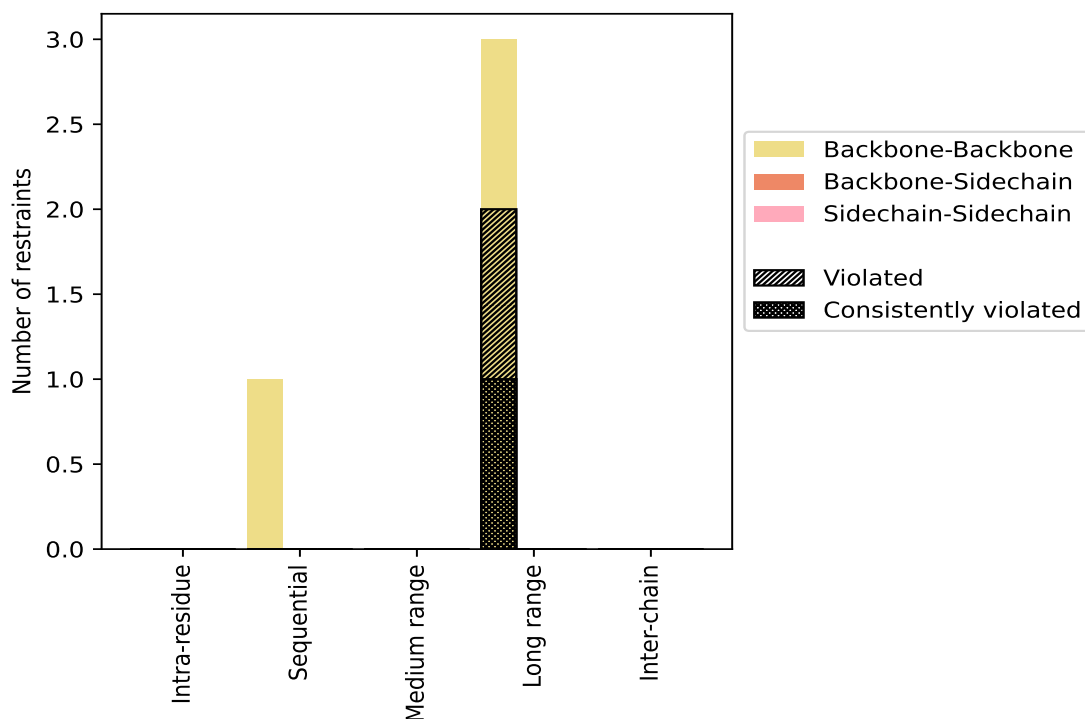
9.1 Summary of distance violations [i](#)

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

Restrains type	Count	% ¹	Violated ³			Consistently Violated ⁴		
			Count	% ²	% ¹	Count	% ²	% ¹
Intra-residue (i-j =0)	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
Sequential (i-j =1)	1	25.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Backbone	1	25.0	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
Medium range (i-j >1 & i-j <5)	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
Long range (i-j ≥5)	3	75.0	2	66.7	50.0	1	33.3	25.0
Backbone-Backbone	3	75.0	2	66.7	50.0	1	33.3	25.0
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
Inter-chain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Backbone	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Hydrogen bond	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Disulfide bond	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Total	4	100.0	2	50.0	50.0	1	25.0	25.0
Backbone-Backbone	4	100.0	2	50.0	50.0	1	25.0	25.0
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

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

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



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

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

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

Model ID	Number of violations						Mean (Å)	Max (Å)	SD ⁶ (Å)	Median (Å)
	IR ¹	SQ ²	MR ³	LR ⁴	IC ⁵	Total				
1	0	0	0	1	0	1	0.63	0.63	0.0	0.63
2	0	0	0	1	0	1	0.72	0.72	0.0	0.72
3	0	0	0	1	0	1	0.59	0.59	0.0	0.59
4	0	0	0	1	0	1	0.66	0.66	0.0	0.66
5	0	0	0	1	0	1	0.26	0.26	0.0	0.26
6	0	0	0	1	0	1	0.52	0.52	0.0	0.52
7	0	0	0	1	0	1	1.13	1.13	0.0	1.13
8	0	0	0	1	0	1	0.24	0.24	0.0	0.24
9	0	0	0	1	0	1	0.32	0.32	0.0	0.32
10	0	0	0	1	0	1	0.21	0.21	0.0	0.21
11	0	0	0	1	0	1	0.91	0.91	0.0	0.91

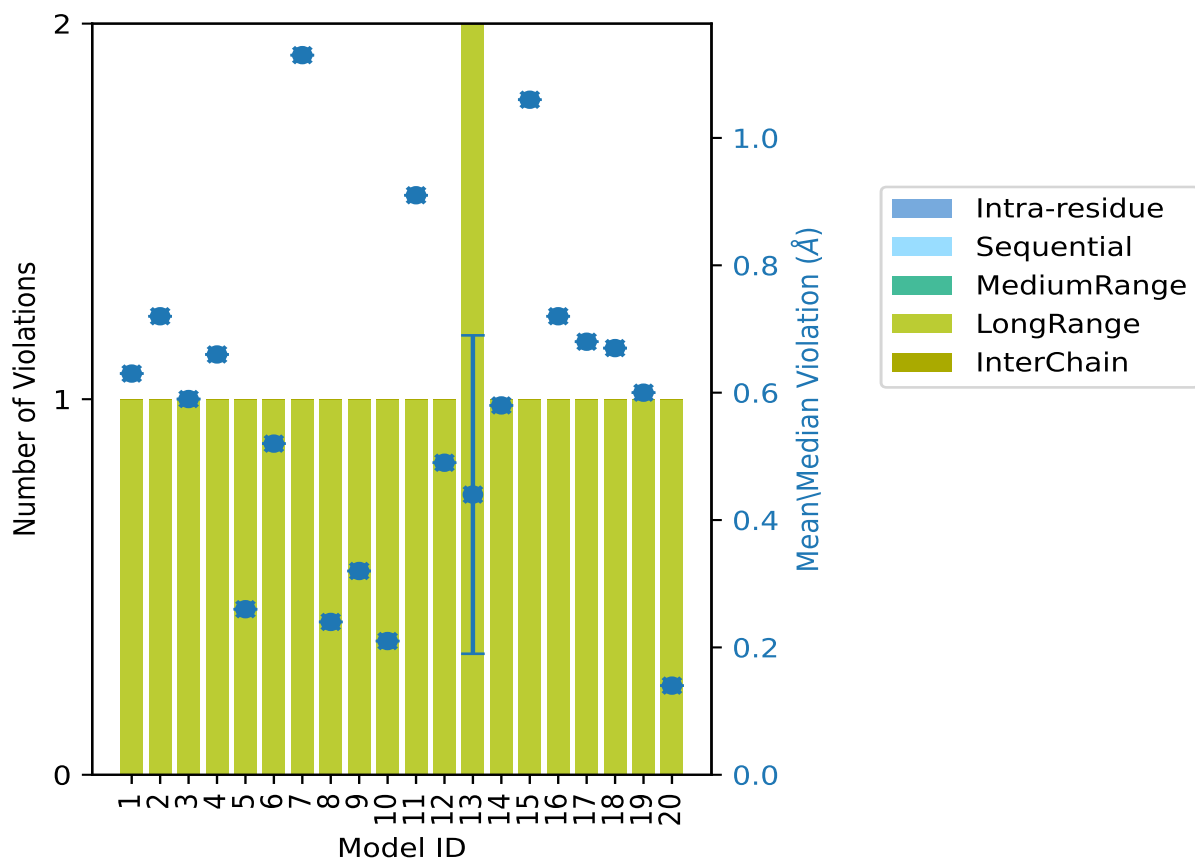
Continued on next page...

Continued from previous page...

Model ID	Number of violations						Mean (Å)	Max (Å)	SD ⁶ (Å)	Median (Å)
	IR ¹	SQ ²	MR ³	LR ⁴	IC ⁵	Total				
12	0	0	0	1	0	1	0.49	0.49	0.0	0.49
13	0	0	0	2	0	2	0.44	0.68	0.25	0.44
14	0	0	0	1	0	1	0.58	0.58	0.0	0.58
15	0	0	0	1	0	1	1.06	1.06	0.0	1.06
16	0	0	0	1	0	1	0.72	0.72	0.0	0.72
17	0	0	0	1	0	1	0.68	0.68	0.0	0.68
18	0	0	0	1	0	1	0.67	0.67	0.0	0.67
19	0	0	0	1	0	1	0.6	0.6	0.0	0.6
20	0	0	0	1	0	1	0.14	0.14	0.0	0.14

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

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



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

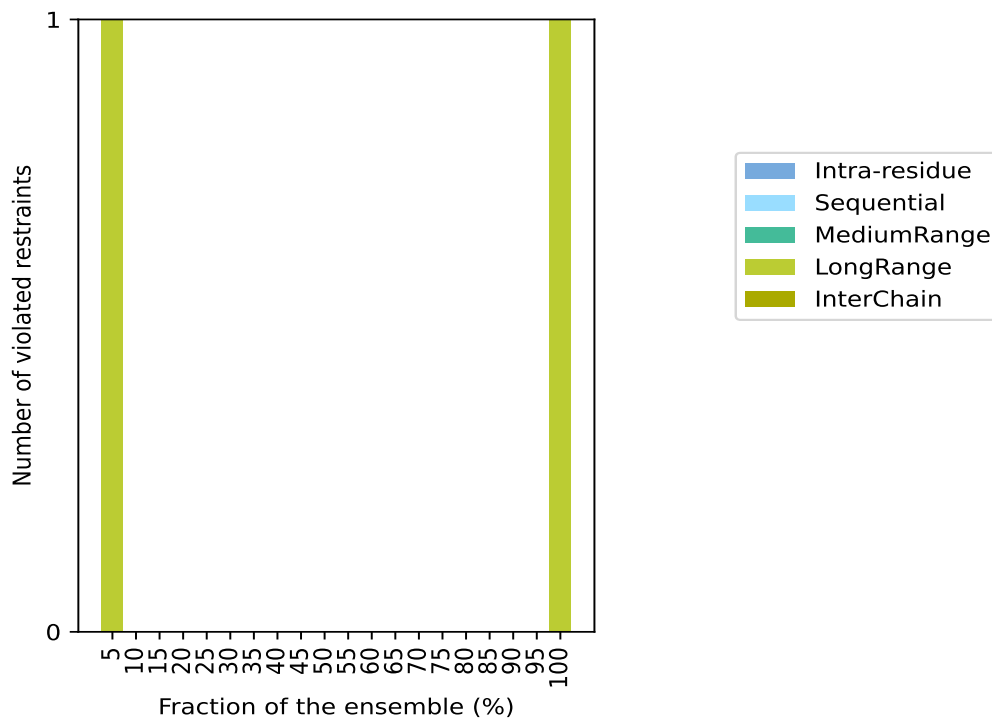
9.3 Distance violation statistics for the ensemble

Violation analysis may find that some restraints are violated in few models and some are violated in most of models. The following table provides this information as number of violated restraints for a given fraction of the ensemble. In total, 2(IR:0, SQ:1, MR:0, LR:1, IC:0) restraints are not violated in the ensemble.

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

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

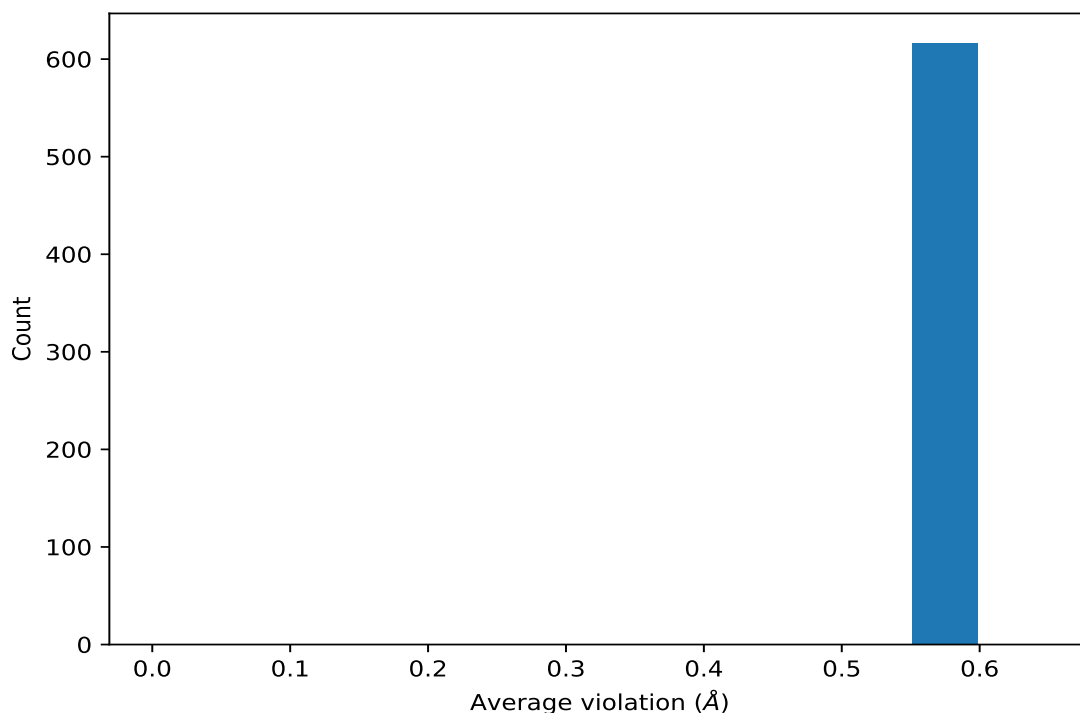
9.3.1 Bar graph : Distance violation statistics for the ensemble [i](#)



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

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

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



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

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

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:C	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:CA	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:CB	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:HA	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:HB2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:HB3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:HG	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:N	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:O	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:OG	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:C1	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:C2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:C3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:C4	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:C5	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:C6	20	0.59	0.26	0.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:H1	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:H2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:H3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:H4	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:H5	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:H6	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:O1	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:O2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:O3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:O4	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:O5	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:O6	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:C	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:CA	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:CB	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:HA	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:HB2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:HB3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:HG	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:N	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:O	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:OG	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:C1	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:C2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:C3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:C4	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:C5	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:C6	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:H1	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:H2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:H3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:H4	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:H5	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:H6	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:O1	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:O2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:O3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:O4	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:O5	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:O6	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:C	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:CA	20	0.59	0.26	0.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:CB	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:HA	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:HB2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:HB3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:HG	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:N	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:O	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:OG	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:C1	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:C2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:C3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:C4	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:C5	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:C6	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:H1	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:H2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:H3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:H4	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:H5	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:H6	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:O1	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:O2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:O3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:O4	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:O5	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:O6	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:C	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:CA	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:CB	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:HA	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:HB2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:HB3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:HG	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:N	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:O	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:OG	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:C1	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:C2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:C3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:C4	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:C5	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:C6	20	0.59	0.26	0.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:H1	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:H2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:H3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:H4	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:H5	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:H6	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:O1	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:O2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:O3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:O4	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:O5	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:O6	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:C	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:CA	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:CB	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:HA	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:HB2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:HB3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:HG	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:N	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:O	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:OG	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:C1	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:C2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:C3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:C4	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:C5	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:C6	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:H1	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:H2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:H3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:H4	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:H5	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:H6	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:O1	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:O2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:O3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:O4	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:O5	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:O6	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:C	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:CA	20	0.59	0.26	0.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:CB	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:HA	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:HB2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:HB3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:HG	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:N	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:O	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:OG	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:C1	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:C2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:C3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:C4	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:C5	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:C6	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:H1	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:H2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:H3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:H4	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:H5	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:H6	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:O1	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:O2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:O3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:O4	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:O5	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:O6	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:C	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:CA	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:CB	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:HA	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:HB2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:HB3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:HG	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:N	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:O	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:OG	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:C1	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:C2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:C3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:C4	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:C5	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:C6	20	0.59	0.26	0.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:H1	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:H2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:H3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:H4	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:H5	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:H6	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:O1	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:O2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:O3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:O4	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:O5	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:O6	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:C	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:CA	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:CB	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:HA	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:HB2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:HB3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:HG	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:N	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:O	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:OG	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:C1	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:C2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:C3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:C4	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:C5	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:C6	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:H1	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:H2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:H3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:H4	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:H5	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:H6	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:O1	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:O2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:O3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:O4	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:O5	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:O6	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:C	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:CA	20	0.59	0.26	0.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:CB	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:HA	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:HB2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:HB3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:HG	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:N	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:O	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:OG	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:C1	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:C2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:C3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:C4	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:C5	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:C6	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:H1	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:H2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:H3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:H4	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:H5	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:H6	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:O1	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:O2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:O3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:O4	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:O5	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:O6	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:C	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:CA	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:CB	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:HA	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:HB2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:HB3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:HG	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:N	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:O	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:OG	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:C1	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:C2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:C3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:C4	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:C5	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:C6	20	0.59	0.26	0.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:H1	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:H2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:H3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:H4	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:H5	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:H6	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:O1	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:O2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:O3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:O4	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:O5	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:O6	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:C	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:CA	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:CB	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:HA	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:HB2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:HB3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:HG	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:N	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:O	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:OG	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:C1	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:C2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:C3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:C4	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:C5	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:C6	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:H1	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:H2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:H3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:H4	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:H5	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:H6	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:O1	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:O2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:O3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:O4	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:O5	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:O6	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:C	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:CA	20	0.59	0.26	0.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:CB	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:HA	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:HB2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:HB3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:HG	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:N	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:O	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:OG	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:C1	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:C2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:C3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:C4	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:C5	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:C6	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:H1	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:H2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:H3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:H4	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:H5	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:H6	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:O1	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:O2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:O3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:O4	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:O5	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:O6	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:C	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:CA	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:CB	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:HA	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:HB2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:HB3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:HG	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:N	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:O	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:OG	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:C1	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:C2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:C3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:C4	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:C5	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:C6	20	0.59	0.26	0.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:H1	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:H2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:H3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:H4	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:H5	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:H6	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:O1	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:O2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:O3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:O4	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:O5	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:O6	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:C	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:CA	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:CB	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:HA	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:HB2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:HB3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:HG	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:N	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:O	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:OG	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:C1	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:C2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:C3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:C4	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:C5	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:C6	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:H1	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:H2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:H3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:H4	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:H5	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:H6	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:O1	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:O2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:O3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:O4	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:O5	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:O6	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:C	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:CA	20	0.59	0.26	0.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:CB	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:HA	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:HB2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:HB3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:HG	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:N	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:O	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:OG	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:C1	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:C2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:C3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:C4	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:C5	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:C6	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:H1	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:H2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:H3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:H4	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:H5	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:H6	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:O1	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:O2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:O3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:O4	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:O5	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:O6	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:C	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:CA	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:CB	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:HA	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:HB2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:HB3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:HG	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:N	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:O	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:OG	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:C1	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:C2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:C3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:C4	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:C5	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:C6	20	0.59	0.26	0.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:H1	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:H2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:H3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:H4	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:H5	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:H6	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:O1	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:O2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:O3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:O4	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:O5	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:O6	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:C	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:CA	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:CB	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:HA	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:HB2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:HB3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:HG	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:N	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:O	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:OG	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:C1	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:C2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:C3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:C4	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:C5	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:C6	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:H1	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:H2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:H3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:H4	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:H5	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:H6	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:O1	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:O2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:O3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:O4	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:O5	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:O6	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:C	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:CA	20	0.59	0.26	0.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:CB	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:HA	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:HB2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:HB3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:HG	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:N	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:O	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:OG	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:C1	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:C2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:C3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:C4	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:C5	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:C6	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:H1	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:H2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:H3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:H4	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:H5	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:H6	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:O1	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:O2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:O3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:O4	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:O5	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:O6	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:C	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:CA	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:CB	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:HA	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:HB2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:HB3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:HG	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:N	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:O	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:OG	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:C1	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:C2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:C3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:C4	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:C5	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:C6	20	0.59	0.26	0.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:H1	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:H2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:H3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:H4	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:H5	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:H6	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:O1	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:O2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:O3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:O4	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:O5	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:O6	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:C	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:CA	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:CB	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:HA	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:HB2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:HB3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:HG	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:N	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:O	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:OG	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:C1	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:C2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:C3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:C4	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:C5	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:C6	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:H1	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:H2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:H3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:H4	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:H5	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:H6	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:O1	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:O2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:O3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:O4	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:O5	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:O6	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:C	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:CA	20	0.59	0.26	0.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:CB	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:HA	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:HB2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:HB3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:HG	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:N	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:O	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:OG	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:C1	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:C2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:C3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:C4	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:C5	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:C6	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:H1	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:H2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:H3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:H4	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:H5	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:H6	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:O1	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:O2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:O3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:O4	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:O5	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:O6	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:C	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:CA	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:CB	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:HA	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:HB2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:HB3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:HG	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:N	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:O	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:OG	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:C1	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:C2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:C3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:C4	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:C5	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:C6	20	0.59	0.26	0.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

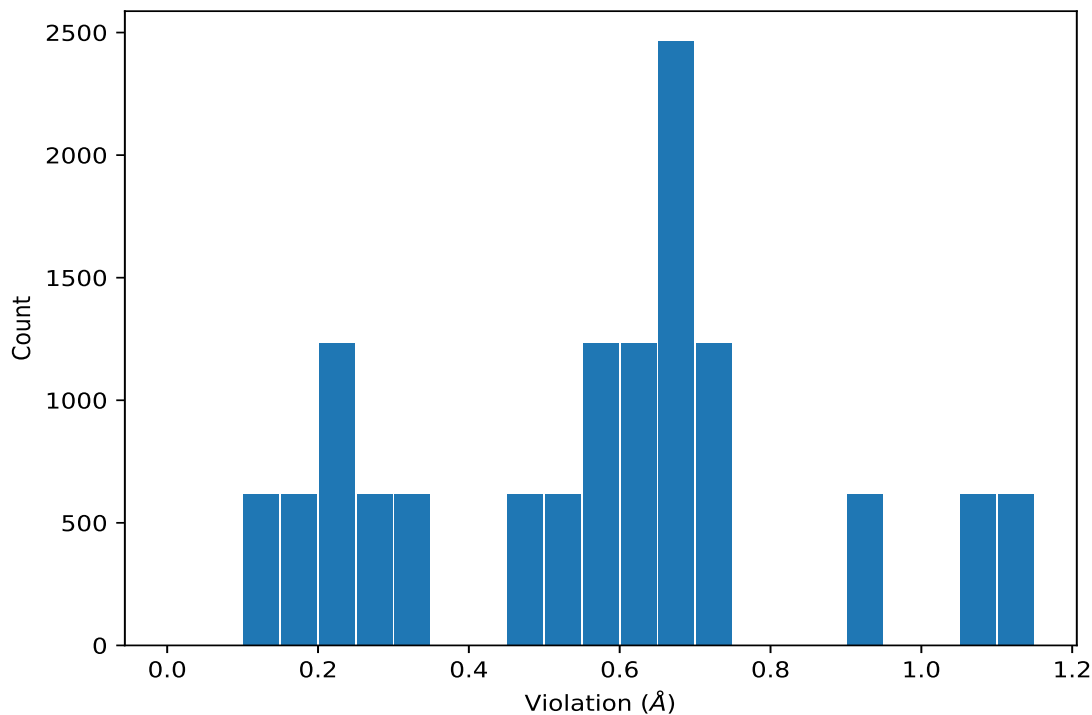
Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:H1	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:H2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:H3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:H4	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:H5	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:H6	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:O1	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:O2	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:O3	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:O4	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:O5	20	0.59	0.26	0.62
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:O6	20	0.59	0.26	0.62

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 provides the 10 worst performing restraints, sorted by the violation 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)
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:C	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:CA	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:CB	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:HA	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:HB2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:HB3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:HG	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:N	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:O	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:OG	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:C1	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:C2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:C3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:C4	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:C5	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:C6	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:H1	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:H2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:H3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:H4	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:H5	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:H6	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:O1	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:O2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:O3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:O4	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:O5	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:O6	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:C	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:CA	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:CB	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:HA	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:HB2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:HB3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:HG	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:N	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:O	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:OG	7	1.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:C1	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:C2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:C3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:C4	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:C5	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:C6	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:H1	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:H2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:H3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:H4	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:H5	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:H6	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:O1	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:O2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:O3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:O4	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:O5	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:O6	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:C	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:CA	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:CB	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:HA	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:HB2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:HB3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:HG	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:N	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:O	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:OG	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:C1	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:C2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:C3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:C4	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:C5	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:C6	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:H1	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:H2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:H3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:H4	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:H5	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:H6	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:O1	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:O2	7	1.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:O3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:O4	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:O5	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:O6	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:C	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:CA	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:CB	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:HA	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:HB2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:HB3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:HG	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:N	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:O	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:OG	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:C1	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:C2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:C3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:C4	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:C5	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:C6	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:H1	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:H2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:H3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:H4	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:H5	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:H6	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:O1	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:O2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:O3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:O4	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:O5	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:O6	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:C	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:CA	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:CB	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:HA	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:HB2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:HB3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:HG	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:N	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:O	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:OG	7	1.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:C1	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:C2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:C3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:C4	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:C5	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:C6	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:H1	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:H2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:H3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:H4	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:H5	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:H6	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:O1	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:O2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:O3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:O4	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:O5	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:O6	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:C	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:CA	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:CB	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:HA	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:HB2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:HB3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:HG	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:N	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:O	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:OG	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:C1	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:C2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:C3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:C4	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:C5	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:C6	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:H1	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:H2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:H3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:H4	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:H5	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:H6	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:O1	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:O2	7	1.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:O3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:O4	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:O5	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:O6	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:C	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:CA	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:CB	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:HA	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:HB2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:HB3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:HG	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:N	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:O	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:OG	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:C1	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:C2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:C3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:C4	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:C5	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:C6	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:H1	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:H2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:H3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:H4	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:H5	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:H6	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:O1	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:O2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:O3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:O4	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:O5	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:O6	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:C	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:CA	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:CB	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:HA	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:HB2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:HB3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:HG	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:N	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:O	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:OG	7	1.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:C1	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:C2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:C3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:C4	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:C5	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:C6	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:H1	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:H2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:H3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:H4	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:H5	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:H6	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:O1	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:O2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:O3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:O4	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:O5	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:O6	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:C	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:CA	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:CB	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:HA	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:HB2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:HB3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:HG	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:N	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:O	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:OG	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:C1	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:C2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:C3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:C4	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:C5	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:C6	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:H1	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:H2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:H3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:H4	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:H5	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:H6	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:O1	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:O2	7	1.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:O3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:O4	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:O5	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:O6	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:C	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:CA	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:CB	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:HA	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:HB2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:HB3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:HG	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:N	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:O	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:OG	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:C1	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:C2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:C3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:C4	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:C5	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:C6	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:H1	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:H2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:H3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:H4	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:H5	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:H6	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:O1	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:O2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:O3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:O4	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:O5	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:O6	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:C	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:CA	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:CB	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:HA	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:HB2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:HB3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:HG	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:N	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:O	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:OG	7	1.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:C1	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:C2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:C3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:C4	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:C5	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:C6	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:H1	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:H2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:H3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:H4	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:H5	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:H6	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:O1	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:O2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:O3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:O4	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:O5	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:O6	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:C	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:CA	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:CB	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:HA	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:HB2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:HB3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:HG	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:N	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:O	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:OG	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:C1	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:C2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:C3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:C4	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:C5	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:C6	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:H1	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:H2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:H3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:H4	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:H5	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:H6	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:O1	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:O2	7	1.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:O3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:O4	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:O5	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:O6	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:C	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:CA	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:CB	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:HA	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:HB2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:HB3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:HG	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:N	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:O	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:OG	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:C1	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:C2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:C3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:C4	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:C5	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:C6	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:H1	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:H2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:H3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:H4	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:H5	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:H6	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:O1	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:O2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:O3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:O4	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:O5	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:O6	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:C	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:CA	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:CB	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:HA	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:HB2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:HB3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:HG	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:N	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:O	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:OG	7	1.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:C1	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:C2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:C3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:C4	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:C5	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:C6	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:H1	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:H2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:H3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:H4	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:H5	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:H6	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:O1	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:O2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:O3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:O4	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:O5	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:O6	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:C	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:CA	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:CB	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:HA	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:HB2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:HB3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:HG	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:N	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:O	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:OG	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:C1	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:C2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:C3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:C4	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:C5	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:C6	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:H1	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:H2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:H3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:H4	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:H5	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:H6	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:O1	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:O2	7	1.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:O3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:O4	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:O5	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:O6	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:C	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:CA	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:CB	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:HA	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:HB2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:HB3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:HG	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:N	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:O	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:OG	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:C1	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:C2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:C3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:C4	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:C5	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:C6	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:H1	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:H2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:H3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:H4	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:H5	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:H6	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:O1	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:O2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:O3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:O4	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:O5	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:O6	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:C	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:CA	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:CB	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:HA	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:HB2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:HB3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:HG	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:N	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:O	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:OG	7	1.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:C1	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:C2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:C3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:C4	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:C5	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:C6	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:H1	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:H2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:H3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:H4	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:H5	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:H6	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:O1	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:O2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:O3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:O4	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:O5	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:O6	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:C	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:CA	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:CB	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:HA	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:HB2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:HB3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:HG	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:N	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:O	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:OG	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:C1	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:C2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:C3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:C4	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:C5	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:C6	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:H1	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:H2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:H3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:H4	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:H5	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:H6	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:O1	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:O2	7	1.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:O3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:O4	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:O5	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:O6	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:C	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:CA	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:CB	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:HA	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:HB2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:HB3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:HG	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:N	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:O	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:OG	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:C1	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:C2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:C3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:C4	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:C5	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:C6	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:H1	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:H2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:H3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:H4	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:H5	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:H6	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:O1	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:O2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:O3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:O4	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:O5	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:O6	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:C	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:CA	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:CB	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:HA	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:HB2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:HB3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:HG	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:N	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:O	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:OG	7	1.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:C1	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:C2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:C3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:C4	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:C5	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:C6	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:H1	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:H2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:H3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:H4	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:H5	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:H6	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:O1	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:O2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:O3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:O4	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:O5	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:O6	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:C	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:CA	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:CB	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:HA	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:HB2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:HB3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:HG	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:N	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:O	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:OG	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:C1	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:C2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:C3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:C4	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:C5	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:C6	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:H1	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:H2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:H3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:H4	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:H5	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:H6	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:O1	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:O2	7	1.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:O3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:O4	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:O5	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:O6	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:C	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:CA	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:CB	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:HA	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:HB2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:HB3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:HG	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:N	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:O	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:OG	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:C1	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:C2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:C3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:C4	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:C5	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:C6	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:H1	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:H2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:H3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:H4	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:H5	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:H6	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:O1	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:O2	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:O3	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:O4	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:O5	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:O6	7	1.13
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:C	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:CA	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:CB	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:HA	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:HB2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:HB3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:HG	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:N	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:O	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:OG	15	1.06

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:C1	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:C2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:C3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:C4	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:C5	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:C6	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:H1	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:H2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:H3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:H4	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:H5	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:H6	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:O1	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:O2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:O3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:O4	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:O5	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:O6	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:C	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:CA	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:CB	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:HA	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:HB2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:HB3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:HG	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:N	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:O	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:OG	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:C1	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:C2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:C3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:C4	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:C5	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:C6	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:H1	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:H2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:H3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:H4	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:H5	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:H6	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:O1	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:O2	15	1.06

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:O3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:O4	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:O5	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:O6	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:C	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:CA	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:CB	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:HA	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:HB2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:HB3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:HG	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:N	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:O	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:OG	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:C1	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:C2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:C3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:C4	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:C5	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:C6	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:H1	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:H2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:H3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:H4	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:H5	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:H6	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:O1	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:O2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:O3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:O4	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:O5	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:O6	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:C	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:CA	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:CB	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:HA	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:HB2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:HB3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:HG	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:N	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:O	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:OG	15	1.06

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:C1	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:C2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:C3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:C4	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:C5	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:C6	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:H1	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:H2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:H3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:H4	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:H5	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:H6	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:O1	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:O2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:O3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:O4	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:O5	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:O6	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:C	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:CA	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:CB	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:HA	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:HB2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:HB3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:HG	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:N	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:O	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:OG	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:C1	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:C2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:C3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:C4	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:C5	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:C6	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:H1	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:H2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:H3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:H4	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:H5	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:H6	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:O1	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:O2	15	1.06

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:O3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:O4	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:O5	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:O6	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:C	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:CA	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:CB	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:HA	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:HB2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:HB3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:HG	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:N	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:O	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:OG	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:C1	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:C2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:C3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:C4	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:C5	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:C6	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:H1	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:H2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:H3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:H4	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:H5	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:H6	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:O1	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:O2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:O3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:O4	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:O5	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:O6	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:C	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:CA	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:CB	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:HA	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:HB2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:HB3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:HG	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:N	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:O	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:OG	15	1.06

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:C1	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:C2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:C3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:C4	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:C5	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:C6	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:H1	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:H2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:H3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:H4	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:H5	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:H6	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:O1	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:O2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:O3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:O4	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:O5	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:O6	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:C	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:CA	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:CB	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:HA	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:HB2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:HB3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:HG	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:N	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:O	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:OG	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:C1	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:C2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:C3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:C4	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:C5	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:C6	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:H1	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:H2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:H3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:H4	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:H5	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:H6	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:O1	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:O2	15	1.06

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:O3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:O4	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:O5	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:O6	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:C	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:CA	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:CB	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:HA	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:HB2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:HB3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:HG	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:N	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:O	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:OG	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:C1	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:C2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:C3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:C4	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:C5	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:C6	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:H1	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:H2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:H3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:H4	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:H5	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:H6	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:O1	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:O2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:O3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:O4	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:O5	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:O6	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:C	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:CA	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:CB	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:HA	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:HB2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:HB3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:HG	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:N	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:O	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:OG	15	1.06

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:C1	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:C2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:C3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:C4	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:C5	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:C6	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:H1	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:H2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:H3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:H4	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:H5	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:H6	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:O1	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:O2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:O3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:O4	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:O5	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:O6	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:C	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:CA	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:CB	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:HA	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:HB2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:HB3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:HG	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:N	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:O	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:OG	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:C1	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:C2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:C3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:C4	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:C5	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:C6	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:H1	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:H2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:H3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:H4	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:H5	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:H6	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:O1	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:O2	15	1.06

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:O3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:O4	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:O5	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:O6	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:C	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:CA	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:CB	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:HA	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:HB2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:HB3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:HG	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:N	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:O	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:OG	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:C1	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:C2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:C3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:C4	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:C5	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:C6	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:H1	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:H2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:H3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:H4	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:H5	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:H6	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:O1	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:O2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:O3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:O4	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:O5	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:O6	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:C	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:CA	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:CB	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:HA	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:HB2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:HB3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:HG	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:N	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:O	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:OG	15	1.06

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:C1	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:C2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:C3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:C4	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:C5	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:C6	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:H1	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:H2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:H3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:H4	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:H5	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:H6	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:O1	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:O2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:O3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:O4	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:O5	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:O6	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:C	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:CA	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:CB	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:HA	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:HB2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:HB3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:HG	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:N	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:O	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:OG	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:C1	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:C2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:C3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:C4	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:C5	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:C6	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:H1	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:H2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:H3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:H4	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:H5	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:H6	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:O1	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:O2	15	1.06

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:O3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:O4	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:O5	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:O6	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:C	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:CA	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:CB	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:HA	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:HB2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:HB3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:HG	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:N	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:O	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:OG	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:C1	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:C2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:C3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:C4	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:C5	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:C6	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:H1	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:H2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:H3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:H4	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:H5	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:H6	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:O1	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:O2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:O3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:O4	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:O5	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:O6	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:C	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:CA	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:CB	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:HA	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:HB2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:HB3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:HG	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:N	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:O	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:OG	15	1.06

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:C1	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:C2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:C3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:C4	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:C5	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:C6	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:H1	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:H2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:H3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:H4	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:H5	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:H6	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:O1	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:O2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:O3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:O4	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:O5	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:O6	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:C	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:CA	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:CB	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:HA	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:HB2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:HB3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:HG	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:N	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:O	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:OG	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:C1	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:C2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:C3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:C4	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:C5	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:C6	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:H1	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:H2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:H3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:H4	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:H5	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:H6	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:O1	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:O2	15	1.06

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:O3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:O4	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:O5	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:O6	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:C	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:CA	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:CB	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:HA	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:HB2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:HB3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:HG	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:N	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:O	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:OG	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:C1	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:C2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:C3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:C4	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:C5	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:C6	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:H1	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:H2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:H3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:H4	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:H5	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:H6	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:O1	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:O2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:O3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:O4	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:O5	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:O6	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:C	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:CA	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:CB	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:HA	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:HB2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:HB3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:HG	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:N	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:O	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:OG	15	1.06

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:C1	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:C2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:C3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:C4	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:C5	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:C6	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:H1	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:H2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:H3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:H4	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:H5	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:H6	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:O1	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:O2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:O3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:O4	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:O5	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:O6	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:C	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:CA	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:CB	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:HA	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:HB2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:HB3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:HG	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:N	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:O	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:OG	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:C1	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:C2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:C3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:C4	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:C5	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:C6	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:H1	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:H2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:H3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:H4	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:H5	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:H6	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:O1	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:O2	15	1.06

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:O3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:O4	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:O5	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:O6	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:C	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:CA	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:CB	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:HA	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:HB2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:HB3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:HG	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:N	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:O	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:OG	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:C1	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:C2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:C3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:C4	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:C5	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:C6	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:H1	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:H2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:H3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:H4	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:H5	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:H6	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:O1	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:O2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:O3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:O4	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:O5	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:O6	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:C	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:CA	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:CB	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:HA	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:HB2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:HB3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:HG	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:N	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:O	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:OG	15	1.06

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:C1	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:C2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:C3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:C4	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:C5	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:C6	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:H1	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:H2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:H3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:H4	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:H5	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:H6	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:O1	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:O2	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:O3	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:O4	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:O5	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:O6	15	1.06
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:C	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:CA	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:CB	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:HA	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:HB2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:HB3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:HG	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:N	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:O	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:OG	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:C1	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:C2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:C3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:C4	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:C5	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:C6	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:H1	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:H2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:H3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:H4	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:H5	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:H6	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:O1	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:O2	11	0.91

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:O3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:O4	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:O5	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:O6	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:C	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:CA	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:CB	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:HA	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:HB2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:HB3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:HG	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:N	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:O	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:OG	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:C1	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:C2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:C3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:C4	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:C5	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:C6	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:H1	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:H2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:H3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:H4	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:H5	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:H6	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:O1	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:O2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:O3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:O4	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:O5	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:O6	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:C	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:CA	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:CB	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:HA	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:HB2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:HB3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:HG	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:N	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:O	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:OG	11	0.91

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:C1	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:C2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:C3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:C4	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:C5	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:C6	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:H1	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:H2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:H3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:H4	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:H5	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:H6	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:O1	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:O2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:O3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:O4	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:O5	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:O6	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:C	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:CA	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:CB	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:HA	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:HB2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:HB3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:HG	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:N	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:O	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:OG	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:C1	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:C2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:C3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:C4	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:C5	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:C6	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:H1	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:H2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:H3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:H4	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:H5	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:H6	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:O1	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:O2	11	0.91

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:O3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:O4	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:O5	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:O6	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:C	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:CA	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:CB	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:HA	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:HB2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:HB3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:HG	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:N	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:O	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:OG	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:C1	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:C2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:C3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:C4	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:C5	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:C6	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:H1	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:H2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:H3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:H4	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:H5	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:H6	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:O1	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:O2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:O3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:O4	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:O5	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:O6	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:C	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:CA	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:CB	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:HA	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:HB2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:HB3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:HG	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:N	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:O	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:OG	11	0.91

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:C1	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:C2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:C3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:C4	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:C5	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:C6	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:H1	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:H2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:H3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:H4	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:H5	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:H6	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:O1	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:O2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:O3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:O4	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:O5	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:O6	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:C	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:CA	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:CB	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:HA	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:HB2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:HB3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:HG	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:N	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:O	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:OG	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:C1	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:C2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:C3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:C4	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:C5	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:C6	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:H1	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:H2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:H3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:H4	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:H5	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:H6	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:O1	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:O2	11	0.91

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:O3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:O4	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:O5	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:O6	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:C	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:CA	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:CB	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:HA	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:HB2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:HB3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:HG	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:N	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:O	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:OG	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:C1	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:C2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:C3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:C4	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:C5	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:C6	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:H1	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:H2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:H3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:H4	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:H5	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:H6	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:O1	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:O2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:O3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:O4	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:O5	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:O6	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:C	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:CA	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:CB	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:HA	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:HB2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:HB3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:HG	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:N	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:O	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:OG	11	0.91

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:C1	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:C2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:C3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:C4	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:C5	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:C6	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:H1	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:H2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:H3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:H4	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:H5	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:H6	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:O1	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:O2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:O3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:O4	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:O5	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:O6	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:C	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:CA	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:CB	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:HA	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:HB2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:HB3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:HG	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:N	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:O	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:OG	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:C1	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:C2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:C3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:C4	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:C5	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:C6	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:H1	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:H2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:H3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:H4	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:H5	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:H6	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:O1	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:O2	11	0.91

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:O3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:O4	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:O5	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:O6	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:C	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:CA	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:CB	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:HA	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:HB2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:HB3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:HG	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:N	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:O	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:OG	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:C1	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:C2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:C3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:C4	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:C5	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:C6	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:H1	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:H2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:H3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:H4	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:H5	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:H6	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:O1	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:O2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:O3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:O4	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:O5	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:O6	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:C	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:CA	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:CB	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:HA	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:HB2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:HB3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:HG	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:N	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:O	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:OG	11	0.91

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:C1	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:C2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:C3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:C4	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:C5	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:C6	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:H1	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:H2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:H3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:H4	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:H5	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:H6	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:O1	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:O2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:O3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:O4	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:O5	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:O6	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:C	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:CA	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:CB	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:HA	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:HB2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:HB3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:HG	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:N	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:O	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:OG	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:C1	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:C2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:C3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:C4	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:C5	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:C6	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:H1	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:H2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:H3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:H4	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:H5	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:H6	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:O1	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:O2	11	0.91

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:O3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:O4	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:O5	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:O6	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:C	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:CA	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:CB	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:HA	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:HB2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:HB3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:HG	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:N	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:O	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:OG	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:C1	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:C2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:C3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:C4	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:C5	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:C6	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:H1	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:H2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:H3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:H4	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:H5	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:H6	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:O1	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:O2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:O3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:O4	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:O5	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:O6	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:C	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:CA	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:CB	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:HA	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:HB2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:HB3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:HG	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:N	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:O	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:OG	11	0.91

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:C1	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:C2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:C3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:C4	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:C5	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:C6	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:H1	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:H2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:H3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:H4	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:H5	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:H6	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:O1	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:O2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:O3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:O4	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:O5	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:O6	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:C	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:CA	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:CB	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:HA	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:HB2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:HB3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:HG	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:N	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:O	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:OG	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:C1	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:C2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:C3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:C4	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:C5	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:C6	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:H1	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:H2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:H3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:H4	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:H5	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:H6	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:O1	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:O2	11	0.91

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:O3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:O4	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:O5	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:O6	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:C	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:CA	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:CB	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:HA	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:HB2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:HB3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:HG	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:N	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:O	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:OG	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:C1	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:C2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:C3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:C4	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:C5	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:C6	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:H1	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:H2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:H3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:H4	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:H5	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:H6	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:O1	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:O2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:O3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:O4	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:O5	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:O6	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:C	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:CA	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:CB	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:HA	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:HB2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:HB3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:HG	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:N	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:O	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:OG	11	0.91

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:C1	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:C2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:C3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:C4	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:C5	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:C6	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:H1	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:H2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:H3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:H4	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:H5	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:H6	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:O1	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:O2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:O3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:O4	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:O5	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:O6	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:C	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:CA	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:CB	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:HA	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:HB2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:HB3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:HG	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:N	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:O	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:OG	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:C1	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:C2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:C3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:C4	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:C5	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:C6	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:H1	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:H2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:H3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:H4	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:H5	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:H6	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:O1	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:O2	11	0.91

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:O3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:O4	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:O5	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:O6	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:C	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:CA	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:CB	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:HA	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:HB2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:HB3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:HG	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:N	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:O	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:OG	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:C1	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:C2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:C3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:C4	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:C5	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:C6	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:H1	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:H2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:H3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:H4	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:H5	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:H6	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:O1	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:O2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:O3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:O4	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:O5	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:O6	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:C	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:CA	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:CB	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:HA	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:HB2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:HB3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:HG	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:N	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:O	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:OG	11	0.91

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:C1	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:C2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:C3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:C4	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:C5	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:C6	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:H1	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:H2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:H3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:H4	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:H5	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:H6	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:O1	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:O2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:O3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:O4	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:O5	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:O6	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:C	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:CA	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:CB	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:HA	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:HB2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:HB3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:HG	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:N	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:O	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:OG	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:C1	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:C2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:C3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:C4	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:C5	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:C6	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:H1	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:H2	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:H3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:H4	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:H5	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:H6	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:O1	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:O2	11	0.91

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:O3	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:O4	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:O5	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:O6	11	0.91
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:C	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:CA	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:CB	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:HA	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:HB2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:HB3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:HG	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:N	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:O	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:OG	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:C1	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:C2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:C3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:C4	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:C5	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:C6	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:H1	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:H2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:H3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:H4	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:H5	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:H6	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:O1	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:O2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:O3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:O4	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:O5	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:O6	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:C	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:CA	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:CB	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:HA	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:HB2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:HB3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:HG	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:N	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:O	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:OG	2	0.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:C1	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:C2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:C3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:C4	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:C5	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:C6	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:H1	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:H2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:H3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:H4	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:H5	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:H6	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:O1	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:O2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:O3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:O4	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:O5	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:O6	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:C	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:CA	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:CB	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:HA	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:HB2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:HB3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:HG	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:N	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:O	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:OG	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:C1	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:C2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:C3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:C4	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:C5	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:C6	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:H1	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:H2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:H3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:H4	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:H5	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:H6	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:O1	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:O2	2	0.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:O3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:O4	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:O5	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:O6	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:C	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:CA	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:CB	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:HA	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:HB2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:HB3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:HG	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:N	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:O	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:OG	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:C1	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:C2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:C3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:C4	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:C5	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:C6	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:H1	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:H2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:H3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:H4	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:H5	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:H6	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:O1	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:O2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:O3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:O4	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:O5	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:O6	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:C	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:CA	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:CB	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:HA	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:HB2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:HB3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:HG	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:N	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:O	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:OG	2	0.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:C1	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:C2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:C3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:C4	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:C5	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:C6	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:H1	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:H2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:H3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:H4	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:H5	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:H6	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:O1	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:O2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:O3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:O4	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:O5	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:O6	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:C	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:CA	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:CB	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:HA	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:HB2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:HB3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:HG	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:N	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:O	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:OG	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:C1	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:C2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:C3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:C4	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:C5	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:C6	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:H1	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:H2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:H3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:H4	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:H5	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:H6	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:O1	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:O2	2	0.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:O3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:O4	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:O5	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:O6	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:C	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:CA	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:CB	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:HA	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:HB2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:HB3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:HG	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:N	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:O	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:OG	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:C1	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:C2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:C3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:C4	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:C5	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:C6	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:H1	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:H2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:H3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:H4	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:H5	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:H6	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:O1	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:O2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:O3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:O4	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:O5	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:O6	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:C	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:CA	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:CB	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:HA	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:HB2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:HB3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:HG	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:N	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:O	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:OG	2	0.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:C1	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:C2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:C3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:C4	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:C5	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:C6	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:H1	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:H2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:H3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:H4	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:H5	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:H6	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:O1	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:O2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:O3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:O4	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:O5	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:O6	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:C	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:CA	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:CB	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:HA	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:HB2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:HB3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:HG	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:N	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:O	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:OG	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:C1	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:C2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:C3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:C4	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:C5	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:C6	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:H1	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:H2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:H3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:H4	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:H5	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:H6	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:O1	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:O2	2	0.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:O3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:O4	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:O5	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:O6	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:C	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:CA	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:CB	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:HA	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:HB2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:HB3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:HG	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:N	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:O	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:OG	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:C1	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:C2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:C3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:C4	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:C5	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:C6	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:H1	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:H2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:H3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:H4	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:H5	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:H6	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:O1	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:O2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:O3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:O4	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:O5	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:O6	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:C	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:CA	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:CB	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:HA	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:HB2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:HB3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:HG	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:N	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:O	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:OG	2	0.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:C1	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:C2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:C3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:C4	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:C5	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:C6	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:H1	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:H2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:H3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:H4	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:H5	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:H6	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:O1	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:O2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:O3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:O4	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:O5	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:O6	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:C	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:CA	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:CB	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:HA	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:HB2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:HB3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:HG	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:N	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:O	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:OG	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:C1	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:C2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:C3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:C4	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:C5	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:C6	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:H1	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:H2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:H3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:H4	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:H5	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:H6	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:O1	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:O2	2	0.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:O3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:O4	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:O5	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:O6	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:C	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:CA	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:CB	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:HA	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:HB2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:HB3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:HG	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:N	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:O	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:OG	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:C1	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:C2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:C3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:C4	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:C5	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:C6	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:H1	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:H2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:H3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:H4	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:H5	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:H6	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:O1	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:O2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:O3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:O4	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:O5	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:O6	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:C	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:CA	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:CB	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:HA	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:HB2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:HB3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:HG	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:N	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:O	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:OG	2	0.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:C1	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:C2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:C3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:C4	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:C5	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:C6	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:H1	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:H2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:H3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:H4	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:H5	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:H6	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:O1	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:O2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:O3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:O4	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:O5	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:O6	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:C	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:CA	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:CB	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:HA	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:HB2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:HB3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:HG	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:N	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:O	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:OG	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:C1	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:C2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:C3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:C4	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:C5	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:C6	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:H1	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:H2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:H3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:H4	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:H5	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:H6	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:O1	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:O2	2	0.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:O3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:O4	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:O5	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:O6	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:C	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:CA	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:CB	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:HA	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:HB2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:HB3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:HG	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:N	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:O	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:OG	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:C1	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:C2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:C3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:C4	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:C5	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:C6	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:H1	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:H2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:H3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:H4	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:H5	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:H6	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:O1	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:O2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:O3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:O4	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:O5	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:O6	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:C	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:CA	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:CB	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:HA	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:HB2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:HB3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:HG	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:N	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:O	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:OG	2	0.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:C1	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:C2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:C3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:C4	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:C5	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:C6	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:H1	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:H2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:H3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:H4	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:H5	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:H6	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:O1	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:O2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:O3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:O4	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:O5	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:O6	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:C	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:CA	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:CB	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:HA	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:HB2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:HB3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:HG	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:N	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:O	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:OG	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:C1	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:C2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:C3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:C4	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:C5	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:C6	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:H1	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:H2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:H3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:H4	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:H5	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:H6	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:O1	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:O2	2	0.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:O3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:O4	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:O5	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:O6	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:C	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:CA	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:CB	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:HA	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:HB2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:HB3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:HG	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:N	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:O	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:OG	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:C1	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:C2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:C3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:C4	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:C5	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:C6	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:H1	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:H2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:H3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:H4	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:H5	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:H6	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:O1	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:O2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:O3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:O4	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:O5	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:O6	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:C	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:CA	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:CB	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:HA	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:HB2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:HB3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:HG	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:N	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:O	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:OG	2	0.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:C1	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:C2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:C3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:C4	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:C5	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:C6	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:H1	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:H2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:H3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:H4	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:H5	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:H6	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:O1	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:O2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:O3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:O4	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:O5	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:O6	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:C	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:CA	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:CB	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:HA	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:HB2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:HB3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:HG	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:N	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:O	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:OG	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:C1	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:C2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:C3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:C4	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:C5	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:C6	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:H1	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:H2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:H3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:H4	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:H5	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:H6	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:O1	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:O2	2	0.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:O3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:O4	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:O5	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:O6	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:C	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:CA	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:CB	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:HA	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:HB2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:HB3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:HG	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:N	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:O	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:OG	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:C1	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:C2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:C3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:C4	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:C5	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:C6	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:H1	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:H2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:H3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:H4	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:H5	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:H6	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:O1	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:O2	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:O3	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:O4	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:O5	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:O6	2	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:C	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:CA	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:CB	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:HA	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:HB2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:HB3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:HG	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:N	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:O	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:OG	16	0.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:C1	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:C2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:C3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:C4	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:C5	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:C6	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:H1	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:H2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:H3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:H4	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:H5	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:H6	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:O1	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:O2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:O3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:O4	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:O5	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:O6	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:C	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:CA	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:CB	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:HA	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:HB2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:HB3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:HG	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:N	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:O	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:OG	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:C1	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:C2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:C3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:C4	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:C5	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:C6	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:H1	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:H2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:H3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:H4	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:H5	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:H6	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:O1	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:O2	16	0.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:O3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:O4	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:O5	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:O6	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:C	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:CA	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:CB	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:HA	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:HB2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:HB3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:HG	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:N	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:O	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:OG	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:C1	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:C2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:C3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:C4	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:C5	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:C6	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:H1	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:H2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:H3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:H4	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:H5	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:H6	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:O1	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:O2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:O3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:O4	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:O5	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:O6	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:C	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:CA	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:CB	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:HA	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:HB2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:HB3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:HG	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:N	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:O	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:OG	16	0.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:C1	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:C2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:C3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:C4	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:C5	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:C6	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:H1	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:H2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:H3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:H4	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:H5	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:H6	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:O1	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:O2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:O3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:O4	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:O5	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:O6	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:C	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:CA	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:CB	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:HA	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:HB2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:HB3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:HG	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:N	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:O	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:OG	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:C1	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:C2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:C3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:C4	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:C5	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:C6	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:H1	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:H2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:H3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:H4	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:H5	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:H6	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:O1	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:O2	16	0.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:O3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:O4	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:O5	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:O6	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:C	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:CA	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:CB	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:HA	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:HB2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:HB3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:HG	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:N	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:O	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:OG	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:C1	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:C2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:C3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:C4	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:C5	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:C6	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:H1	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:H2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:H3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:H4	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:H5	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:H6	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:O1	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:O2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:O3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:O4	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:O5	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:O6	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:C	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:CA	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:CB	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:HA	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:HB2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:HB3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:HG	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:N	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:O	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:OG	16	0.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:C1	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:C2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:C3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:C4	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:C5	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:C6	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:H1	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:H2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:H3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:H4	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:H5	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:H6	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:O1	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:O2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:O3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:O4	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:O5	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:O6	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:C	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:CA	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:CB	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:HA	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:HB2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:HB3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:HG	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:N	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:O	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:OG	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:C1	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:C2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:C3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:C4	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:C5	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:C6	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:H1	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:H2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:H3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:H4	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:H5	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:H6	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:O1	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:O2	16	0.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:O3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:O4	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:O5	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:O6	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:C	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:CA	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:CB	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:HA	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:HB2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:HB3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:HG	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:N	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:O	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:OG	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:C1	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:C2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:C3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:C4	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:C5	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:C6	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:H1	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:H2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:H3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:H4	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:H5	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:H6	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:O1	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:O2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:O3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:O4	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:O5	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:O6	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:C	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:CA	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:CB	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:HA	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:HB2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:HB3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:HG	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:N	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:O	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:OG	16	0.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:C1	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:C2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:C3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:C4	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:C5	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:C6	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:H1	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:H2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:H3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:H4	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:H5	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:H6	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:O1	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:O2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:O3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:O4	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:O5	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:O6	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:C	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:CA	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:CB	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:HA	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:HB2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:HB3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:HG	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:N	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:O	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:OG	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:C1	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:C2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:C3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:C4	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:C5	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:C6	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:H1	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:H2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:H3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:H4	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:H5	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:H6	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:O1	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:O2	16	0.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:O3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:O4	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:O5	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:O6	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:C	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:CA	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:CB	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:HA	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:HB2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:HB3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:HG	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:N	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:O	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:OG	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:C1	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:C2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:C3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:C4	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:C5	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:C6	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:H1	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:H2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:H3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:H4	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:H5	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:H6	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:O1	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:O2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:O3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:O4	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:O5	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:O6	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:C	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:CA	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:CB	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:HA	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:HB2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:HB3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:HG	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:N	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:O	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:OG	16	0.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:C1	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:C2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:C3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:C4	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:C5	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:C6	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:H1	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:H2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:H3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:H4	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:H5	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:H6	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:O1	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:O2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:O3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:O4	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:O5	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:O6	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:C	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:CA	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:CB	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:HA	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:HB2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:HB3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:HG	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:N	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:O	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:OG	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:C1	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:C2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:C3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:C4	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:C5	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:C6	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:H1	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:H2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:H3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:H4	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:H5	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:H6	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:O1	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:O2	16	0.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:O3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:O4	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:O5	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:O6	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:C	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:CA	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:CB	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:HA	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:HB2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:HB3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:HG	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:N	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:O	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:OG	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:C1	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:C2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:C3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:C4	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:C5	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:C6	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:H1	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:H2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:H3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:H4	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:H5	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:H6	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:O1	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:O2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:O3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:O4	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:O5	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:O6	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:C	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:CA	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:CB	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:HA	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:HB2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:HB3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:HG	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:N	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:O	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:OG	16	0.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:C1	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:C2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:C3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:C4	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:C5	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:C6	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:H1	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:H2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:H3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:H4	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:H5	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:H6	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:O1	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:O2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:O3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:O4	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:O5	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:O6	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:C	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:CA	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:CB	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:HA	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:HB2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:HB3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:HG	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:N	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:O	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:OG	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:C1	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:C2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:C3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:C4	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:C5	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:C6	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:H1	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:H2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:H3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:H4	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:H5	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:H6	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:O1	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:O2	16	0.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:O3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:O4	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:O5	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:O6	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:C	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:CA	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:CB	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:HA	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:HB2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:HB3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:HG	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:N	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:O	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:OG	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:C1	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:C2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:C3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:C4	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:C5	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:C6	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:H1	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:H2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:H3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:H4	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:H5	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:H6	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:O1	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:O2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:O3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:O4	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:O5	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:O6	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:C	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:CA	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:CB	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:HA	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:HB2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:HB3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:HG	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:N	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:O	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:OG	16	0.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:C1	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:C2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:C3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:C4	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:C5	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:C6	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:H1	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:H2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:H3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:H4	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:H5	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:H6	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:O1	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:O2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:O3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:O4	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:O5	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:O6	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:C	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:CA	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:CB	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:HA	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:HB2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:HB3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:HG	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:N	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:O	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:OG	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:C1	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:C2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:C3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:C4	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:C5	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:C6	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:H1	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:H2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:H3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:H4	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:H5	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:H6	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:O1	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:O2	16	0.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:O3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:O4	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:O5	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:O6	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:C	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:CA	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:CB	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:HA	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:HB2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:HB3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:HG	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:N	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:O	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:OG	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:C1	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:C2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:C3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:C4	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:C5	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:C6	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:H1	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:H2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:H3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:H4	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:H5	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:H6	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:O1	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:O2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:O3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:O4	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:O5	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:O6	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:C	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:CA	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:CB	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:HA	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:HB2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:HB3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:HG	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:N	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:O	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:OG	16	0.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:C1	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:C2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:C3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:C4	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:C5	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:C6	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:H1	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:H2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:H3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:H4	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:H5	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:H6	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:O1	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:O2	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:O3	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:O4	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:O5	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:O6	16	0.72
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:C	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:CA	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:CB	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:HA	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:HB2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:HB3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:HG	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:N	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:O	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:OG	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:C1	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:C2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:C3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:C4	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:C5	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:C6	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:H1	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:H2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:H3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:H4	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:H5	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:H6	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:O1	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:O2	13	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:O3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:O4	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:O5	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:O6	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:C	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:CA	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:CB	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:HA	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:HB2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:HB3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:HG	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:N	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:O	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:OG	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:C1	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:C2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:C3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:C4	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:C5	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:C6	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:H1	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:H2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:H3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:H4	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:H5	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:H6	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:O1	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:O2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:O3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:O4	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:O5	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:O6	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:C	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:CA	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:CB	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:HA	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:HB2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:HB3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:HG	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:N	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:O	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:OG	13	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:C1	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:C2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:C3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:C4	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:C5	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:C6	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:H1	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:H2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:H3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:H4	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:H5	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:H6	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:O1	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:O2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:O3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:O4	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:O5	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:O6	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:C	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:CA	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:CB	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:HA	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:HB2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:HB3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:HG	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:N	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:O	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:OG	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:C1	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:C2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:C3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:C4	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:C5	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:C6	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:H1	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:H2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:H3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:H4	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:H5	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:H6	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:O1	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:O2	13	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:O3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:O4	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:O5	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:O6	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:C	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:CA	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:CB	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:HA	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:HB2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:HB3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:HG	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:N	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:O	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:OG	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:C1	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:C2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:C3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:C4	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:C5	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:C6	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:H1	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:H2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:H3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:H4	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:H5	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:H6	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:O1	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:O2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:O3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:O4	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:O5	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:O6	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:C	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:CA	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:CB	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:HA	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:HB2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:HB3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:HG	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:N	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:O	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:OG	13	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:C1	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:C2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:C3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:C4	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:C5	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:C6	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:H1	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:H2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:H3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:H4	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:H5	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:H6	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:O1	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:O2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:O3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:O4	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:O5	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:O6	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:C	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:CA	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:CB	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:HA	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:HB2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:HB3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:HG	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:N	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:O	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:OG	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:C1	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:C2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:C3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:C4	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:C5	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:C6	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:H1	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:H2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:H3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:H4	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:H5	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:H6	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:O1	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:O2	13	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:O3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:O4	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:O5	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:O6	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:C	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:CA	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:CB	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:HA	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:HB2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:HB3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:HG	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:N	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:O	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:OG	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:C1	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:C2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:C3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:C4	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:C5	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:C6	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:H1	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:H2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:H3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:H4	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:H5	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:H6	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:O1	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:O2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:O3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:O4	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:O5	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:O6	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:C	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:CA	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:CB	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:HA	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:HB2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:HB3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:HG	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:N	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:O	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:OG	13	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:C1	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:C2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:C3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:C4	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:C5	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:C6	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:H1	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:H2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:H3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:H4	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:H5	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:H6	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:O1	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:O2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:O3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:O4	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:O5	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:O6	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:C	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:CA	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:CB	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:HA	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:HB2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:HB3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:HG	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:N	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:O	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:OG	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:C1	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:C2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:C3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:C4	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:C5	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:C6	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:H1	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:H2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:H3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:H4	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:H5	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:H6	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:O1	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:O2	13	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:O3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:O4	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:O5	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:O6	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:C	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:CA	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:CB	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:HA	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:HB2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:HB3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:HG	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:N	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:O	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:OG	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:C1	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:C2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:C3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:C4	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:C5	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:C6	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:H1	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:H2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:H3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:H4	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:H5	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:H6	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:O1	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:O2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:O3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:O4	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:O5	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:O6	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:C	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:CA	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:CB	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:HA	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:HB2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:HB3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:HG	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:N	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:O	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:OG	13	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:C1	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:C2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:C3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:C4	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:C5	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:C6	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:H1	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:H2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:H3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:H4	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:H5	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:H6	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:O1	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:O2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:O3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:O4	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:O5	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:O6	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:C	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:CA	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:CB	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:HA	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:HB2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:HB3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:HG	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:N	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:O	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:OG	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:C1	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:C2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:C3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:C4	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:C5	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:C6	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:H1	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:H2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:H3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:H4	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:H5	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:H6	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:O1	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:O2	13	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:O3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:O4	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:O5	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:O6	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:C	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:CA	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:CB	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:HA	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:HB2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:HB3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:HG	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:N	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:O	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:OG	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:C1	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:C2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:C3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:C4	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:C5	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:C6	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:H1	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:H2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:H3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:H4	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:H5	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:H6	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:O1	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:O2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:O3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:O4	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:O5	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:O6	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:C	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:CA	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:CB	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:HA	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:HB2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:HB3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:HG	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:N	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:O	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:OG	13	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:C1	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:C2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:C3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:C4	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:C5	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:C6	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:H1	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:H2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:H3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:H4	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:H5	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:H6	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:O1	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:O2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:O3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:O4	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:O5	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:O6	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:C	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:CA	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:CB	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:HA	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:HB2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:HB3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:HG	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:N	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:O	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:OG	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:C1	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:C2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:C3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:C4	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:C5	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:C6	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:H1	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:H2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:H3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:H4	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:H5	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:H6	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:O1	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:O2	13	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:O3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:O4	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:O5	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:O6	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:C	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:CA	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:CB	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:HA	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:HB2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:HB3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:HG	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:N	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:O	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:OG	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:C1	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:C2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:C3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:C4	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:C5	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:C6	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:H1	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:H2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:H3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:H4	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:H5	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:H6	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:O1	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:O2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:O3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:O4	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:O5	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:O6	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:C	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:CA	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:CB	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:HA	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:HB2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:HB3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:HG	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:N	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:O	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:OG	13	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:C1	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:C2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:C3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:C4	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:C5	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:C6	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:H1	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:H2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:H3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:H4	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:H5	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:H6	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:O1	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:O2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:O3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:O4	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:O5	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:O6	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:C	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:CA	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:CB	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:HA	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:HB2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:HB3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:HG	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:N	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:O	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:OG	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:C1	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:C2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:C3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:C4	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:C5	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:C6	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:H1	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:H2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:H3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:H4	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:H5	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:H6	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:O1	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:O2	13	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:O3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:O4	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:O5	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:O6	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:C	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:CA	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:CB	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:HA	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:HB2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:HB3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:HG	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:N	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:O	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:OG	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:C1	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:C2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:C3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:C4	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:C5	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:C6	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:H1	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:H2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:H3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:H4	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:H5	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:H6	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:O1	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:O2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:O3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:O4	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:O5	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:O6	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:C	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:CA	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:CB	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:HA	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:HB2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:HB3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:HG	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:N	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:O	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:OG	13	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:C1	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:C2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:C3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:C4	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:C5	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:C6	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:H1	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:H2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:H3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:H4	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:H5	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:H6	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:O1	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:O2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:O3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:O4	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:O5	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:O6	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:C	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:CA	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:CB	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:HA	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:HB2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:HB3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:HG	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:N	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:O	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:OG	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:C1	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:C2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:C3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:C4	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:C5	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:C6	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:H1	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:H2	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:H3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:H4	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:H5	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:H6	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:O1	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:O2	13	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:O3	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:O4	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:O5	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:O6	13	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:C	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:CA	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:CB	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:HA	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:HB2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:HB3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:HG	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:N	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:O	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:OG	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:C1	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:C2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:C3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:C4	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:C5	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:C6	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:H1	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:H2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:H3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:H4	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:H5	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:H6	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:O1	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:O2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:O3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:O4	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:O5	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:O6	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:C	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:CA	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:CB	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:HA	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:HB2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:HB3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:HG	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:N	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:O	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:OG	17	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:C1	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:C2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:C3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:C4	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:C5	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:C6	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:H1	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:H2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:H3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:H4	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:H5	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:H6	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:O1	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:O2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:O3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:O4	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:O5	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:O6	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:C	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:CA	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:CB	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:HA	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:HB2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:HB3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:HG	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:N	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:O	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:OG	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:C1	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:C2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:C3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:C4	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:C5	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:C6	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:H1	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:H2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:H3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:H4	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:H5	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:H6	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:O1	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:O2	17	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:O3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:O4	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:O5	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:O6	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:C	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:CA	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:CB	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:HA	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:HB2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:HB3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:HG	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:N	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:O	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:OG	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:C1	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:C2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:C3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:C4	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:C5	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:C6	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:H1	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:H2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:H3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:H4	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:H5	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:H6	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:O1	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:O2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:O3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:O4	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:O5	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:O6	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:C	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:CA	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:CB	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:HA	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:HB2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:HB3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:HG	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:N	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:O	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:OG	17	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:C1	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:C2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:C3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:C4	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:C5	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:C6	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:H1	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:H2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:H3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:H4	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:H5	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:H6	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:O1	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:O2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:O3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:O4	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:O5	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:O6	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:C	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:CA	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:CB	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:HA	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:HB2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:HB3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:HG	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:N	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:O	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:OG	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:C1	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:C2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:C3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:C4	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:C5	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:C6	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:H1	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:H2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:H3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:H4	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:H5	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:H6	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:O1	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:O2	17	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:O3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:O4	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:O5	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:O6	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:C	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:CA	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:CB	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:HA	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:HB2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:HB3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:HG	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:N	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:O	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:OG	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:C1	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:C2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:C3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:C4	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:C5	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:C6	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:H1	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:H2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:H3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:H4	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:H5	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:H6	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:O1	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:O2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:O3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:O4	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:O5	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:O6	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:C	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:CA	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:CB	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:HA	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:HB2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:HB3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:HG	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:N	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:O	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:OG	17	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:C1	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:C2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:C3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:C4	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:C5	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:C6	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:H1	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:H2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:H3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:H4	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:H5	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:H6	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:O1	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:O2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:O3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:O4	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:O5	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:O6	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:C	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:CA	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:CB	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:HA	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:HB2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:HB3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:HG	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:N	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:O	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:OG	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:C1	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:C2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:C3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:C4	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:C5	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:C6	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:H1	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:H2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:H3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:H4	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:H5	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:H6	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:O1	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:O2	17	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:O3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:O4	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:O5	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:O6	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:C	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:CA	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:CB	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:HA	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:HB2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:HB3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:HG	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:N	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:O	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:OG	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:C1	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:C2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:C3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:C4	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:C5	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:C6	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:H1	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:H2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:H3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:H4	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:H5	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:H6	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:O1	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:O2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:O3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:O4	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:O5	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:O6	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:C	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:CA	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:CB	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:HA	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:HB2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:HB3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:HG	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:N	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:O	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:OG	17	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:C1	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:C2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:C3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:C4	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:C5	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:C6	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:H1	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:H2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:H3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:H4	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:H5	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:H6	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:O1	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:O2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:O3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:O4	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:O5	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:O6	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:C	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:CA	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:CB	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:HA	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:HB2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:HB3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:HG	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:N	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:O	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:OG	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:C1	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:C2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:C3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:C4	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:C5	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:C6	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:H1	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:H2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:H3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:H4	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:H5	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:H6	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:O1	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:O2	17	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:O3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:O4	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:O5	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:O6	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:C	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:CA	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:CB	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:HA	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:HB2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:HB3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:HG	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:N	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:O	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:OG	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:C1	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:C2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:C3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:C4	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:C5	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:C6	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:H1	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:H2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:H3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:H4	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:H5	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:H6	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:O1	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:O2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:O3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:O4	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:O5	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:O6	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:C	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:CA	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:CB	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:HA	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:HB2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:HB3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:HG	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:N	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:O	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:OG	17	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:C1	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:C2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:C3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:C4	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:C5	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:C6	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:H1	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:H2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:H3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:H4	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:H5	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:H6	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:O1	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:O2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:O3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:O4	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:O5	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:O6	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:C	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:CA	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:CB	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:HA	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:HB2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:HB3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:HG	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:N	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:O	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:OG	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:C1	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:C2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:C3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:C4	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:C5	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:C6	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:H1	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:H2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:H3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:H4	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:H5	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:H6	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:O1	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:O2	17	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:O3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:O4	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:O5	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:O6	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:C	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:CA	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:CB	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:HA	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:HB2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:HB3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:HG	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:N	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:O	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:OG	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:C1	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:C2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:C3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:C4	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:C5	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:C6	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:H1	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:H2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:H3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:H4	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:H5	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:H6	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:O1	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:O2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:O3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:O4	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:O5	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:O6	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:C	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:CA	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:CB	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:HA	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:HB2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:HB3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:HG	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:N	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:O	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:OG	17	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:C1	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:C2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:C3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:C4	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:C5	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:C6	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:H1	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:H2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:H3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:H4	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:H5	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:H6	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:O1	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:O2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:O3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:O4	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:O5	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:O6	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:C	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:CA	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:CB	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:HA	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:HB2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:HB3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:HG	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:N	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:O	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:OG	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:C1	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:C2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:C3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:C4	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:C5	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:C6	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:H1	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:H2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:H3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:H4	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:H5	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:H6	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:O1	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:O2	17	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:O3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:O4	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:O5	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:O6	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:C	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:CA	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:CB	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:HA	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:HB2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:HB3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:HG	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:N	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:O	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:OG	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:C1	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:C2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:C3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:C4	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:C5	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:C6	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:H1	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:H2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:H3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:H4	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:H5	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:H6	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:O1	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:O2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:O3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:O4	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:O5	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:O6	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:C	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:CA	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:CB	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:HA	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:HB2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:HB3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:HG	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:N	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:O	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:OG	17	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:C1	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:C2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:C3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:C4	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:C5	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:C6	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:H1	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:H2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:H3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:H4	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:H5	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:H6	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:O1	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:O2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:O3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:O4	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:O5	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:O6	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:C	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:CA	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:CB	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:HA	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:HB2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:HB3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:HG	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:N	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:O	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:OG	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:C1	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:C2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:C3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:C4	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:C5	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:C6	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:H1	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:H2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:H3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:H4	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:H5	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:H6	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:O1	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:O2	17	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:O3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:O4	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:O5	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:O6	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:C	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:CA	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:CB	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:HA	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:HB2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:HB3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:HG	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:N	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:O	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:OG	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:C1	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:C2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:C3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:C4	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:C5	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:C6	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:H1	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:H2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:H3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:H4	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:H5	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:H6	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:O1	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:O2	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:O3	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:O4	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:O5	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:O6	17	0.68
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:C	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:CA	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:CB	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:HA	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:HB2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:HB3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:HG	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:N	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:O	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:OG	18	0.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:C1	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:C2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:C3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:C4	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:C5	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:C6	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:H1	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:H2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:H3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:H4	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:H5	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:H6	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:O1	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:O2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:O3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:O4	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:O5	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:O6	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:C	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:CA	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:CB	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:HA	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:HB2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:HB3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:HG	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:N	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:O	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:OG	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:C1	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:C2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:C3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:C4	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:C5	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:C6	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:H1	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:H2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:H3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:H4	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:H5	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:H6	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:O1	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:O2	18	0.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:O3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:O4	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:O5	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:O6	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:C	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:CA	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:CB	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:HA	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:HB2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:HB3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:HG	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:N	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:O	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:OG	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:C1	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:C2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:C3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:C4	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:C5	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:C6	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:H1	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:H2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:H3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:H4	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:H5	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:H6	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:O1	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:O2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:O3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:O4	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:O5	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:O6	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:C	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:CA	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:CB	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:HA	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:HB2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:HB3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:HG	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:N	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:O	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:OG	18	0.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:C1	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:C2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:C3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:C4	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:C5	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:C6	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:H1	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:H2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:H3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:H4	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:H5	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:H6	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:O1	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:O2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:O3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:O4	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:O5	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:O6	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:C	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:CA	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:CB	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:HA	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:HB2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:HB3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:HG	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:N	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:O	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:OG	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:C1	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:C2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:C3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:C4	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:C5	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:C6	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:H1	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:H2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:H3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:H4	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:H5	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:H6	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:O1	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:O2	18	0.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:O3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:O4	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:O5	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:O6	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:C	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:CA	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:CB	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:HA	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:HB2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:HB3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:HG	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:N	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:O	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:OG	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:C1	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:C2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:C3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:C4	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:C5	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:C6	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:H1	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:H2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:H3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:H4	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:H5	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:H6	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:O1	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:O2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:O3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:O4	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:O5	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:O6	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:C	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:CA	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:CB	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:HA	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:HB2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:HB3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:HG	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:N	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:O	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:OG	18	0.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:C1	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:C2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:C3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:C4	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:C5	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:C6	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:H1	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:H2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:H3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:H4	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:H5	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:H6	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:O1	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:O2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:O3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:O4	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:O5	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:O6	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:C	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:CA	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:CB	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:HA	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:HB2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:HB3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:HG	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:N	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:O	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:OG	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:C1	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:C2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:C3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:C4	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:C5	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:C6	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:H1	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:H2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:H3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:H4	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:H5	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:H6	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:O1	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:O2	18	0.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:O3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:O4	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:O5	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:O6	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:C	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:CA	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:CB	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:HA	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:HB2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:HB3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:HG	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:N	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:O	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:OG	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:C1	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:C2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:C3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:C4	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:C5	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:C6	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:H1	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:H2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:H3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:H4	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:H5	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:H6	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:O1	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:O2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:O3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:O4	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:O5	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:O6	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:C	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:CA	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:CB	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:HA	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:HB2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:HB3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:HG	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:N	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:O	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:OG	18	0.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:C1	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:C2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:C3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:C4	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:C5	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:C6	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:H1	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:H2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:H3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:H4	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:H5	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:H6	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:O1	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:O2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:O3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:O4	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:O5	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:O6	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:C	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:CA	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:CB	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:HA	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:HB2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:HB3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:HG	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:N	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:O	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:OG	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:C1	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:C2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:C3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:C4	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:C5	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:C6	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:H1	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:H2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:H3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:H4	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:H5	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:H6	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:O1	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:O2	18	0.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:O3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:O4	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:O5	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:O6	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:C	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:CA	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:CB	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:HA	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:HB2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:HB3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:HG	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:N	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:O	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:OG	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:C1	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:C2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:C3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:C4	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:C5	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:C6	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:H1	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:H2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:H3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:H4	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:H5	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:H6	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:O1	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:O2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:O3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:O4	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:O5	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:O6	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:C	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:CA	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:CB	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:HA	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:HB2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:HB3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:HG	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:N	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:O	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:OG	18	0.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:C1	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:C2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:C3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:C4	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:C5	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:C6	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:H1	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:H2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:H3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:H4	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:H5	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:H6	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:O1	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:O2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:O3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:O4	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:O5	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:O6	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:C	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:CA	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:CB	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:HA	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:HB2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:HB3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:HG	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:N	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:O	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:OG	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:C1	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:C2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:C3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:C4	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:C5	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:C6	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:H1	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:H2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:H3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:H4	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:H5	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:H6	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:O1	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:O2	18	0.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:O3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:O4	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:O5	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:O6	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:C	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:CA	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:CB	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:HA	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:HB2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:HB3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:HG	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:N	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:O	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:OG	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:C1	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:C2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:C3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:C4	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:C5	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:C6	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:H1	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:H2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:H3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:H4	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:H5	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:H6	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:O1	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:O2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:O3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:O4	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:O5	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:O6	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:C	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:CA	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:CB	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:HA	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:HB2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:HB3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:HG	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:N	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:O	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:OG	18	0.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:C1	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:C2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:C3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:C4	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:C5	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:C6	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:H1	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:H2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:H3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:H4	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:H5	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:H6	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:O1	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:O2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:O3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:O4	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:O5	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:O6	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:C	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:CA	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:CB	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:HA	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:HB2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:HB3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:HG	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:N	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:O	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:OG	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:C1	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:C2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:C3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:C4	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:C5	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:C6	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:H1	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:H2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:H3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:H4	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:H5	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:H6	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:O1	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:O2	18	0.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:O3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:O4	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:O5	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:O6	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:C	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:CA	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:CB	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:HA	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:HB2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:HB3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:HG	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:N	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:O	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:OG	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:C1	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:C2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:C3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:C4	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:C5	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:C6	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:H1	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:H2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:H3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:H4	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:H5	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:H6	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:O1	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:O2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:O3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:O4	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:O5	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:O6	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:C	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:CA	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:CB	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:HA	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:HB2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:HB3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:HG	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:N	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:O	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:OG	18	0.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:C1	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:C2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:C3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:C4	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:C5	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:C6	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:H1	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:H2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:H3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:H4	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:H5	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:H6	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:O1	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:O2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:O3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:O4	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:O5	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:O6	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:C	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:CA	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:CB	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:HA	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:HB2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:HB3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:HG	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:N	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:O	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:OG	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:C1	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:C2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:C3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:C4	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:C5	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:C6	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:H1	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:H2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:H3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:H4	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:H5	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:H6	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:O1	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:O2	18	0.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:O3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:O4	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:O5	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:O6	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:C	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:CA	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:CB	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:HA	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:HB2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:HB3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:HG	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:N	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:O	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:OG	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:C1	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:C2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:C3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:C4	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:C5	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:C6	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:H1	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:H2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:H3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:H4	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:H5	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:H6	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:O1	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:O2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:O3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:O4	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:O5	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:O6	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:C	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:CA	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:CB	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:HA	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:HB2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:HB3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:HG	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:N	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:O	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:OG	18	0.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:C1	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:C2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:C3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:C4	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:C5	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:C6	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:H1	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:H2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:H3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:H4	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:H5	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:H6	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:O1	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:O2	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:O3	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:O4	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:O5	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:O6	18	0.67
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:C	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:CA	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:CB	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:HA	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:HB2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:HB3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:HG	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:N	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:O	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:OG	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:C1	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:C2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:C3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:C4	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:C5	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:C6	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:H1	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:H2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:H3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:H4	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:H5	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:H6	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:O1	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:O2	4	0.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:O3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:O4	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:O5	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:C	2:A:101:I3P:O6	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:C	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:CA	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:CB	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:HA	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:HB2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:HB3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:HG	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:N	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:O	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	1:A:1:SER:OG	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:C1	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:C2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:C3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:C4	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:C5	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:C6	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:H1	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:H2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:H3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:H4	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:H5	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:H6	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:O1	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:O2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:O3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:O4	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:O5	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CA	2:A:101:I3P:O6	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:C	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:CA	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:CB	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:HA	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:HB2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:HB3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:HG	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:N	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:O	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	1:A:1:SER:OG	4	0.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:C1	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:C2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:C3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:C4	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:C5	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:C6	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:H1	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:H2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:H3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:H4	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:H5	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:H6	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:O1	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:O2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:O3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:O4	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:O5	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CB	2:A:101:I3P:O6	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:C	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:CA	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:CB	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:HA	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:HB2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:HB3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:HG	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:N	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:O	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	1:A:1:SER:OG	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:C1	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:C2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:C3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:C4	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:C5	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:C6	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:H1	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:H2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:H3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:H4	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:H5	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:H6	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:O1	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:O2	4	0.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:O3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:O4	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:O5	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CD	2:A:101:I3P:O6	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:C	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:CA	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:CB	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:HA	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:HB2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:HB3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:HG	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:N	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:O	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	1:A:1:SER:OG	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:C1	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:C2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:C3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:C4	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:C5	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:C6	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:H1	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:H2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:H3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:H4	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:H5	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:H6	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:O1	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:O2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:O3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:O4	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:O5	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CE	2:A:101:I3P:O6	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:C	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:CA	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:CB	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:HA	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:HB2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:HB3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:HG	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:N	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:O	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	1:A:1:SER:OG	4	0.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:C1	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:C2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:C3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:C4	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:C5	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:C6	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:H1	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:H2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:H3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:H4	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:H5	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:H6	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:O1	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:O2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:O3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:O4	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:O5	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:CG	2:A:101:I3P:O6	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:C	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:CA	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:CB	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:HA	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:HB2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:HB3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:HG	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:N	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:O	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:H	1:A:1:SER:OG	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:C1	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:C2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:C3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:C4	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:C5	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:C6	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:H1	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:H2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:H3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:H4	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:H5	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:H6	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:O1	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:O2	4	0.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:O3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:O4	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:O5	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:H	2:A:101:I3P:O6	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:C	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:CA	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:CB	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:HA	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:HB2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:HB3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:HG	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:N	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:O	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	1:A:1:SER:OG	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:C1	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:C2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:C3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:C4	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:C5	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:C6	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:H1	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:H2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:H3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:H4	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:H5	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:H6	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:O1	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:O2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:O3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:O4	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:O5	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HA	2:A:101:I3P:O6	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:C	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:CA	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:CB	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:HA	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:HB2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:HB3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:HG	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:N	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:O	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	1:A:1:SER:OG	4	0.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:C1	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:C2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:C3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:C4	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:C5	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:C6	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:H1	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:H2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:H3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:H4	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:H5	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:H6	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:O1	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:O2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:O3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:O4	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:O5	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HB2	2:A:101:I3P:O6	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:C	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:CA	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:CB	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:HA	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:HB2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:HB3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:HG	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:N	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:O	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	1:A:1:SER:OG	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:C1	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:C2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:C3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:C4	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:C5	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:C6	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:H1	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:H2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:H3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:H4	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:H5	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:H6	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:O1	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:O2	4	0.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:O3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:O4	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:O5	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HB3	2:A:101:I3P:O6	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:C	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:CA	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:CB	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:HA	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:HB2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:HB3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:HG	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:N	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:O	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	1:A:1:SER:OG	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:C1	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:C2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:C3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:C4	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:C5	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:C6	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:H1	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:H2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:H3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:H4	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:H5	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:H6	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:O1	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:O2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:O3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:O4	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:O5	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HD2	2:A:101:I3P:O6	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:C	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:CA	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:CB	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:HA	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:HB2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:HB3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:HG	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:N	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:O	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	1:A:1:SER:OG	4	0.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:C1	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:C2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:C3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:C4	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:C5	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:C6	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:H1	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:H2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:H3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:H4	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:H5	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:H6	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:O1	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:O2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:O3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:O4	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:O5	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HD3	2:A:101:I3P:O6	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:C	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:CA	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:CB	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:HA	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:HB2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:HB3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:HG	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:N	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:O	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	1:A:1:SER:OG	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:C1	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:C2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:C3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:C4	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:C5	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:C6	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:H1	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:H2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:H3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:H4	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:H5	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:H6	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:O1	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:O2	4	0.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:O3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:O4	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:O5	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HE2	2:A:101:I3P:O6	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:C	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:CA	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:CB	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:HA	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:HB2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:HB3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:HG	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:N	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:O	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	1:A:1:SER:OG	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:C1	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:C2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:C3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:C4	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:C5	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:C6	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:H1	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:H2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:H3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:H4	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:H5	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:H6	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:O1	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:O2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:O3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:O4	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:O5	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HE3	2:A:101:I3P:O6	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:C	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:CA	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:CB	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:HA	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:HB2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:HB3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:HG	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:N	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:O	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	1:A:1:SER:OG	4	0.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:C1	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:C2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:C3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:C4	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:C5	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:C6	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:H1	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:H2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:H3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:H4	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:H5	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:H6	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:O1	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:O2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:O3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:O4	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:O5	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HG2	2:A:101:I3P:O6	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:C	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:CA	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:CB	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:HA	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:HB2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:HB3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:HG	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:N	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:O	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	1:A:1:SER:OG	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:C1	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:C2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:C3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:C4	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:C5	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:C6	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:H1	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:H2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:H3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:H4	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:H5	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:H6	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:O1	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:O2	4	0.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:O3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:O4	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:O5	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HG3	2:A:101:I3P:O6	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:C	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:CA	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:CB	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:HA	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:HB2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:HB3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:HG	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:N	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:O	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	1:A:1:SER:OG	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:C1	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:C2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:C3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:C4	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:C5	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:C6	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:H1	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:H2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:H3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:H4	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:H5	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:H6	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:O1	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:O2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:O3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:O4	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:O5	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ1	2:A:101:I3P:O6	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:C	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:CA	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:CB	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:HA	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:HB2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:HB3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:HG	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:N	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:O	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	1:A:1:SER:OG	4	0.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:C1	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:C2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:C3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:C4	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:C5	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:C6	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:H1	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:H2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:H3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:H4	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:H5	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:H6	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:O1	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:O2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:O3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:O4	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:O5	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ2	2:A:101:I3P:O6	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:C	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:CA	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:CB	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:HA	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:HB2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:HB3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:HG	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:N	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:O	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	1:A:1:SER:OG	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:C1	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:C2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:C3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:C4	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:C5	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:C6	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:H1	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:H2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:H3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:H4	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:H5	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:H6	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:O1	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:O2	4	0.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:O3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:O4	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:O5	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:HZ3	2:A:101:I3P:O6	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:C	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:CA	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:CB	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:HA	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:HB2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:HB3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:HG	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:N	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:O	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:N	1:A:1:SER:OG	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:C1	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:C2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:C3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:C4	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:C5	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:C6	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:H1	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:H2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:H3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:H4	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:H5	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:H6	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:O1	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:O2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:O3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:O4	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:O5	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:N	2:A:101:I3P:O6	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:C	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:CA	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:CB	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:HA	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:HB2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:HB3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:HG	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:N	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:O	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	1:A:1:SER:OG	4	0.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:C1	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:C2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:C3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:C4	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:C5	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:C6	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:H1	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:H2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:H3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:H4	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:H5	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:H6	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:O1	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:O2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:O3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:O4	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:O5	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:NZ	2:A:101:I3P:O6	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:C	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:CA	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:CB	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:HA	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:HB2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:HB3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:HG	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:N	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:O	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:O	1:A:1:SER:OG	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:C1	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:C2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:C3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:C4	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:C5	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:C6	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:H1	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:H2	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:H3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:H4	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:H5	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:H6	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:O1	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:O2	4	0.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:O3	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:O4	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:O5	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:O	2:A:101:I3P:O6	4	0.66
(1,2)	1:A:13:LYS:C	1:A:1:SER:C	1	0.63

10 Dihedral-angle violation analysis

No dihedral-angle restraints found