



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Jun 5, 2023 – 05:42 AM EDT

PDB ID : 2LU2
BMRB ID : 18506
Title : MIC5 regulates the activity of Toxoplasma subtilisin 1 by mimicking a subtilisin prodomain
Authors : Saouros, S.; Dou, Z.; Henry, M.; Marchant, J.; Carruthers, V.B.; Matthews, S.
Deposited on : 2012-06-07

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

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

A user guide is available at

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

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The types of validation reports are described at

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

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

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

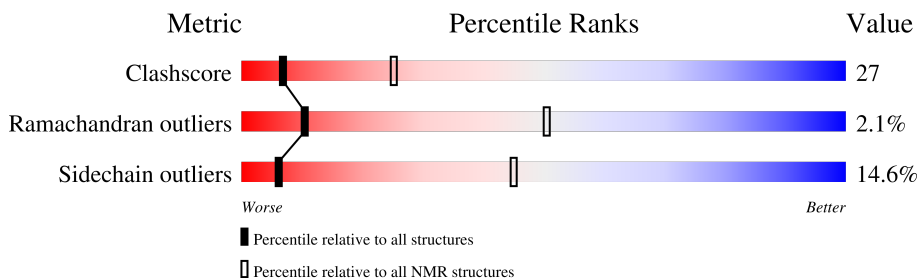
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment is 87%.

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	138	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 10 models. Model 4 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *lowest energy*.

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:59-A:136 (78)	0.30	4

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

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

The models can be grouped into 2 clusters and 1 single-model cluster was found.

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

3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 1246 atoms, of which 628 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Microneme TgMIC5 protein.

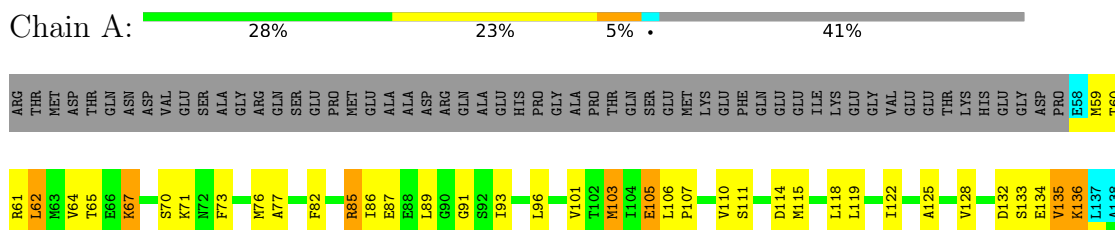
Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
			Total	C	H	N	O	S	
1	A	81	1246	384	628	101	128	5	0

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: Microneme TgMIC5 protein

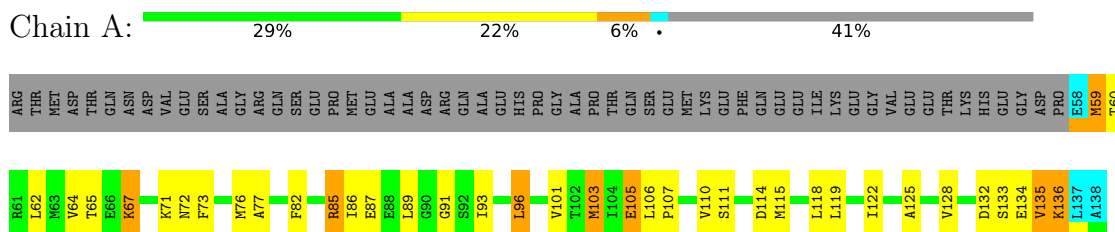


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

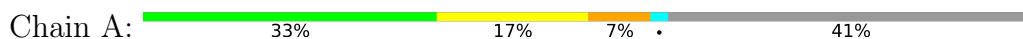
4.2.1 Score per residue for model 1

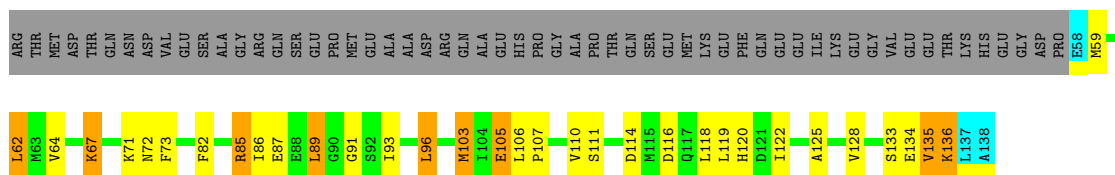
- Molecule 1: Microneme TgMIC5 protein



4.2.2 Score per residue for model 2

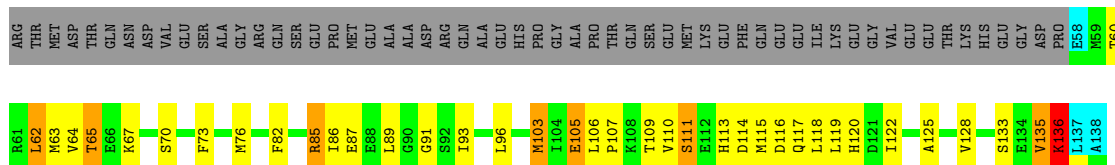
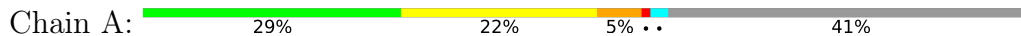
- Molecule 1: Microneme TgMIC5 protein





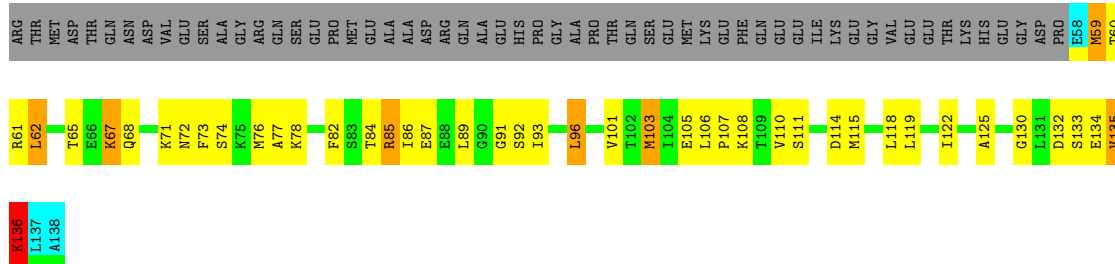
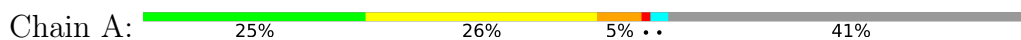
4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Microneume TgMIC5 protein



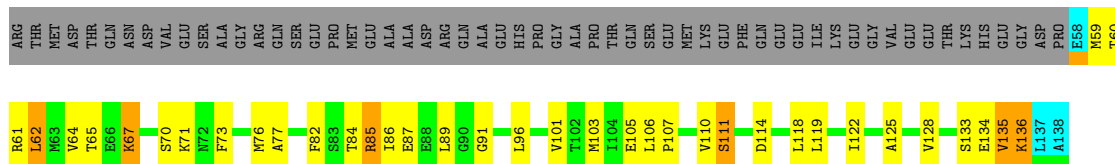
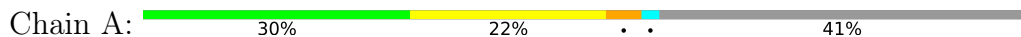
4.2.4 Score per residue for model 4 (medoid)

- Molecule 1: Microneume TgMIC5 protein



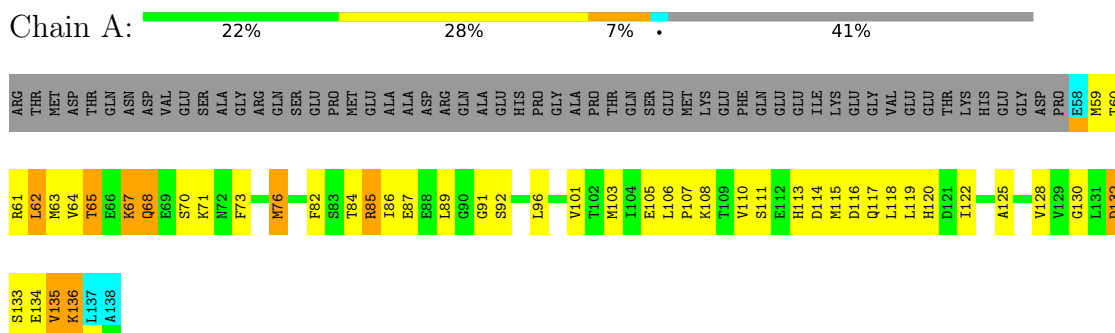
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Microneume TgMIC5 protein



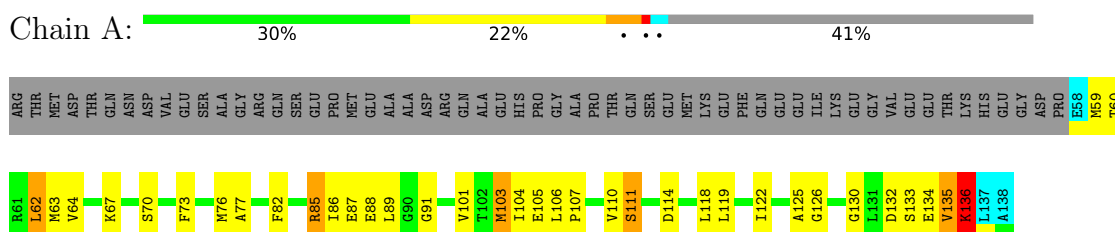
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Microneme TgMIC5 protein



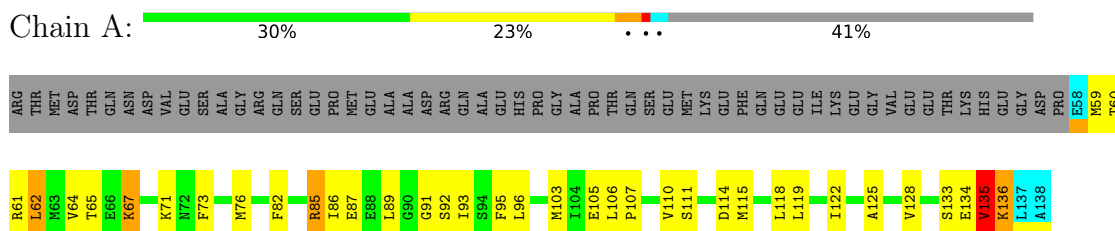
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Microneme TgMIC5 protein



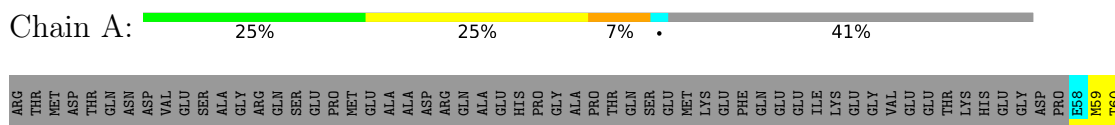
4.2.8 Score per residue for model 8

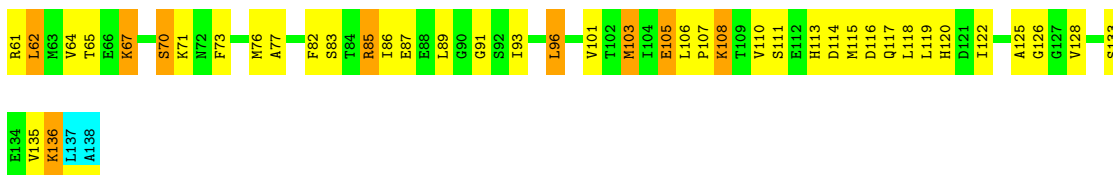
- Molecule 1: Microneme TgMIC5 protein



4.2.9 Score per residue for model 9

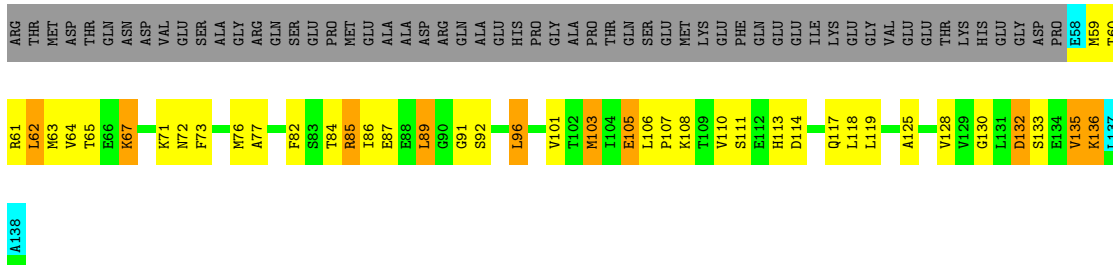
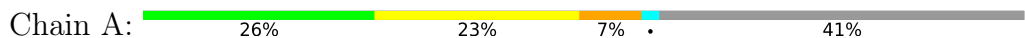
- Molecule 1: Microneme TgMIC5 protein





4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Microneme TgMIC5 protein



5 Refinement protocol and experimental data overview

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

Of the 100 calculated structures, 10 were deposited, based on the following criterion: *structures with the lowest energy*.

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

Software name	Classification	Version
ARIA	structure solution	
ARIA	refinement	
TALOS	geometry optimization	
CNS	structure solution	
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	940
Number of shifts mapped to atoms	940
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Assignment completeness (well-defined parts)	87%

6 Model quality i

6.1 Standard geometry i

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

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

6.2 Too-close contacts i

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	595	606	604	33±3
All	All	5950	6060	6040	328

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 27.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:61:ARG:HD3	1:A:103:MET:SD	0.79	2.18	6	3
1:A:85:ARG:NE	1:A:86:ILE:HG12	0.70	2.01	2	10
1:A:63:MET:HB3	1:A:132:ASP:OD2	0.69	1.86	6	1
1:A:76:MET:HG2	1:A:125:ALA:HB2	0.68	1.65	10	8
1:A:83:SER:O	1:A:87:GLU:HG3	0.66	1.91	9	1
1:A:114:ASP:O	1:A:118:LEU:HB2	0.65	1.90	3	10
1:A:60:THR:HG23	1:A:134:GLU:HA	0.63	1.70	8	5
1:A:87:GLU:HA	1:A:91:GLY:O	0.62	1.94	5	9
1:A:62:LEU:HD11	1:A:119:LEU:HD22	0.62	1.71	5	9
1:A:135:VAL:O	1:A:136:LYS:HD3	0.59	1.98	5	5
1:A:59:MET:SD	1:A:91:GLY:HA2	0.59	2.38	5	8
1:A:64:VAL:HA	1:A:128:VAL:O	0.58	1.98	9	5
1:A:107:PRO:O	1:A:110:VAL:HG13	0.58	1.98	3	10
1:A:86:ILE:CD1	1:A:106:LEU:HD12	0.58	2.28	6	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:86:ILE:HD12	1:A:106:LEU:HD12	0.58	1.74	7	10
1:A:62:LEU:HA	1:A:130:GLY:O	0.57	1.99	10	4
1:A:73:PHE:CE1	1:A:122:ILE:HG23	0.57	2.34	9	6
1:A:60:THR:HA	1:A:133:SER:O	0.57	2.00	5	3
1:A:93:ILE:HG21	1:A:95:PHE:CE2	0.56	2.36	8	1
1:A:106:LEU:HD13	1:A:119:LEU:HD21	0.56	1.78	10	6
1:A:59:MET:SD	1:A:105:GLU:HB3	0.56	2.41	5	7
1:A:85:ARG:HD3	1:A:86:ILE:H	0.55	1.62	1	10
1:A:91:GLY:HA3	1:A:105:GLU:O	0.55	2.02	7	10
1:A:60:THR:O	1:A:105:GLU:HA	0.54	2.01	7	4
1:A:67:LYS:O	1:A:71:LYS:HB2	0.54	2.03	5	2
1:A:107:PRO:HB2	1:A:109:THR:OG1	0.54	2.03	3	1
1:A:115:MET:O	1:A:119:LEU:HG	0.53	2.03	8	5
1:A:74:SER:O	1:A:78:LYS:HG3	0.53	2.04	4	1
1:A:114:ASP:OD2	1:A:118:LEU:HD12	0.53	2.04	10	1
1:A:73:PHE:CE2	1:A:122:ILE:HG23	0.53	2.39	6	3
1:A:60:THR:OG1	1:A:108:LYS:HE2	0.52	2.04	10	2
1:A:82:PHE:O	1:A:93:ILE:HD11	0.52	2.05	8	5
1:A:82:PHE:O	1:A:85:ARG:HD2	0.52	2.04	2	8
1:A:70:SER:HB3	1:A:126:GLY:O	0.51	2.05	7	2
1:A:116:ASP:O	1:A:120:HIS:HB2	0.51	2.05	2	4
1:A:60:THR:HG23	1:A:133:SER:O	0.51	2.05	10	2
1:A:65:THR:O	1:A:70:SER:HB2	0.50	2.06	5	3
1:A:62:LEU:HG	1:A:104:ILE:O	0.50	2.07	7	1
1:A:73:PHE:HA	1:A:125:ALA:HB1	0.50	1.82	10	7
1:A:87:GLU:HG2	1:A:92:SER:HA	0.50	1.83	4	4
1:A:135:VAL:C	1:A:136:LYS:HG3	0.50	2.26	4	1
1:A:60:THR:OG1	1:A:108:LYS:HE3	0.49	2.07	4	2
1:A:77:ALA:HA	1:A:82:PHE:CD2	0.49	2.42	9	6
1:A:96:LEU:HD22	1:A:96:LEU:N	0.49	2.23	9	5
1:A:67:LYS:O	1:A:71:LYS:N	0.49	2.45	5	7
1:A:101:VAL:HG12	1:A:103:MET:SD	0.49	2.48	4	4
1:A:113:HIS:O	1:A:117:GLN:HB3	0.49	2.06	10	1
1:A:110:VAL:HG23	1:A:111:SER:O	0.49	2.08	7	10
1:A:64:VAL:HG22	1:A:128:VAL:O	0.49	2.07	6	3
1:A:60:THR:HB	1:A:106:LEU:O	0.48	2.09	4	3
1:A:135:VAL:C	1:A:136:LYS:HD3	0.48	2.28	3	2
1:A:113:HIS:O	1:A:117:GLN:HB2	0.48	2.09	3	2
1:A:68:GLN:HE21	1:A:68:GLN:HA	0.48	1.68	6	1
1:A:106:LEU:HD13	1:A:119:LEU:CD2	0.48	2.39	2	2
1:A:89:LEU:HG	1:A:110:VAL:HB	0.47	1.86	2	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:64:VAL:O	1:A:101:VAL:HA	0.47	2.09	5	3
1:A:136:LYS:O	1:A:136:LYS:HE3	0.47	2.09	5	2
1:A:63:MET:HB3	1:A:132:ASP:OD1	0.47	2.09	7	2
1:A:107:PRO:HG2	1:A:110:VAL:HG13	0.46	1.87	3	2
1:A:85:ARG:CD	1:A:86:ILE:H	0.46	2.23	10	4
1:A:76:MET:SD	1:A:125:ALA:HB2	0.46	2.50	6	1
1:A:114:ASP:OD1	1:A:118:LEU:HD12	0.46	2.10	2	1
1:A:59:MET:HG3	1:A:105:GLU:HB3	0.45	1.88	4	1
1:A:119:LEU:O	1:A:122:ILE:HB	0.45	2.11	3	5
1:A:101:VAL:CG1	1:A:103:MET:SD	0.45	3.05	10	5
1:A:110:VAL:CG2	1:A:115:MET:HB2	0.45	2.42	3	4
1:A:64:VAL:HG11	1:A:73:PHE:CD2	0.45	2.46	5	2
1:A:72:ASN:HB2	1:A:125:ALA:O	0.44	2.12	4	2
1:A:85:ARG:NH2	1:A:93:ILE:HG13	0.44	2.27	9	1
1:A:72:ASN:HB3	1:A:125:ALA:O	0.44	2.12	2	1
1:A:87:GLU:HG2	1:A:92:SER:CB	0.44	2.42	8	1
1:A:86:ILE:HG22	1:A:91:GLY:CA	0.44	2.43	5	1
1:A:59:MET:O	1:A:105:GLU:HG2	0.44	2.13	2	1
1:A:96:LEU:HD23	1:A:103:MET:SD	0.43	2.53	3	4
1:A:73:PHE:CE1	1:A:122:ILE:HA	0.43	2.48	8	1
1:A:106:LEU:C	1:A:106:LEU:HD23	0.43	2.34	2	7
1:A:82:PHE:O	1:A:85:ARG:CD	0.43	2.65	2	5
1:A:107:PRO:HG2	1:A:110:VAL:CG1	0.43	2.44	2	1
1:A:59:MET:CG	1:A:105:GLU:HB3	0.43	2.43	4	1
1:A:67:LYS:N	1:A:67:LYS:HD3	0.43	2.29	4	1
1:A:86:ILE:HD12	1:A:114:ASP:OD2	0.42	2.13	2	1
1:A:68:GLN:NE2	1:A:68:GLN:H	0.42	2.12	4	1
1:A:113:HIS:HA	1:A:117:GLN:OE1	0.42	2.15	9	1
1:A:85:ARG:HG3	1:A:118:LEU:HD22	0.41	1.92	8	1
1:A:61:ARG:CB	1:A:105:GLU:HG3	0.41	2.46	8	1
1:A:82:PHE:HA	1:A:85:ARG:HD2	0.41	1.92	1	2
1:A:106:LEU:HD23	1:A:106:LEU:C	0.40	2.36	8	1
1:A:82:PHE:CE1	1:A:85:ARG:HG3	0.40	2.51	10	1
1:A:59:MET:HB2	1:A:105:GLU:HB3	0.40	1.92	8	1
1:A:86:ILE:HD12	1:A:114:ASP:OD1	0.40	2.15	10	1
1:A:134:GLU:O	1:A:135:VAL:C	0.40	2.59	2	1
1:A:73:PHE:HE1	1:A:122:ILE:HA	0.40	1.76	8	1

6.3 Torsion angles [i](#)

6.3.1 Protein backbone [i](#)

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	78/138 (57%)	70±1 (90±2%)	6±1 (8±2%)	2±0 (2±1%)	10	50
All	All	780/1380 (57%)	704 (90%)	60 (8%)	16 (2%)	10	50

All 3 unique Ramachandran outliers are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	135	VAL	10
1	A	136	LYS	5
1	A	59	MET	1

6.3.2 Protein sidechains [i](#)

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles	
1	A	69/119 (58%)	59±2 (85±2%)	10±2 (15±2%)	6	45
All	All	690/1190 (58%)	589 (85%)	101 (15%)	6	45

All 23 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	62	LEU	10
1	A	67	LYS	10
1	A	85	ARG	10
1	A	89	LEU	10
1	A	96	LEU	8
1	A	136	LYS	8
1	A	65	THR	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	103	MET	7
1	A	105	GLU	5
1	A	132	ASP	4
1	A	84	THR	4
1	A	111	SER	3
1	A	61	ARG	3
1	A	135	VAL	3
1	A	72	ASN	1
1	A	63	MET	1
1	A	59	MET	1
1	A	134	GLU	1
1	A	68	GLN	1
1	A	76	MET	1
1	A	88	GLU	1
1	A	70	SER	1
1	A	108	LYS	1

6.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

6.4 Non-standard residues in protein, DNA, RNA chains [i](#)

There are no non-standard protein/DNA/RNA residues in this entry.

6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no monosaccharides in this entry.

6.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues

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 87% for the well-defined parts and 88% for the entire structure.

7.1 Chemical shift list 1

File name: working_cs.cif

Chemical shift list name: *assigned_chem_shift_list_1*

7.1.1 Bookkeeping i

The following table shows the results of parsing the chemical shift list and reports the number of nuclei with statistically unusual chemical shifts.

Total number of shifts	940
Number of shifts mapped to atoms	940
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
$^{13}\text{C}_\alpha$	80	-0.41 ± 0.07	None needed (< 0.5 ppm)
$^{13}\text{C}_\beta$	74	0.15 ± 0.08	None needed (< 0.5 ppm)
$^{13}\text{C}'$	72	-0.00 ± 0.17	None needed (< 0.5 ppm)
^{15}N	77	-0.78 ± 0.41	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 87%, i.e. 902 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1034. 0 out of 14 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	^1H	^{13}C	^{15}N
Backbone	376/394 (95%)	156/161 (97%)	146/156 (94%)	74/77 (96%)
Sidechain	492/594 (83%)	328/388 (85%)	164/190 (86%)	0/16 (0%)

Continued on next page...

Continued from previous page...

	Total	¹ H	¹³ C	¹⁵ N
Aromatic	34/46 (74%)	17/23 (74%)	17/19 (89%)	0/4 (0%)
Overall	902/1034 (87%)	501/572 (88%)	327/365 (90%)	74/97 (76%)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 88%, i.e. 940 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1073. 0 out of 15 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	¹ H	¹³ C	¹⁵ N
Backbone	391/409 (96%)	162/167 (97%)	152/162 (94%)	77/80 (96%)
Sidechain	515/618 (83%)	344/404 (85%)	171/198 (86%)	0/16 (0%)
Aromatic	34/46 (74%)	17/23 (74%)	17/19 (89%)	0/4 (0%)
Overall	940/1073 (88%)	523/594 (88%)	340/379 (90%)	77/100 (77%)

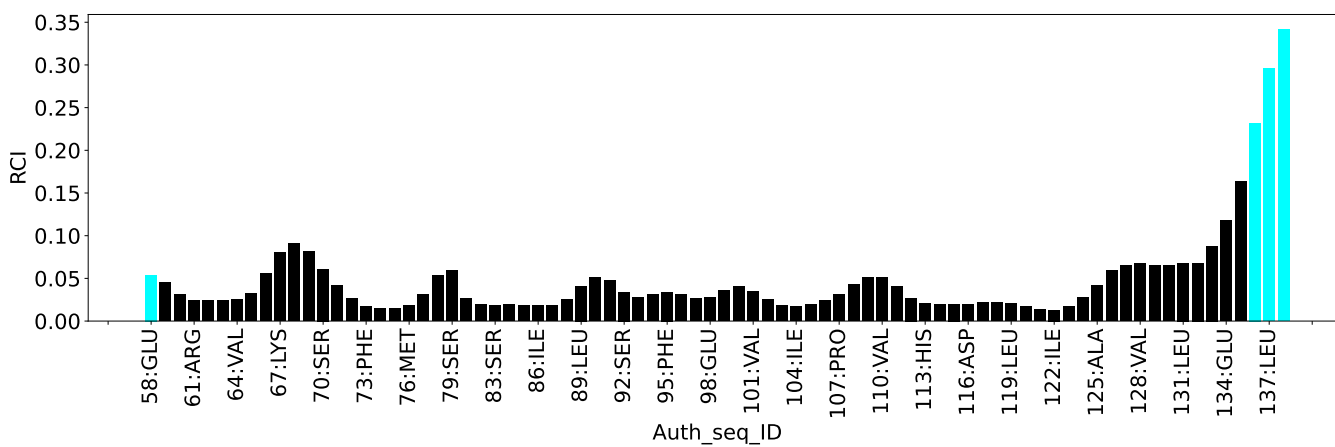
7.1.4 Statistically unusual chemical shifts [i](#)

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	2018
Intra-residue ($ i-j =0$)	617
Sequential ($ i-j =1$)	395
Medium range ($ i-j >1$ and $ i-j <5$)	359
Long range ($ i-j \geq 5$)	647
Inter-chain	0
Hydrogen bond restraints	0
Disulfide bond restraints	0
Total dihedral-angle restraints	144
Number of unmapped restraints	0
Number of restraints per residue	15.7
Number of long range restraints per residue ¹	4.7

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)	52.6	0.2
0.2-0.5 (Medium)	53.7	0.5
>0.5 (Large)	61.0	2.37

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

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

Bins (°)	Average number of violations per model	Max (°)
1.0-10.0 (Small)	8.7	6.3
10.0-20.0 (Medium)	None	None
>20.0 (Large)	None	None

9 Distance violation analysis

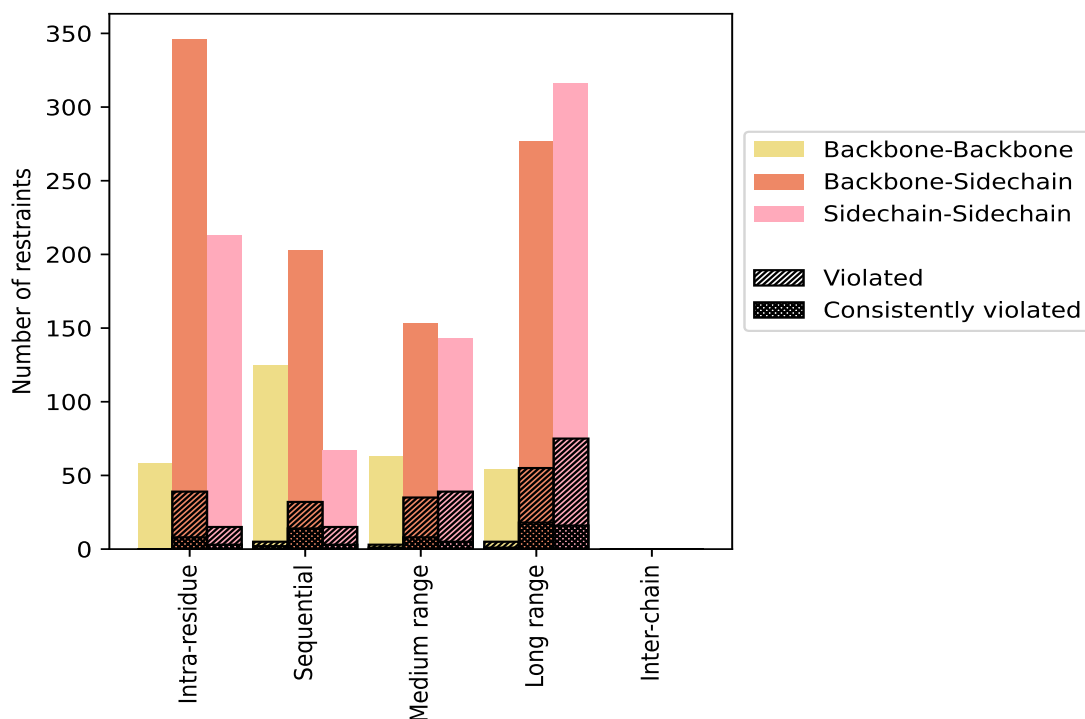
9.1 Summary of distance violations

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 ($i-j =0$)	617	30.6	54	8.8	2.7	11	1.8	0.5
Backbone-Backbone	58	2.9	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	346	17.1	39	11.3	1.9	8	2.3	0.4
Sidechain-Sidechain	213	10.6	15	7.0	0.7	3	1.4	0.1
Sequential ($i-j =1$)	395	19.6	52	13.2	2.6	19	4.8	0.9
Backbone-Backbone	125	6.2	5	4.0	0.2	2	1.6	0.1
Backbone-Sidechain	203	10.1	32	15.8	1.6	14	6.9	0.7
Sidechain-Sidechain	67	3.3	15	22.4	0.7	3	4.5	0.1
Medium range ($i-j >1$ & $i-j <5$)	359	17.8	77	21.4	3.8	14	3.9	0.7
Backbone-Backbone	63	3.1	3	4.8	0.1	1	1.6	0.0
Backbone-Sidechain	153	7.6	35	22.9	1.7	8	5.2	0.4
Sidechain-Sidechain	143	7.1	39	27.3	1.9	5	3.5	0.2
Long range ($i-j \geq 5$)	647	32.1	135	20.9	6.7	35	5.4	1.7
Backbone-Backbone	54	2.7	5	9.3	0.2	1	1.9	0.0
Backbone-Sidechain	277	13.7	55	19.9	2.7	18	6.5	0.9
Sidechain-Sidechain	316	15.7	75	23.7	3.7	16	5.1	0.8
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	2018	100.0	318	15.8	15.8	79	3.9	3.9
Backbone-Backbone	300	14.9	13	4.3	0.6	4	1.3	0.2
Backbone-Sidechain	979	48.5	161	16.4	8.0	48	4.9	2.4
Sidechain-Sidechain	739	36.6	144	19.5	7.1	27	3.7	1.3

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](#)

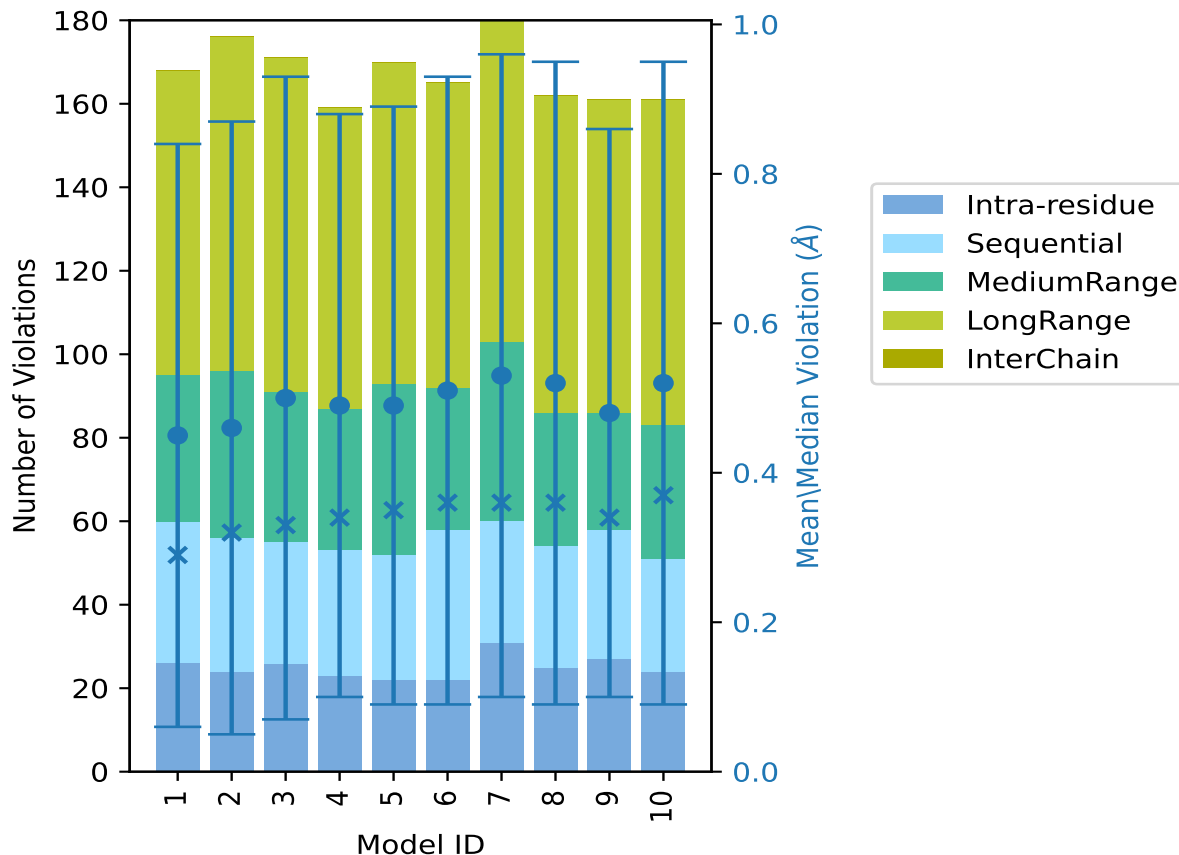
The following table provides the distance violation statistics for each model in the ensemble. Violations less than 0.1 Å are not included in the statistics.

Model ID	Number of violations					Total	Mean (Å)	Max (Å)	SD ⁶ (Å)	Median (Å)
	IR ¹	SQ ²	MR ³	LR ⁴	IC ⁵					
1	26	34	35	73	0	168	0.45	1.73	0.39	0.29
2	24	32	40	80	0	176	0.46	1.97	0.41	0.32
3	26	29	36	80	0	171	0.5	1.9	0.43	0.33
4	23	30	34	72	0	159	0.49	1.72	0.39	0.34
5	22	30	41	77	0	170	0.49	1.73	0.4	0.35
6	22	36	34	73	0	165	0.51	1.77	0.42	0.36
7	31	29	43	77	0	180	0.53	1.83	0.43	0.36
8	25	29	32	76	0	162	0.52	1.77	0.43	0.36
9	27	31	28	75	0	161	0.48	1.76	0.38	0.34
10	24	27	32	78	0	161	0.52	2.37	0.43	0.37

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

⁵Inter-chain restraints, ⁶Standard deviation

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



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

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

Violation analysis may find that some restraints are violated in few models and some are violated in most of models. The following table provides this information as number of violated restraints for a given fraction of the ensemble. In total, 1700(IR:563, SQ:343, MR:282, LR:512, 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	%
17	14	20	29	0	80	1	10.0
4	2	16	11	0	33	2	20.0
7	2	5	11	0	25	3	30.0
3	4	3	11	0	21	4	40.0

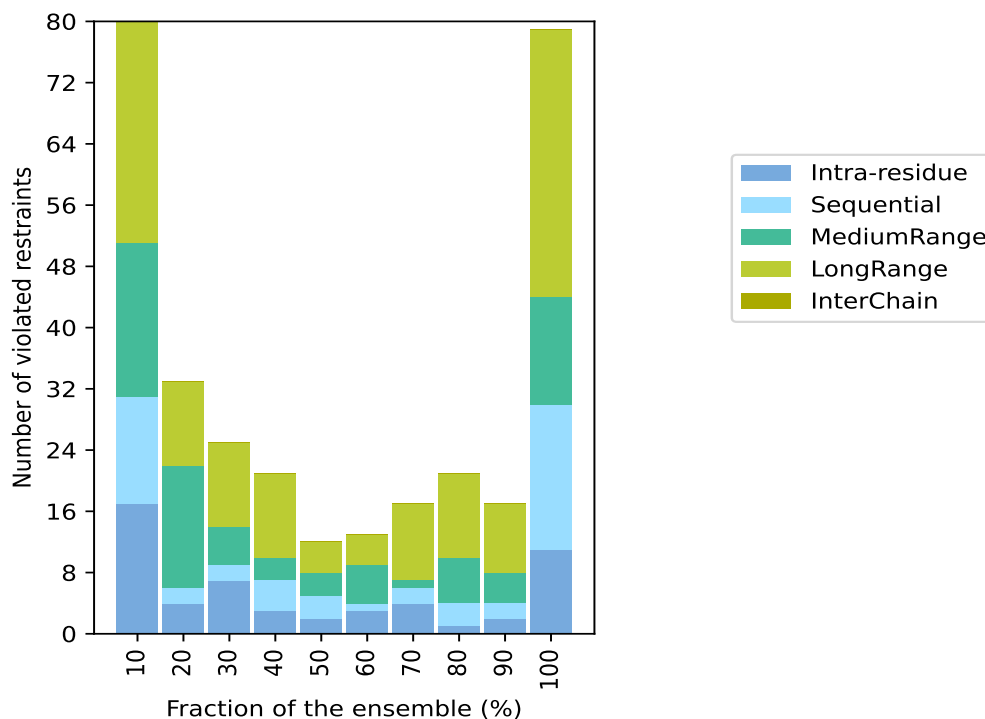
Continued on next page...

Continued from previous page...

Number of violated restraints						Fraction of the ensemble	
IR ¹	SQ ²	MR ³	LR ⁴	IC ⁵	Total	Count ⁶	%
2	3	3	4	0	12	5	50.0
3	1	5	4	0	13	6	60.0
4	2	1	10	0	17	7	70.0
1	3	6	11	0	21	8	80.0
2	2	4	9	0	17	9	90.0
11	19	14	35	0	79	10	100.0

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

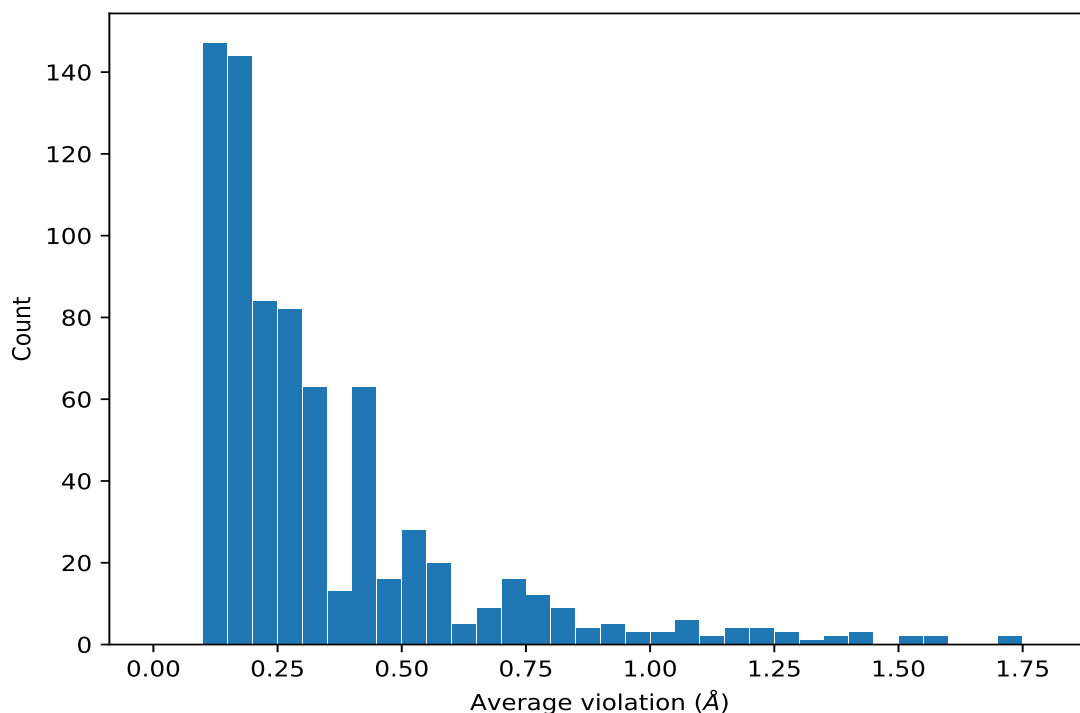
9.3.1 Bar graph : Distance violation statistics for the ensemble [i](#)



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

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

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



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

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

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(2,846)	1:A:85:ARG:H	1:A:86:ILE:HG13	10	1.72	0.02	1.71
(2,709)	1:A:119:LEU:HB3	1:A:116:ASP:HA	10	1.71	0.07	1.73
(2,143)	1:A:93:ILE:HG13	1:A:82:PHE:HB2	10	1.58	0.05	1.59
(2,403)	1:A:84:THR:HA	1:A:87:GLU:HB3	10	1.58	0.07	1.6
(2,1842)	1:A:85:ARG:H	1:A:87:GLU:HB3	10	1.5	0.1	1.52
(2,1842)	1:A:85:ARG:H	1:A:88:GLU:HB3	10	1.5	0.1	1.52
(1,15)	1:A:136:LYS:HD3	1:A:107:PRO:HB2	10	1.43	0.22	1.41
(1,7)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:59:MET:HG3	10	1.31	0.14	1.28
(2,88)	1:A:63:MET:HB2	1:A:132:ASP:HB2	10	1.25	0.33	1.27
(2,86)	1:A:63:MET:HB2	1:A:132:ASP:HB3	10	1.23	0.26	1.28
(2,660)	1:A:91:GLY:HA2	1:A:86:ILE:HD12	10	1.22	0.06	1.22
(2,660)	1:A:91:GLY:HA2	1:A:86:ILE:HD11	10	1.22	0.06	1.22
(2,660)	1:A:91:GLY:HA2	1:A:86:ILE:HD13	10	1.22	0.06	1.22
(2,1530)	1:A:129:VAL:HA	1:A:119:LEU:HB2	10	1.18	0.09	1.2
(2,1530)	1:A:129:VAL:HA	1:A:61:ARG:HG2	10	1.18	0.09	1.2
(2,134)	1:A:120:HIS:HB3	1:A:119:LEU:HB3	10	1.14	0.06	1.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,4)	1:A:58:GLU:HG2	1:A:91:GLY:HA3	10	1.13	0.63	0.75
(2,1579)	1:A:104:ILE:HA	1:A:105:GLU:HG2	10	1.07	0.1	1.06
(2,1579)	1:A:65:THR:HA	1:A:69:GLU:HB3	10	1.07	0.1	1.06
(1,29)	1:A:82:PHE:HA	1:A:86:ILE:HG13	10	1.05	0.06	1.04
(2,1296)	1:A:85:ARG:H	1:A:86:ILE:HG13	10	1.02	0.04	1.01
(2,1296)	1:A:86:ILE:HG13	1:A:82:PHE:HD1	10	1.02	0.04	1.01
(2,1296)	1:A:86:ILE:HG13	1:A:82:PHE:HD2	10	1.02	0.04	1.01
(2,59)	1:A:105:GLU:HG3	1:A:59:MET:HG3	10	0.94	0.21	1.02
(2,679)	1:A:89:LEU:HB3	1:A:114:ASP:HB2	10	0.9	0.15	0.96
(2,586)	1:A:71:LYS:HA	1:A:66:GLU:HB2	10	0.88	0.14	0.88
(2,623)	1:A:59:MET:HA	1:A:107:PRO:HB2	10	0.88	0.08	0.87
(2,1071)	1:A:86:ILE:H	1:A:86:ILE:HG13	10	0.81	0.03	0.82
(2,867)	1:A:87:GLU:H	1:A:86:ILE:HG13	10	0.81	0.05	0.82
(2,612)	1:A:77:ALA:HA	1:A:76:MET:HB2	10	0.81	0.03	0.81
(2,1376)	1:A:129:VAL:HG12	1:A:63:MET:HG2	10	0.81	0.06	0.8
(2,1376)	1:A:129:VAL:HG11	1:A:63:MET:HG2	10	0.81	0.06	0.8
(2,1376)	1:A:129:VAL:HG13	1:A:63:MET:HG2	10	0.81	0.06	0.8
(2,1376)	1:A:129:VAL:HG12	1:A:127:GLY:HA2	10	0.81	0.06	0.8
(2,1376)	1:A:129:VAL:HG11	1:A:127:GLY:HA2	10	0.81	0.06	0.8
(2,1376)	1:A:129:VAL:HG13	1:A:127:GLY:HA2	10	0.81	0.06	0.8
(2,1624)	1:A:76:MET:HG3	1:A:118:LEU:HA	10	0.77	0.21	0.86
(2,1624)	1:A:118:LEU:HA	1:A:114:ASP:HB2	10	0.77	0.21	0.86
(2,1712)	1:A:91:GLY:HA2	1:A:86:ILE:HB	10	0.77	0.06	0.78
(2,1712)	1:A:91:GLY:HA2	1:A:105:GLU:HG3	10	0.77	0.06	0.78
(2,1554)	1:A:86:ILE:HA	1:A:87:GLU:HB3	10	0.76	0.11	0.76
(2,1554)	1:A:86:ILE:HA	1:A:88:GLU:HB3	10	0.76	0.11	0.76
(2,65)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:107:PRO:HD2	10	0.75	0.01	0.75
(1,60)	1:A:119:LEU:H	1:A:114:ASP:HB2	10	0.75	0.21	0.84
(2,1301)	1:A:106:LEU:HG	1:A:91:GLY:HA2	10	0.73	0.05	0.72
(2,1301)	1:A:118:LEU:HG	1:A:117:GLN:HA	10	0.73	0.05	0.72
(2,129)	1:A:120:HIS:HB2	1:A:117:GLN:HB2	10	0.72	0.12	0.7
(2,129)	1:A:120:HIS:HB2	1:A:117:GLN:HB3	10	0.72	0.12	0.7
(1,45)	1:A:125:ALA:HA	1:A:127:GLY:HA2	10	0.66	0.04	0.66
(2,237)	1:A:110:VAL:HG12	1:A:107:PRO:HD3	10	0.65	0.05	0.66
(2,237)	1:A:110:VAL:HG11	1:A:107:PRO:HD3	10	0.65	0.05	0.66
(2,237)	1:A:110:VAL:HG13	1:A:107:PRO:HD3	10	0.65	0.05	0.66
(2,1226)	1:A:66:GLU:HB2	1:A:73:PHE:HB3	10	0.65	0.13	0.62
(2,1226)	1:A:66:GLU:HB2	1:A:75:LYS:H	10	0.65	0.13	0.62
(2,1226)	1:A:71:LYS:HB3	1:A:72:ASN:HB2	10	0.65	0.13	0.62
(2,1226)	1:A:71:LYS:HB3	1:A:72:ASN:HB3	10	0.65	0.13	0.62
(1,8)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:90:GLY:HA2	10	0.6	0.16	0.62
(2,1532)	1:A:88:GLU:HB3	1:A:81:SER:HA	10	0.58	0.27	0.61

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(2,1532)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:83:SER:HA	10	0.58	0.27	0.61
(2,1866)	1:A:88:GLU:H	1:A:87:GLU:HB3	10	0.57	0.06	0.58
(2,1866)	1:A:88:GLU:H	1:A:88:GLU:HB3	10	0.57	0.06	0.58
(2,1298)	1:A:86:ILE:HG13	1:A:85:ARG:HA	10	0.56	0.02	0.55
(2,1298)	1:A:86:ILE:HG13	1:A:84:THR:HA	10	0.56	0.02	0.55
(2,360)	1:A:122:ILE:HG22	1:A:127:GLY:HA2	10	0.55	0.1	0.52
(2,360)	1:A:122:ILE:HG21	1:A:127:GLY:HA2	10	0.55	0.1	0.52
(2,360)	1:A:122:ILE:HG23	1:A:127:GLY:HA2	10	0.55	0.1	0.52
(2,62)	1:A:107:PRO:HB3	1:A:109:THR:HG21	10	0.54	0.2	0.54
(2,62)	1:A:107:PRO:HB3	1:A:109:THR:HG22	10	0.54	0.2	0.54
(2,62)	1:A:107:PRO:HB3	1:A:109:THR:HG23	10	0.54	0.2	0.54
(2,560)	1:A:70:SER:HB2	1:A:70:SER:HA	10	0.53	0.13	0.6
(2,1653)	1:A:66:GLU:HA	1:A:74:SER:HA	10	0.53	0.12	0.5
(2,1653)	1:A:66:GLU:HA	1:A:100:GLY:HA2	10	0.53	0.12	0.5
(2,1208)	1:A:66:GLU:HB3	1:A:100:GLY:HA2	10	0.53	0.15	0.52
(2,1208)	1:A:66:GLU:HB3	1:A:74:SER:HA	10	0.53	0.15	0.52
(2,1435)	1:A:104:ILE:HG22	1:A:60:THR:HA	10	0.5	0.04	0.5
(2,1435)	1:A:104:ILE:HG21	1:A:60:THR:HA	10	0.5	0.04	0.5
(2,1435)	1:A:104:ILE:HG23	1:A:60:THR:HA	10	0.5	0.04	0.5
(2,1435)	1:A:104:ILE:HG22	1:A:91:GLY:HA2	10	0.5	0.04	0.5
(2,1435)	1:A:104:ILE:HG21	1:A:91:GLY:HA2	10	0.5	0.04	0.5
(2,1435)	1:A:104:ILE:HG23	1:A:91:GLY:HA2	10	0.5	0.04	0.5
(2,1245)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG22	10	0.5	0.03	0.48
(2,1245)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG21	10	0.5	0.03	0.48
(2,1245)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG23	10	0.5	0.03	0.48
(2,1245)	1:A:88:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG22	10	0.5	0.03	0.48
(2,1245)	1:A:88:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG21	10	0.5	0.03	0.48
(2,1245)	1:A:88:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG23	10	0.5	0.03	0.48
(2,1369)	1:A:110:VAL:HG22	1:A:86:ILE:HA	10	0.47	0.03	0.48
(2,1369)	1:A:110:VAL:HG21	1:A:86:ILE:HA	10	0.47	0.03	0.48
(2,1369)	1:A:110:VAL:HG23	1:A:86:ILE:HA	10	0.47	0.03	0.48
(2,1369)	1:A:110:VAL:HG22	1:A:107:PRO:HD3	10	0.47	0.03	0.48
(2,1369)	1:A:110:VAL:HG21	1:A:107:PRO:HD3	10	0.47	0.03	0.48
(2,1369)	1:A:110:VAL:HG23	1:A:107:PRO:HD3	10	0.47	0.03	0.48
(2,1833)	1:A:137:LEU:H	1:A:134:GLU:HB2	10	0.47	0.13	0.44
(2,1833)	1:A:137:LEU:H	1:A:135:VAL:HB	10	0.47	0.13	0.44
(2,1833)	1:A:137:LEU:H	1:A:105:GLU:HG3	10	0.47	0.13	0.44
(2,646)	1:A:106:LEU:HG	1:A:107:PRO:HD3	10	0.45	0.08	0.45
(2,1867)	1:A:88:GLU:H	1:A:86:ILE:HB	10	0.44	0.03	0.44
(2,1867)	1:A:88:GLU:H	1:A:89:LEU:HB3	10	0.44	0.03	0.44
(2,633)	1:A:120:HIS:HB2	1:A:120:HIS:HD2	10	0.41	0.01	0.41
(2,1042)	1:A:89:LEU:H	1:A:88:GLU:HB3	10	0.4	0.14	0.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:61:ARG:HG3	10	0.4	0.04	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:61:ARG:HG3	10	0.4	0.04	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:61:ARG:HG3	10	0.4	0.04	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:61:ARG:HG3	10	0.4	0.04	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:61:ARG:HG3	10	0.4	0.04	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:61:ARG:HG3	10	0.4	0.04	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:62:LEU:HG	10	0.4	0.04	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:62:LEU:HG	10	0.4	0.04	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:62:LEU:HG	10	0.4	0.04	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:62:LEU:HG	10	0.4	0.04	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:62:LEU:HG	10	0.4	0.04	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:62:LEU:HG	10	0.4	0.04	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:71:LYS:HG3	10	0.4	0.04	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:71:LYS:HG3	10	0.4	0.04	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:71:LYS:HG3	10	0.4	0.04	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:71:LYS:HG3	10	0.4	0.04	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:71:LYS:HG3	10	0.4	0.04	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:71:LYS:HG3	10	0.4	0.04	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:119:LEU:HB2	10	0.4	0.04	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:119:LEU:HB2	10	0.4	0.04	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:119:LEU:HB2	10	0.4	0.04	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:119:LEU:HB2	10	0.4	0.04	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:119:LEU:HB2	10	0.4	0.04	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:119:LEU:HB2	10	0.4	0.04	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:124:ALA:HB2	10	0.4	0.04	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:124:ALA:HB1	10	0.4	0.04	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:124:ALA:HB3	10	0.4	0.04	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:124:ALA:HB2	10	0.4	0.04	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:124:ALA:HB1	10	0.4	0.04	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:124:ALA:HB3	10	0.4	0.04	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:124:ALA:HB2	10	0.4	0.04	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:124:ALA:HB1	10	0.4	0.04	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:124:ALA:HB3	10	0.4	0.04	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:124:ALA:HB2	10	0.4	0.04	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:124:ALA:HB1	10	0.4	0.04	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:124:ALA:HB3	10	0.4	0.04	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:124:ALA:HB2	10	0.4	0.04	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:124:ALA:HB1	10	0.4	0.04	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:124:ALA:HB3	10	0.4	0.04	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:124:ALA:HB2	10	0.4	0.04	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:124:ALA:HB1	10	0.4	0.04	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:124:ALA:HB3	10	0.4	0.04	0.38

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(2,570)	1:A:121:ASP:HA	1:A:120:HIS:HB2	10	0.39	0.02	0.39
(2,1043)	1:A:89:LEU:H	1:A:89:LEU:HB3	10	0.37	0.04	0.37
(2,240)	1:A:110:VAL:HG12	1:A:89:LEU:HB2	10	0.35	0.15	0.34
(2,240)	1:A:110:VAL:HG11	1:A:89:LEU:HB2	10	0.35	0.15	0.34
(2,240)	1:A:110:VAL:HG13	1:A:89:LEU:HB2	10	0.35	0.15	0.34
(2,1846)	1:A:106:LEU:H	1:A:105:GLU:HB2	10	0.34	0.06	0.36
(2,1846)	1:A:106:LEU:H	1:A:105:GLU:HG3	10	0.34	0.06	0.36
(2,530)	1:A:88:GLU:HA	1:A:88:GLU:HB2	10	0.34	0.02	0.34
(2,1012)	1:A:119:LEU:H	1:A:119:LEU:HB3	10	0.34	0.01	0.33
(2,744)	1:A:105:GLU:H	1:A:105:GLU:HG2	10	0.33	0.02	0.33
(1,13)	1:A:120:HIS:HB2	1:A:122:ILE:HG13	10	0.33	0.03	0.32
(2,64)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:135:VAL:HG22	10	0.32	0.1	0.34
(2,64)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:135:VAL:HG21	10	0.32	0.1	0.34
(2,64)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:135:VAL:HG23	10	0.32	0.1	0.34
(2,64)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:135:VAL:HG12	10	0.32	0.1	0.34
(2,64)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:135:VAL:HG11	10	0.32	0.1	0.34
(2,64)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:135:VAL:HG13	10	0.32	0.1	0.34
(2,1304)	1:A:106:LEU:HD12	1:A:109:THR:H	10	0.31	0.03	0.32
(2,1304)	1:A:106:LEU:HD11	1:A:109:THR:H	10	0.31	0.03	0.32
(2,1304)	1:A:106:LEU:HD13	1:A:109:THR:H	10	0.31	0.03	0.32
(2,1304)	1:A:106:LEU:HD12	1:A:110:VAL:H	10	0.31	0.03	0.32
(2,1304)	1:A:106:LEU:HD11	1:A:110:VAL:H	10	0.31	0.03	0.32
(2,1304)	1:A:106:LEU:HD13	1:A:110:VAL:H	10	0.31	0.03	0.32
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD12	1:A:82:PHE:HE1	10	0.31	0.03	0.32
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD12	1:A:82:PHE:HE2	10	0.31	0.03	0.32
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD11	1:A:82:PHE:HE1	10	0.31	0.03	0.32
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD11	1:A:82:PHE:HE2	10	0.31	0.03	0.32
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD13	1:A:82:PHE:HE1	10	0.31	0.03	0.32
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD13	1:A:82:PHE:HE2	10	0.31	0.03	0.32
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD12	1:A:82:PHE:HZ	10	0.31	0.03	0.32
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD11	1:A:82:PHE:HZ	10	0.31	0.03	0.32
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD13	1:A:82:PHE:HZ	10	0.31	0.03	0.32
(2,946)	1:A:58:GLU:H	1:A:58:GLU:HB2	10	0.27	0.14	0.23
(2,946)	1:A:58:GLU:H	1:A:58:GLU:HB2	10	0.27	0.14	0.23
(2,946)	1:A:58:GLU:H	1:A:58:GLU:HB2	10	0.27	0.14	0.23
(2,1504)	1:A:133:SER:HB3	1:A:62:LEU:HD22	10	0.27	0.12	0.23
(2,1504)	1:A:133:SER:HB3	1:A:62:LEU:HD21	10	0.27	0.12	0.23
(2,1504)	1:A:133:SER:HB3	1:A:62:LEU:HD23	10	0.27	0.12	0.23
(2,1504)	1:A:70:SER:HB2	1:A:64:VAL:HG22	10	0.27	0.12	0.23
(2,1504)	1:A:70:SER:HB2	1:A:64:VAL:HG21	10	0.27	0.12	0.23
(2,1504)	1:A:70:SER:HB2	1:A:64:VAL:HG23	10	0.27	0.12	0.23
(2,1504)	1:A:70:SER:HB3	1:A:64:VAL:HG22	10	0.27	0.12	0.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(2,1504)	1:A:70:SER:HB3	1:A:64:VAL:HG21	10	0.27	0.12	0.23
(2,1504)	1:A:70:SER:HB3	1:A:64:VAL:HG23	10	0.27	0.12	0.23
(2,200)	1:A:118:LEU:HD12	1:A:86:ILE:HA	10	0.26	0.03	0.28
(2,200)	1:A:118:LEU:HD11	1:A:86:ILE:HA	10	0.26	0.03	0.28
(2,200)	1:A:118:LEU:HD13	1:A:86:ILE:HA	10	0.26	0.03	0.28
(2,664)	1:A:118:LEU:HD22	1:A:85:ARG:HD3	10	0.25	0.0	0.25
(2,664)	1:A:118:LEU:HD21	1:A:85:ARG:HD3	10	0.25	0.0	0.25
(2,664)	1:A:118:LEU:HD23	1:A:85:ARG:HD3	10	0.25	0.0	0.25
(2,1645)	1:A:71:LYS:HA	1:A:69:GLU:HB2	10	0.24	0.06	0.24
(2,1645)	1:A:71:LYS:HA	1:A:69:GLU:HB3	10	0.24	0.06	0.24
(2,1721)	1:A:85:ARG:HD2	1:A:84:THR:HA	10	0.23	0.04	0.24
(2,1721)	1:A:85:ARG:HA	1:A:85:ARG:HD2	10	0.23	0.04	0.24
(2,1062)	1:A:120:HIS:H	1:A:119:LEU:HB3	10	0.23	0.05	0.25
(2,1933)	1:A:92:SER:H	1:A:93:ILE:HD12	10	0.22	0.06	0.24
(2,1933)	1:A:92:SER:H	1:A:93:ILE:HD11	10	0.22	0.06	0.24
(2,1933)	1:A:92:SER:H	1:A:93:ILE:HD13	10	0.22	0.06	0.24
(2,1933)	1:A:92:SER:H	1:A:104:ILE:HD12	10	0.22	0.06	0.24
(2,1933)	1:A:92:SER:H	1:A:104:ILE:HD11	10	0.22	0.06	0.24
(2,1933)	1:A:92:SER:H	1:A:104:ILE:HD13	10	0.22	0.06	0.24
(2,1933)	1:A:92:SER:H	1:A:104:ILE:HG12	10	0.22	0.06	0.24
(2,871)	1:A:87:GLU:H	1:A:92:SER:HB2	10	0.2	0.02	0.2
(2,871)	1:A:87:GLU:H	1:A:92:SER:HB3	10	0.2	0.02	0.2
(2,1144)	1:A:126:GLY:H	1:A:127:GLY:HA2	10	0.2	0.06	0.22
(2,1634)	1:A:123:LEU:HA	1:A:73:PHE:HD1	10	0.17	0.03	0.17
(2,1634)	1:A:123:LEU:HA	1:A:73:PHE:HD2	10	0.17	0.03	0.17
(2,1634)	1:A:123:LEU:HA	1:A:73:PHE:HE1	10	0.17	0.03	0.17
(2,1634)	1:A:123:LEU:HA	1:A:73:PHE:HE2	10	0.17	0.03	0.17
(2,275)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:102:THR:HB	10	0.17	0.03	0.16
(2,275)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:102:THR:HB	10	0.17	0.03	0.16
(2,275)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:102:THR:HB	10	0.17	0.03	0.16
(2,659)	1:A:90:GLY:HA2	1:A:89:LEU:HA	10	0.17	0.01	0.17
(2,241)	1:A:106:LEU:HD22	1:A:110:VAL:HG12	10	0.15	0.02	0.16
(2,241)	1:A:106:LEU:HD22	1:A:110:VAL:HG11	10	0.15	0.02	0.16
(2,241)	1:A:106:LEU:HD22	1:A:110:VAL:HG13	10	0.15	0.02	0.16
(2,241)	1:A:106:LEU:HD21	1:A:110:VAL:HG12	10	0.15	0.02	0.16
(2,241)	1:A:106:LEU:HD21	1:A:110:VAL:HG11	10	0.15	0.02	0.16
(2,241)	1:A:106:LEU:HD21	1:A:110:VAL:HG13	10	0.15	0.02	0.16
(2,241)	1:A:106:LEU:HD23	1:A:110:VAL:HG12	10	0.15	0.02	0.16
(2,241)	1:A:106:LEU:HD23	1:A:110:VAL:HG11	10	0.15	0.02	0.16
(2,241)	1:A:106:LEU:HD23	1:A:110:VAL:HG13	10	0.15	0.02	0.16
(2,195)	1:A:89:LEU:HG	1:A:89:LEU:HA	10	0.15	0.01	0.15
(2,1702)	1:A:106:LEU:HB2	1:A:86:ILE:HB	10	0.15	0.02	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(2,1702)	1:A:106:LEU:HB3	1:A:86:ILE:HB	10	0.15	0.02	0.15
(2,1702)	1:A:105:GLU:HG3	1:A:106:LEU:HB2	10	0.15	0.02	0.15
(2,1702)	1:A:105:GLU:HG3	1:A:106:LEU:HB3	10	0.15	0.02	0.15
(2,1702)	1:A:115:MET:HB2	1:A:106:LEU:HB2	10	0.15	0.02	0.15
(2,1702)	1:A:115:MET:HB2	1:A:106:LEU:HB3	10	0.15	0.02	0.15
(2,1702)	1:A:106:LEU:HB2	1:A:118:LEU:HB3	10	0.15	0.02	0.15
(2,1702)	1:A:106:LEU:HB3	1:A:118:LEU:HB3	10	0.15	0.02	0.15
(2,156)	1:A:107:PRO:HG2	1:A:107:PRO:HD3	10	0.11	0.0	0.11
(2,1908)	1:A:84:THR:H	1:A:87:GLU:HG2	9	0.73	0.31	0.71
(2,1908)	1:A:84:THR:H	1:A:88:GLU:HG3	9	0.73	0.31	0.71
(2,186)	1:A:96:LEU:HG	1:A:103:MET:HG2	9	0.61	0.67	0.16
(1,46)	1:A:108:LYS:HE3	1:A:59:MET:HA	9	0.6	0.6	0.23
(1,11)	1:A:66:GLU:HB3	1:A:101:VAL:HA	9	0.58	0.13	0.63
(2,1741)	1:A:136:LYS:HE2	1:A:136:LYS:HA	9	0.54	0.32	0.55
(2,1741)	1:A:67:LYS:HE2	1:A:70:SER:HA	9	0.54	0.32	0.55
(2,1741)	1:A:71:LYS:HE2	1:A:72:ASN:HA	9	0.54	0.32	0.55
(2,1741)	1:A:75:LYS:HE2	1:A:79:SER:HA	9	0.54	0.32	0.55
(2,1190)	1:A:59:MET:HG2	1:A:133:SER:HB2	9	0.42	0.1	0.45
(2,1190)	1:A:63:MET:HB2	1:A:130:GLY:HA2	9	0.42	0.1	0.45
(2,1190)	1:A:107:PRO:HB3	1:A:90:GLY:HA2	9	0.42	0.1	0.45
(2,36)	1:A:66:GLU:HG3	1:A:66:GLU:HB2	9	0.36	0.02	0.36
(2,1386)	1:A:109:THR:HG21	1:A:58:GLU:HG2	9	0.35	0.21	0.32
(2,1386)	1:A:109:THR:HG22	1:A:58:GLU:HG2	9	0.35	0.21	0.32
(2,1386)	1:A:109:THR:HG23	1:A:58:GLU:HG2	9	0.35	0.21	0.32
(2,1386)	1:A:84:THR:HG21	1:A:87:GLU:HB3	9	0.35	0.21	0.32
(2,1386)	1:A:84:THR:HG22	1:A:87:GLU:HB3	9	0.35	0.21	0.32
(2,1386)	1:A:84:THR:HG23	1:A:87:GLU:HB3	9	0.35	0.21	0.32
(2,1386)	1:A:84:THR:HG21	1:A:88:GLU:HB3	9	0.35	0.21	0.32
(2,1386)	1:A:84:THR:HG22	1:A:88:GLU:HB3	9	0.35	0.21	0.32
(2,1386)	1:A:84:THR:HG23	1:A:88:GLU:HB3	9	0.35	0.21	0.32
(2,1324)	1:A:107:PRO:HB3	1:A:108:LYS:HG3	9	0.3	0.11	0.29
(2,1324)	1:A:115:MET:HG3	1:A:108:LYS:HG3	9	0.3	0.11	0.29
(1,3)	1:A:122:ILE:HB	1:A:62:LEU:HB2	9	0.24	0.05	0.22
(2,1657)	1:A:61:ARG:HG2	1:A:105:GLU:HA	9	0.19	0.07	0.18
(2,1657)	1:A:105:GLU:HA	1:A:106:LEU:HB2	9	0.19	0.07	0.18
(2,1657)	1:A:105:GLU:HA	1:A:106:LEU:HB3	9	0.19	0.07	0.18
(2,1540)	1:A:135:VAL:HA	1:A:109:THR:H	9	0.18	0.05	0.19
(2,1540)	1:A:135:VAL:HA	1:A:110:VAL:H	9	0.18	0.05	0.19
(2,1935)	1:A:78:LYS:H	1:A:75:LYS:HB2	9	0.18	0.03	0.17
(2,1935)	1:A:78:LYS:H	1:A:78:LYS:HB3	9	0.18	0.03	0.17
(2,1462)	1:A:122:ILE:HD12	1:A:118:LEU:HB3	9	0.17	0.03	0.17
(2,1462)	1:A:122:ILE:HD11	1:A:118:LEU:HB3	9	0.17	0.03	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(2,1462)	1:A:122:ILE:HD13	1:A:118:LEU:HB3	9	0.17	0.03	0.17
(2,1462)	1:A:122:ILE:HD12	1:A:103:MET:HB3	9	0.17	0.03	0.17
(2,1462)	1:A:122:ILE:HD11	1:A:103:MET:HB3	9	0.17	0.03	0.17
(2,1462)	1:A:122:ILE:HD13	1:A:103:MET:HB3	9	0.17	0.03	0.17
(2,918)	1:A:71:LYS:H	1:A:67:LYS:HA	9	0.17	0.02	0.17
(2,387)	1:A:86:ILE:HD12	1:A:85:ARG:HD2	9	0.17	0.03	0.17
(2,387)	1:A:86:ILE:HD11	1:A:85:ARG:HD2	9	0.17	0.03	0.17
(2,387)	1:A:86:ILE:HD13	1:A:85:ARG:HD2	9	0.17	0.03	0.17
(1,47)	1:A:103:MET:H	1:A:95:PHE:HB3	9	0.15	0.03	0.14
(2,1268)	1:A:78:LYS:HD3	1:A:74:SER:HB3	8	1.26	0.17	1.34
(2,1268)	1:A:78:LYS:HD2	1:A:74:SER:HB3	8	1.26	0.17	1.34
(2,394)	1:A:99:THR:HB	1:A:98:GLU:HB3	8	1.16	0.07	1.15
(2,1056)	1:A:113:HIS:H	1:A:114:ASP:HB3	8	1.08	0.06	1.08
(2,727)	1:A:111:SER:HB3	1:A:114:ASP:HB3	8	0.89	0.13	0.93
(2,759)	1:A:111:SER:H	1:A:114:ASP:HB3	8	0.52	0.03	0.5
(2,1258)	1:A:108:LYS:HD3	1:A:59:MET:HA	8	0.38	0.18	0.3
(2,1258)	1:A:136:LYS:HD2	1:A:59:MET:HA	8	0.38	0.18	0.3
(2,1258)	1:A:136:LYS:HD3	1:A:59:MET:HA	8	0.38	0.18	0.3
(2,258)	1:A:89:LEU:HD22	1:A:114:ASP:HB2	8	0.37	0.04	0.36
(2,258)	1:A:89:LEU:HD21	1:A:114:ASP:HB2	8	0.37	0.04	0.36
(2,258)	1:A:89:LEU:HD23	1:A:114:ASP:HB2	8	0.37	0.04	0.36
(2,1506)	1:A:128:VAL:HB	1:A:70:SER:HB2	8	0.32	0.12	0.32
(2,1506)	1:A:66:GLU:HB2	1:A:70:SER:HB2	8	0.32	0.12	0.32
(2,1506)	1:A:128:VAL:HB	1:A:70:SER:HB3	8	0.32	0.12	0.32
(2,1506)	1:A:66:GLU:HB2	1:A:70:SER:HB3	8	0.32	0.12	0.32
(2,1506)	1:A:70:SER:HB3	1:A:71:LYS:HB3	8	0.32	0.12	0.32
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD12	1:A:87:GLU:HB3	8	0.29	0.03	0.29
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD11	1:A:87:GLU:HB3	8	0.29	0.03	0.29
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD13	1:A:87:GLU:HB3	8	0.29	0.03	0.29
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD12	1:A:88:GLU:HB3	8	0.29	0.03	0.29
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD11	1:A:88:GLU:HB3	8	0.29	0.03	0.29
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD13	1:A:88:GLU:HB3	8	0.29	0.03	0.29
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD12	1:A:115:MET:HB3	8	0.29	0.03	0.29
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD11	1:A:115:MET:HB3	8	0.29	0.03	0.29
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD13	1:A:115:MET:HB3	8	0.29	0.03	0.29
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD12	1:A:122:ILE:HG13	8	0.29	0.03	0.29
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD11	1:A:122:ILE:HG13	8	0.29	0.03	0.29
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD13	1:A:122:ILE:HG13	8	0.29	0.03	0.29
(2,962)	1:A:114:ASP:H	1:A:114:ASP:HB3	8	0.29	0.01	0.29
(2,1726)	1:A:127:GLY:HA2	1:A:66:GLU:HB2	8	0.28	0.02	0.28
(2,1726)	1:A:127:GLY:HA2	1:A:76:MET:HB2	8	0.28	0.02	0.28
(2,1726)	1:A:127:GLY:HA2	1:A:128:VAL:HB	8	0.28	0.02	0.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(2,1759)	1:A:82:PHE:HB3	1:A:76:MET:HG2	8	0.23	0.04	0.22
(2,1759)	1:A:82:PHE:HB3	1:A:85:ARG:HG3	8	0.23	0.04	0.22
(2,1288)	1:A:137:LEU:HG	1:A:131:LEU:HA	8	0.18	0.06	0.18
(2,1288)	1:A:137:LEU:HG	1:A:132:ASP:HA	8	0.18	0.06	0.18
(2,1450)	1:A:122:ILE:HG22	1:A:70:SER:HB2	8	0.18	0.03	0.17
(2,1450)	1:A:122:ILE:HG21	1:A:70:SER:HB2	8	0.18	0.03	0.17
(2,1450)	1:A:122:ILE:HG23	1:A:70:SER:HB2	8	0.18	0.03	0.17
(2,1450)	1:A:122:ILE:HG22	1:A:119:LEU:HA	8	0.18	0.03	0.17
(2,1450)	1:A:122:ILE:HG21	1:A:119:LEU:HA	8	0.18	0.03	0.17
(2,1450)	1:A:122:ILE:HG23	1:A:119:LEU:HA	8	0.18	0.03	0.17
(2,1572)	1:A:82:PHE:HE1	1:A:77:ALA:HA	8	0.17	0.03	0.18
(2,1572)	1:A:82:PHE:HE2	1:A:77:ALA:HA	8	0.17	0.03	0.18
(2,1572)	1:A:82:PHE:HE1	1:A:122:ILE:HA	8	0.17	0.03	0.18
(2,1572)	1:A:82:PHE:HE2	1:A:122:ILE:HA	8	0.17	0.03	0.18
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:123:LEU:HA	8	0.16	0.03	0.16
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:123:LEU:HA	8	0.16	0.03	0.16
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:123:LEU:HA	8	0.16	0.03	0.16
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:129:VAL:HA	8	0.16	0.03	0.16
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:129:VAL:HA	8	0.16	0.03	0.16
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:129:VAL:HA	8	0.16	0.03	0.16
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:101:VAL:HA	8	0.16	0.03	0.16
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:101:VAL:HA	8	0.16	0.03	0.16
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:101:VAL:HA	8	0.16	0.03	0.16
(2,1617)	1:A:79:SER:HA	1:A:75:LYS:HB2	8	0.16	0.03	0.16
(2,1617)	1:A:79:SER:HA	1:A:75:LYS:HB3	8	0.16	0.03	0.16
(2,1617)	1:A:79:SER:HA	1:A:78:LYS:HB3	8	0.16	0.03	0.16
(2,1617)	1:A:121:ASP:HA	1:A:123:LEU:HB3	8	0.16	0.03	0.16
(2,1617)	1:A:70:SER:HA	1:A:71:LYS:HD3	8	0.16	0.03	0.16
(2,288)	1:A:110:VAL:HG22	1:A:113:HIS:HB2	8	0.16	0.04	0.16
(2,288)	1:A:110:VAL:HG21	1:A:113:HIS:HB2	8	0.16	0.04	0.16
(2,288)	1:A:110:VAL:HG23	1:A:113:HIS:HB2	8	0.16	0.04	0.16
(2,353)	1:A:86:ILE:HG22	1:A:104:ILE:HG22	8	0.15	0.02	0.16
(2,353)	1:A:86:ILE:HG22	1:A:104:ILE:HG21	8	0.15	0.02	0.16
(2,353)	1:A:86:ILE:HG22	1:A:104:ILE:HG23	8	0.15	0.02	0.16
(2,353)	1:A:86:ILE:HG21	1:A:104:ILE:HG22	8	0.15	0.02	0.16
(2,353)	1:A:86:ILE:HG21	1:A:104:ILE:HG21	8	0.15	0.02	0.16
(2,353)	1:A:86:ILE:HG21	1:A:104:ILE:HG23	8	0.15	0.02	0.16
(2,353)	1:A:86:ILE:HG23	1:A:104:ILE:HG22	8	0.15	0.02	0.16
(2,353)	1:A:86:ILE:HG23	1:A:104:ILE:HG21	8	0.15	0.02	0.16
(2,353)	1:A:86:ILE:HG23	1:A:104:ILE:HG23	8	0.15	0.02	0.16
(2,1769)	1:A:121:ASP:HB2	1:A:82:PHE:HA	8	0.15	0.02	0.15
(2,1769)	1:A:121:ASP:HB2	1:A:115:MET:HA	8	0.15	0.02	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(2,1769)	1:A:121:ASP:HB2	1:A:116:ASP:HA	8	0.15	0.02	0.15
(2,1420)	1:A:64:VAL:HG22	1:A:62:LEU:HG	8	0.15	0.03	0.14
(2,1420)	1:A:64:VAL:HG21	1:A:62:LEU:HG	8	0.15	0.03	0.14
(2,1420)	1:A:64:VAL:HG23	1:A:62:LEU:HG	8	0.15	0.03	0.14
(2,1420)	1:A:93:ILE:HG13	1:A:64:VAL:HG22	8	0.15	0.03	0.14
(2,1420)	1:A:93:ILE:HG13	1:A:64:VAL:HG21	8	0.15	0.03	0.14
(2,1420)	1:A:93:ILE:HG13	1:A:64:VAL:HG23	8	0.15	0.03	0.14
(2,1420)	1:A:64:VAL:HG22	1:A:119:LEU:HB2	8	0.15	0.03	0.14
(2,1420)	1:A:64:VAL:HG21	1:A:119:LEU:HB2	8	0.15	0.03	0.14
(2,1420)	1:A:64:VAL:HG23	1:A:119:LEU:HB2	8	0.15	0.03	0.14
(2,131)	1:A:136:LYS:HD3	1:A:58:GLU:HG3	7	0.94	0.41	0.88
(2,1174)	1:A:66:GLU:HG3	1:A:71:LYS:HB2	7	0.77	0.28	0.76
(2,1174)	1:A:66:GLU:HG3	1:A:71:LYS:HD3	7	0.77	0.28	0.76
(2,1325)	1:A:136:LYS:HG3	1:A:58:GLU:HG2	7	0.47	0.4	0.27
(2,1325)	1:A:71:LYS:HG3	1:A:68:GLN:HB3	7	0.47	0.4	0.27
(2,1325)	1:A:108:LYS:HG3	1:A:115:MET:HB3	7	0.47	0.4	0.27
(2,121)	1:A:58:GLU:HB3	1:A:59:MET:HA	7	0.42	0.06	0.42
(2,1524)	1:A:108:LYS:HD3	1:A:135:VAL:HA	7	0.41	0.15	0.44
(2,1524)	1:A:110:VAL:HA	1:A:89:LEU:HB2	7	0.41	0.15	0.44
(2,1524)	1:A:136:LYS:HD2	1:A:135:VAL:HA	7	0.41	0.15	0.44
(2,1500)	1:A:133:SER:HB3	1:A:105:GLU:HG3	7	0.3	0.09	0.28
(2,1500)	1:A:128:VAL:HB	1:A:70:SER:HB2	7	0.3	0.09	0.28
(2,1500)	1:A:66:GLU:HB2	1:A:70:SER:HB2	7	0.3	0.09	0.28
(2,1500)	1:A:128:VAL:HB	1:A:70:SER:HB3	7	0.3	0.09	0.28
(2,1500)	1:A:66:GLU:HB2	1:A:70:SER:HB3	7	0.3	0.09	0.28
(2,1500)	1:A:70:SER:HB3	1:A:71:LYS:HB3	7	0.3	0.09	0.28
(2,649)	1:A:70:SER:HB2	1:A:126:GLY:HA3	7	0.3	0.16	0.23
(2,1861)	1:A:77:ALA:H	1:A:127:GLY:HA2	7	0.3	0.08	0.29
(2,1861)	1:A:121:ASP:H	1:A:116:ASP:HB2	7	0.3	0.08	0.29
(2,1861)	1:A:121:ASP:H	1:A:127:GLY:HA2	7	0.3	0.08	0.29
(2,1861)	1:A:77:ALA:H	1:A:78:LYS:HE3	7	0.3	0.08	0.29
(2,1032)	1:A:84:THR:H	1:A:84:THR:HG21	7	0.28	0.07	0.31
(2,1032)	1:A:84:THR:H	1:A:84:THR:HG22	7	0.28	0.07	0.31
(2,1032)	1:A:84:THR:H	1:A:84:THR:HG23	7	0.28	0.07	0.31
(2,219)	1:A:75:LYS:HG3	1:A:75:LYS:HA	7	0.26	0.04	0.27
(2,1302)	1:A:62:LEU:HG	1:A:103:MET:HG2	7	0.26	0.02	0.26
(2,1302)	1:A:62:LEU:HG	1:A:122:ILE:HG13	7	0.26	0.02	0.26
(2,1302)	1:A:106:LEU:HG	1:A:58:GLU:HG2	7	0.26	0.02	0.26
(2,1302)	1:A:106:LEU:HG	1:A:58:GLU:HG3	7	0.26	0.02	0.26
(2,1302)	1:A:118:LEU:HG	1:A:122:ILE:HG13	7	0.26	0.02	0.26
(2,28)	1:A:87:GLU:HG2	1:A:87:GLU:HB3	7	0.22	0.13	0.18
(2,296)	1:A:101:VAL:HG22	1:A:94:SER:HB2	7	0.2	0.04	0.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(2,296)	1:A:101:VAL:HG21	1:A:94:SER:HB2	7	0.2	0.04	0.21
(2,296)	1:A:101:VAL:HG23	1:A:94:SER:HB2	7	0.2	0.04	0.21
(2,296)	1:A:101:VAL:HG12	1:A:94:SER:HB2	7	0.2	0.04	0.21
(2,296)	1:A:101:VAL:HG11	1:A:94:SER:HB2	7	0.2	0.04	0.21
(2,296)	1:A:101:VAL:HG13	1:A:94:SER:HB2	7	0.2	0.04	0.21
(2,1635)	1:A:114:ASP:HA	1:A:115:MET:HA	7	0.15	0.01	0.16
(2,1635)	1:A:114:ASP:HA	1:A:118:LEU:HA	7	0.15	0.01	0.16
(2,1930)	1:A:92:SER:H	1:A:87:GLU:HB2	7	0.14	0.02	0.14
(2,1930)	1:A:92:SER:H	1:A:105:GLU:HG2	7	0.14	0.02	0.14
(2,267)	1:A:110:VAL:HG22	1:A:114:ASP:HB3	7	0.13	0.02	0.12
(2,267)	1:A:110:VAL:HG21	1:A:114:ASP:HB3	7	0.13	0.02	0.12
(2,267)	1:A:110:VAL:HG23	1:A:114:ASP:HB3	7	0.13	0.02	0.12
(2,1171)	1:A:58:GLU:HG2	1:A:58:GLU:HB3	7	0.13	0.01	0.13
(2,1171)	1:A:58:GLU:HG2	1:A:107:PRO:HB2	7	0.13	0.01	0.13
(2,1171)	1:A:88:GLU:HG2	1:A:88:GLU:HB2	7	0.13	0.01	0.13
(2,1171)	1:A:112:GLU:HG2	1:A:112:GLU:HB3	7	0.13	0.01	0.13
(2,1171)	1:A:112:GLU:HG3	1:A:112:GLU:HB2	7	0.13	0.01	0.13
(2,139)	1:A:71:LYS:HD3	1:A:74:SER:HA	6	1.44	0.08	1.44
(1,24)	1:A:75:LYS:HG3	1:A:78:LYS:HE3	6	0.67	0.29	0.68
(2,1256)	1:A:75:LYS:HD3	1:A:78:LYS:HE3	6	0.61	0.41	0.55
(2,1256)	1:A:136:LYS:HD2	1:A:59:MET:HG3	6	0.61	0.41	0.55
(2,1904)	1:A:66:GLU:H	1:A:67:LYS:HB2	6	0.43	0.17	0.38
(2,1904)	1:A:66:GLU:H	1:A:71:LYS:HD3	6	0.43	0.17	0.38
(2,72)	1:A:59:MET:HG3	1:A:136:LYS:HB3	6	0.39	0.42	0.22
(2,604)	1:A:131:LEU:HD22	1:A:131:LEU:HA	6	0.23	0.07	0.21
(2,604)	1:A:131:LEU:HD21	1:A:131:LEU:HA	6	0.23	0.07	0.21
(2,604)	1:A:131:LEU:HD23	1:A:131:LEU:HA	6	0.23	0.07	0.21
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:130:GLY:HA2	6	0.21	0.08	0.18
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:130:GLY:HA2	6	0.21	0.08	0.18
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:130:GLY:HA2	6	0.21	0.08	0.18
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:130:GLY:HA2	6	0.21	0.08	0.18
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:130:GLY:HA2	6	0.21	0.08	0.18
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:130:GLY:HA2	6	0.21	0.08	0.18
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:126:GLY:HA2	6	0.21	0.08	0.18
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:126:GLY:HA2	6	0.21	0.08	0.18
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:126:GLY:HA2	6	0.21	0.08	0.18
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:126:GLY:HA2	6	0.21	0.08	0.18
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:126:GLY:HA2	6	0.21	0.08	0.18
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:126:GLY:HA2	6	0.21	0.08	0.18
(2,1626)	1:A:118:LEU:HA	1:A:85:ARG:HG2	6	0.19	0.05	0.18
(2,1626)	1:A:69:GLU:HA	1:A:67:LYS:HG3	6	0.19	0.05	0.18
(2,1332)	1:A:137:LEU:HD12	1:A:133:SER:HB3	6	0.17	0.06	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(2,1332)	1:A:137:LEU:HD11	1:A:133:SER:HB3	6	0.17	0.06	0.16
(2,1332)	1:A:137:LEU:HD13	1:A:133:SER:HB3	6	0.17	0.06	0.16
(2,1332)	1:A:119:LEU:HD12	1:A:119:LEU:HA	6	0.17	0.06	0.16
(2,1332)	1:A:119:LEU:HD11	1:A:119:LEU:HA	6	0.17	0.06	0.16
(2,1332)	1:A:119:LEU:HD13	1:A:119:LEU:HA	6	0.17	0.06	0.16
(1,43)	1:A:132:ASP:HA	1:A:103:MET:HG2	6	0.15	0.03	0.15
(2,617)	1:A:103:MET:HG2	1:A:103:MET:HA	6	0.14	0.01	0.14
(2,1317)	1:A:78:LYS:HG3	1:A:78:LYS:HA	6	0.13	0.02	0.12
(2,1317)	1:A:85:ARG:HG2	1:A:82:PHE:HA	6	0.13	0.02	0.12
(2,1273)	1:A:122:ILE:HG12	1:A:62:LEU:HG	6	0.13	0.01	0.13
(2,1273)	1:A:122:ILE:HG12	1:A:93:ILE:HG13	6	0.13	0.01	0.13
(2,1273)	1:A:122:ILE:HG12	1:A:125:ALA:HB2	6	0.13	0.01	0.13
(2,1273)	1:A:122:ILE:HG12	1:A:125:ALA:HB1	6	0.13	0.01	0.13
(2,1273)	1:A:122:ILE:HG12	1:A:125:ALA:HB3	6	0.13	0.01	0.13
(2,1158)	1:A:72:ASN:HB2	1:A:70:SER:HB2	5	0.77	0.53	1.17
(2,1158)	1:A:72:ASN:HB2	1:A:70:SER:HB3	5	0.77	0.53	1.17
(2,1682)	1:A:62:LEU:HA	1:A:63:MET:HB2	5	0.51	0.29	0.63
(2,1682)	1:A:62:LEU:HA	1:A:103:MET:HG3	5	0.51	0.29	0.63
(2,1257)	1:A:136:LYS:HD2	1:A:59:MET:HG2	5	0.44	0.23	0.38
(2,1257)	1:A:136:LYS:HD3	1:A:58:GLU:HG3	5	0.44	0.23	0.38
(2,1257)	1:A:136:LYS:HD3	1:A:59:MET:HG2	5	0.44	0.23	0.38
(2,1257)	1:A:75:LYS:HD3	1:A:78:LYS:HE2	5	0.44	0.23	0.38
(2,1238)	1:A:134:GLU:HB3	1:A:131:LEU:HA	5	0.36	0.36	0.18
(2,1238)	1:A:134:GLU:HB3	1:A:132:ASP:HA	5	0.36	0.36	0.18
(2,1149)	1:A:58:GLU:H	1:A:58:GLU:HG2	5	0.28	0.06	0.3
(2,1149)	1:A:58:GLU:H	1:A:58:GLU:HG2	5	0.28	0.06	0.3
(2,1149)	1:A:58:GLU:H	1:A:58:GLU:HG2	5	0.28	0.06	0.3
(2,688)	1:A:108:LYS:HD3	1:A:108:LYS:HE3	5	0.24	0.01	0.24
(2,1388)	1:A:109:THR:HG21	1:A:108:LYS:HE3	5	0.23	0.09	0.21
(2,1388)	1:A:109:THR:HG22	1:A:108:LYS:HE3	5	0.23	0.09	0.21
(2,1388)	1:A:109:THR:HG23	1:A:108:LYS:HE3	5	0.23	0.09	0.21
(2,1388)	1:A:84:THR:HG21	1:A:85:ARG:HD2	5	0.23	0.09	0.21
(2,1388)	1:A:84:THR:HG22	1:A:85:ARG:HD2	5	0.23	0.09	0.21
(2,1388)	1:A:84:THR:HG23	1:A:85:ARG:HD2	5	0.23	0.09	0.21
(2,1425)	1:A:138:ALA:HB2	1:A:61:ARG:HG3	5	0.22	0.1	0.24
(2,1425)	1:A:138:ALA:HB1	1:A:61:ARG:HG3	5	0.22	0.1	0.24
(2,1425)	1:A:138:ALA:HB3	1:A:61:ARG:HG3	5	0.22	0.1	0.24
(2,1425)	1:A:138:ALA:HB2	1:A:106:LEU:HB2	5	0.22	0.1	0.24
(2,1425)	1:A:138:ALA:HB2	1:A:106:LEU:HB3	5	0.22	0.1	0.24
(2,1425)	1:A:138:ALA:HB1	1:A:106:LEU:HB2	5	0.22	0.1	0.24
(2,1425)	1:A:138:ALA:HB1	1:A:106:LEU:HB3	5	0.22	0.1	0.24
(2,1425)	1:A:138:ALA:HB3	1:A:106:LEU:HB2	5	0.22	0.1	0.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(2,1425)	1:A:138:ALA:HB3	1:A:106:LEU:HB3	5	0.22	0.1	0.24
(2,1425)	1:A:138:ALA:HB2	1:A:108:LYS:HG3	5	0.22	0.1	0.24
(2,1425)	1:A:138:ALA:HB1	1:A:108:LYS:HG3	5	0.22	0.1	0.24
(2,1425)	1:A:138:ALA:HB3	1:A:108:LYS:HG3	5	0.22	0.1	0.24
(1,41)	1:A:105:GLU:HA	1:A:132:ASP:HB2	5	0.21	0.06	0.23
(2,1510)	1:A:110:VAL:HA	1:A:89:LEU:HD22	5	0.16	0.01	0.16
(2,1510)	1:A:110:VAL:HA	1:A:89:LEU:HD21	5	0.16	0.01	0.16
(2,1510)	1:A:110:VAL:HA	1:A:89:LEU:HD23	5	0.16	0.01	0.16
(2,1510)	1:A:110:VAL:HA	1:A:106:LEU:HD22	5	0.16	0.01	0.16
(2,1510)	1:A:110:VAL:HA	1:A:106:LEU:HD21	5	0.16	0.01	0.16
(2,1510)	1:A:110:VAL:HA	1:A:106:LEU:HD23	5	0.16	0.01	0.16
(2,514)	1:A:115:MET:HG3	1:A:112:GLU:HA	5	0.13	0.02	0.12
(2,1922)	1:A:86:ILE:H	1:A:87:GLU:HB2	5	0.12	0.02	0.12
(2,1922)	1:A:86:ILE:H	1:A:87:GLU:HB3	5	0.12	0.02	0.12
(2,1922)	1:A:86:ILE:H	1:A:88:GLU:HB3	5	0.12	0.02	0.12
(2,6)	1:A:72:ASN:HB2	1:A:126:GLY:HA2	4	0.97	0.5	1.21
(2,1252)	1:A:136:LYS:HD3	1:A:59:MET:HG2	4	0.57	0.17	0.54
(2,1252)	1:A:66:GLU:HG3	1:A:71:LYS:HD3	4	0.57	0.17	0.54
(2,587)	1:A:71:LYS:HD3	1:A:71:LYS:HA	4	0.56	0.07	0.59
(2,1774)	1:A:63:MET:HB2	1:A:104:ILE:HB	4	0.44	0.18	0.53
(2,1774)	1:A:104:ILE:HB	1:A:87:GLU:HG2	4	0.44	0.18	0.53
(2,1774)	1:A:104:ILE:HB	1:A:103:MET:HG3	4	0.44	0.18	0.53
(2,167)	1:A:61:ARG:HG2	1:A:105:GLU:HA	4	0.38	0.45	0.13
(2,1360)	1:A:119:LEU:HD22	1:A:115:MET:HG3	4	0.27	0.25	0.13
(2,1360)	1:A:119:LEU:HD21	1:A:115:MET:HG3	4	0.27	0.25	0.13
(2,1360)	1:A:119:LEU:HD23	1:A:115:MET:HG3	4	0.27	0.25	0.13
(2,1360)	1:A:63:MET:HB2	1:A:96:LEU:HD22	4	0.27	0.25	0.13
(2,1360)	1:A:63:MET:HB2	1:A:96:LEU:HD21	4	0.27	0.25	0.13
(2,1360)	1:A:63:MET:HB2	1:A:96:LEU:HD23	4	0.27	0.25	0.13
(2,1360)	1:A:63:MET:HB3	1:A:96:LEU:HD22	4	0.27	0.25	0.13
(2,1360)	1:A:63:MET:HB3	1:A:96:LEU:HD21	4	0.27	0.25	0.13
(2,1360)	1:A:63:MET:HB3	1:A:96:LEU:HD23	4	0.27	0.25	0.13
(2,523)	1:A:87:GLU:HG3	1:A:87:GLU:HA	4	0.27	0.23	0.14
(1,23)	1:A:93:ILE:HG12	1:A:78:LYS:HG2	4	0.26	0.24	0.12
(1,36)	1:A:85:ARG:HA	1:A:88:GLU:HB3	4	0.19	0.09	0.16
(2,943)	1:A:58:GLU:H	1:A:59:MET:H	4	0.18	0.05	0.18
(2,943)	1:A:58:GLU:H	1:A:59:MET:H	4	0.18	0.05	0.18
(2,943)	1:A:58:GLU:H	1:A:59:MET:H	4	0.18	0.05	0.18
(2,1810)	1:A:136:LYS:H	1:A:136:LYS:HD2	4	0.17	0.04	0.16
(2,1810)	1:A:136:LYS:H	1:A:136:LYS:HD3	4	0.17	0.04	0.16
(2,1314)	1:A:108:LYS:HG3	1:A:106:LEU:HD22	4	0.16	0.06	0.14
(2,1314)	1:A:108:LYS:HG3	1:A:106:LEU:HD21	4	0.16	0.06	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(2,1314)	1:A:108:LYS:HG3	1:A:106:LEU:HD23	4	0.16	0.06	0.14
(2,1314)	1:A:108:LYS:HG3	1:A:106:LEU:HD12	4	0.16	0.06	0.14
(2,1314)	1:A:108:LYS:HG3	1:A:106:LEU:HD11	4	0.16	0.06	0.14
(2,1314)	1:A:108:LYS:HG3	1:A:106:LEU:HD13	4	0.16	0.06	0.14
(2,282)	1:A:97:THR:HG21	1:A:78:LYS:HE2	4	0.16	0.03	0.16
(2,282)	1:A:97:THR:HG22	1:A:78:LYS:HE2	4	0.16	0.03	0.16
(2,282)	1:A:97:THR:HG23	1:A:78:LYS:HE2	4	0.16	0.03	0.16
(2,1446)	1:A:86:ILE:HG22	1:A:107:PRO:HG3	4	0.16	0.03	0.16
(2,1446)	1:A:86:ILE:HG21	1:A:107:PRO:HG3	4	0.16	0.03	0.16
(2,1446)	1:A:86:ILE:HG23	1:A:107:PRO:HG3	4	0.16	0.03	0.16
(2,1446)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG22	4	0.16	0.03	0.16
(2,1446)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG21	4	0.16	0.03	0.16
(2,1446)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG23	4	0.16	0.03	0.16
(2,1446)	1:A:88:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG22	4	0.16	0.03	0.16
(2,1446)	1:A:88:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG21	4	0.16	0.03	0.16
(2,1446)	1:A:88:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG23	4	0.16	0.03	0.16
(2,1763)	1:A:82:PHE:HB2	1:A:76:MET:HB2	4	0.15	0.03	0.16
(2,1763)	1:A:82:PHE:HB2	1:A:85:ARG:HB3	4	0.15	0.03	0.16
(2,1763)	1:A:121:ASP:HB3	1:A:76:MET:HB2	4	0.15	0.03	0.16
(2,1763)	1:A:121:ASP:HB3	1:A:85:ARG:HB2	4	0.15	0.03	0.16
(2,1763)	1:A:121:ASP:HB3	1:A:85:ARG:HB3	4	0.15	0.03	0.16
(2,375)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:122:ILE:HD12	4	0.14	0.02	0.14
(2,375)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:122:ILE:HD11	4	0.14	0.02	0.14
(2,375)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:122:ILE:HD13	4	0.14	0.02	0.14
(2,375)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:122:ILE:HD12	4	0.14	0.02	0.14
(2,375)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:122:ILE:HD11	4	0.14	0.02	0.14
(2,375)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:122:ILE:HD13	4	0.14	0.02	0.14
(2,375)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:122:ILE:HD12	4	0.14	0.02	0.14
(2,375)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:122:ILE:HD11	4	0.14	0.02	0.14
(2,375)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:122:ILE:HD13	4	0.14	0.02	0.14
(2,1714)	1:A:106:LEU:HB2	1:A:91:GLY:HA2	4	0.14	0.01	0.14
(2,1714)	1:A:106:LEU:HB3	1:A:91:GLY:HA2	4	0.14	0.01	0.14
(2,1714)	1:A:106:LEU:HG	1:A:91:GLY:HA2	4	0.14	0.01	0.14
(2,1891)	1:A:116:ASP:H	1:A:115:MET:HB2	4	0.13	0.01	0.14
(2,1891)	1:A:116:ASP:H	1:A:117:GLN:HB2	4	0.13	0.01	0.14
(2,1891)	1:A:116:ASP:H	1:A:117:GLN:HB3	4	0.13	0.01	0.14
(2,1589)	1:A:112:GLU:HA	1:A:89:LEU:HD22	4	0.13	0.01	0.13
(2,1589)	1:A:112:GLU:HA	1:A:89:LEU:HD21	4	0.13	0.01	0.13
(2,1589)	1:A:112:GLU:HA	1:A:89:LEU:HD23	4	0.13	0.01	0.13
(2,1589)	1:A:112:GLU:HA	1:A:106:LEU:HD22	4	0.13	0.01	0.13
(2,1589)	1:A:112:GLU:HA	1:A:106:LEU:HD21	4	0.13	0.01	0.13
(2,1589)	1:A:112:GLU:HA	1:A:106:LEU:HD23	4	0.13	0.01	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(2,1589)	1:A:112:GLU:HA	1:A:119:LEU:HD12	4	0.13	0.01	0.13
(2,1589)	1:A:112:GLU:HA	1:A:119:LEU:HD11	4	0.13	0.01	0.13
(2,1589)	1:A:112:GLU:HA	1:A:119:LEU:HD13	4	0.13	0.01	0.13
(2,1088)	1:A:83:SER:H	1:A:82:PHE:HB2	4	0.12	0.01	0.12
(2,995)	1:A:125:ALA:H	1:A:126:GLY:HA2	4	0.12	0.0	0.12
(2,597)	1:A:61:ARG:HA	1:A:103:MET:HG3	3	1.35	0.19	1.41
(2,528)	1:A:78:LYS:HG2	1:A:75:LYS:HA	3	1.2	0.16	1.24
(2,1177)	1:A:58:GLU:HG2	1:A:107:PRO:HD2	3	0.97	0.08	0.95
(2,1177)	1:A:58:GLU:HG2	1:A:107:PRO:HD3	3	0.97	0.08	0.95
(2,689)	1:A:108:LYS:HG3	1:A:108:LYS:HE3	3	0.87	0.04	0.87
(2,1343)	1:A:137:LEU:HD12	1:A:136:LYS:HE2	3	0.74	0.59	0.55
(2,1343)	1:A:137:LEU:HD11	1:A:136:LYS:HE2	3	0.74	0.59	0.55
(2,1343)	1:A:137:LEU:HD13	1:A:136:LYS:HE2	3	0.74	0.59	0.55
(2,1343)	1:A:137:LEU:HD12	1:A:136:LYS:HE3	3	0.74	0.59	0.55
(2,1343)	1:A:137:LEU:HD11	1:A:136:LYS:HE3	3	0.74	0.59	0.55
(2,1343)	1:A:137:LEU:HD13	1:A:136:LYS:HE3	3	0.74	0.59	0.55
(2,1343)	1:A:106:LEU:HD22	1:A:113:HIS:HB2	3	0.74	0.59	0.55
(2,1343)	1:A:106:LEU:HD21	1:A:113:HIS:HB2	3	0.74	0.59	0.55
(2,1343)	1:A:106:LEU:HD23	1:A:113:HIS:HB2	3	0.74	0.59	0.55
(2,772)	1:A:62:LEU:H	1:A:103:MET:HG3	3	0.71	0.15	0.77
(2,1599)	1:A:75:LYS:HG2	1:A:75:LYS:HA	3	0.58	0.02	0.57
(2,1599)	1:A:78:LYS:HG3	1:A:75:LYS:HA	3	0.58	0.02	0.57
(2,687)	1:A:108:LYS:HE3	1:A:60:THR:HA	3	0.55	0.25	0.44
(1,6)	1:A:101:VAL:HB	1:A:103:MET:HG2	3	0.51	0.24	0.64
(2,1154)	1:A:72:ASN:HB2	1:A:73:PHE:HD1	3	0.35	0.02	0.35
(2,1154)	1:A:72:ASN:HB2	1:A:73:PHE:HD2	3	0.35	0.02	0.35
(2,1154)	1:A:95:PHE:HB2	1:A:73:PHE:HE1	3	0.35	0.02	0.35
(2,1154)	1:A:95:PHE:HB2	1:A:73:PHE:HE2	3	0.35	0.02	0.35
(2,1154)	1:A:95:PHE:HB2	1:A:78:LYS:H	3	0.35	0.02	0.35
(2,1523)	1:A:135:VAL:HA	1:A:58:GLU:HG2	3	0.32	0.06	0.35
(2,1523)	1:A:135:VAL:HA	1:A:107:PRO:HG3	3	0.32	0.06	0.35
(2,1523)	1:A:110:VAL:HA	1:A:107:PRO:HG3	3	0.32	0.06	0.35
(2,654)	1:A:72:ASN:HB2	1:A:126:GLY:HA3	3	0.31	0.09	0.35
(2,1265)	1:A:78:LYS:HD3	1:A:78:LYS:HA	3	0.29	0.17	0.18
(2,1265)	1:A:78:LYS:HD2	1:A:78:LYS:HA	3	0.29	0.17	0.18
(2,311)	1:A:135:VAL:HG22	1:A:133:SER:HB2	3	0.27	0.09	0.27
(2,311)	1:A:135:VAL:HG21	1:A:133:SER:HB2	3	0.27	0.09	0.27
(2,311)	1:A:135:VAL:HG23	1:A:133:SER:HB2	3	0.27	0.09	0.27
(2,311)	1:A:135:VAL:HG12	1:A:133:SER:HB2	3	0.27	0.09	0.27
(2,311)	1:A:135:VAL:HG11	1:A:133:SER:HB2	3	0.27	0.09	0.27
(2,311)	1:A:135:VAL:HG13	1:A:133:SER:HB2	3	0.27	0.09	0.27
(2,1331)	1:A:123:LEU:HD22	1:A:123:LEU:HA	3	0.23	0.16	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(2,1331)	1:A:123:LEU:HD21	1:A:123:LEU:HA	3	0.23	0.16	0.13
(2,1331)	1:A:123:LEU:HD23	1:A:123:LEU:HA	3	0.23	0.16	0.13
(2,1331)	1:A:137:LEU:HD12	1:A:137:LEU:HA	3	0.23	0.16	0.13
(2,1331)	1:A:137:LEU:HD11	1:A:137:LEU:HA	3	0.23	0.16	0.13
(2,1331)	1:A:137:LEU:HD13	1:A:137:LEU:HA	3	0.23	0.16	0.13
(2,1331)	1:A:119:LEU:HD12	1:A:60:THR:HB	3	0.23	0.16	0.13
(2,1331)	1:A:119:LEU:HD11	1:A:60:THR:HB	3	0.23	0.16	0.13
(2,1331)	1:A:119:LEU:HD13	1:A:60:THR:HB	3	0.23	0.16	0.13
(2,106)	1:A:103:MET:HG2	1:A:94:SER:HB2	3	0.23	0.04	0.24
(2,583)	1:A:136:LYS:HA	1:A:133:SER:HB2	3	0.23	0.12	0.16
(2,132)	1:A:75:LYS:HD3	1:A:75:LYS:HA	3	0.22	0.13	0.16
(2,1648)	1:A:136:LYS:HG2	1:A:136:LYS:HA	3	0.16	0.01	0.16
(2,1648)	1:A:136:LYS:HG3	1:A:136:LYS:HA	3	0.16	0.01	0.16
(2,1367)	1:A:65:THR:HG21	1:A:70:SER:HB3	3	0.14	0.02	0.15
(2,1367)	1:A:65:THR:HG22	1:A:70:SER:HB3	3	0.14	0.02	0.15
(2,1367)	1:A:65:THR:HG23	1:A:70:SER:HB3	3	0.14	0.02	0.15
(2,1367)	1:A:65:THR:HG21	1:A:100:GLY:HA2	3	0.14	0.02	0.15
(2,1367)	1:A:65:THR:HG22	1:A:100:GLY:HA2	3	0.14	0.02	0.15
(2,1367)	1:A:65:THR:HG23	1:A:100:GLY:HA2	3	0.14	0.02	0.15
(2,1225)	1:A:115:MET:HB2	1:A:107:PRO:HD2	3	0.13	0.0	0.13
(2,1225)	1:A:115:MET:HB2	1:A:107:PRO:HD3	3	0.13	0.0	0.13
(2,1212)	1:A:128:VAL:HB	1:A:65:THR:HG21	3	0.12	0.01	0.12
(2,1212)	1:A:128:VAL:HB	1:A:65:THR:HG22	3	0.12	0.01	0.12
(2,1212)	1:A:128:VAL:HB	1:A:65:THR:HG23	3	0.12	0.01	0.12
(2,1212)	1:A:108:LYS:HB3	1:A:109:THR:HG21	3	0.12	0.01	0.12
(2,1212)	1:A:108:LYS:HB3	1:A:109:THR:HG22	3	0.12	0.01	0.12
(2,1212)	1:A:108:LYS:HB3	1:A:109:THR:HG23	3	0.12	0.01	0.12
(2,1212)	1:A:108:LYS:HB3	1:A:110:VAL:HG12	3	0.12	0.01	0.12
(2,1212)	1:A:108:LYS:HB3	1:A:110:VAL:HG11	3	0.12	0.01	0.12
(2,1212)	1:A:108:LYS:HB3	1:A:110:VAL:HG13	3	0.12	0.01	0.12
(2,1765)	1:A:113:HIS:HA	1:A:116:ASP:HB3	3	0.12	0.01	0.11
(2,1765)	1:A:116:ASP:HA	1:A:116:ASP:HB3	3	0.12	0.01	0.11
(2,458)	1:A:74:SER:HA	1:A:74:SER:HB3	3	0.11	0.0	0.11
(2,182)	1:A:137:LEU:HG	1:A:61:ARG:HD2	3	0.11	0.0	0.11
(2,182)	1:A:137:LEU:HG	1:A:61:ARG:HD3	3	0.11	0.0	0.11
(1,14)	1:A:69:GLU:HB3	1:A:65:THR:HB	2	1.42	0.05	1.42
(2,221)	1:A:71:LYS:HG3	1:A:67:LYS:HA	2	1.4	0.03	1.4
(2,1248)	1:A:67:LYS:HD3	1:A:69:GLU:HB3	2	1.05	0.16	1.05
(2,1248)	1:A:122:ILE:HG13	1:A:85:ARG:HG3	2	1.05	0.16	1.05
(2,1327)	1:A:136:LYS:HG3	1:A:58:GLU:HG2	2	0.91	0.05	0.91
(2,1327)	1:A:136:LYS:HG3	1:A:58:GLU:HG3	2	0.91	0.05	0.91
(2,1509)	1:A:110:VAL:HA	1:A:107:PRO:HB3	2	0.64	0.01	0.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(2,1509)	1:A:110:VAL:HA	1:A:114:ASP:HB2	2	0.64	0.01	0.64
(2,133)	1:A:67:LYS:HD3	1:A:69:GLU:HB3	2	0.59	0.23	0.59
(2,137)	1:A:69:GLU:HB2	1:A:69:GLU:HA	2	0.58	0.0	0.58
(2,333)	1:A:124:ALA:HB2	1:A:76:MET:HG3	2	0.45	0.3	0.45
(2,333)	1:A:124:ALA:HB1	1:A:76:MET:HG3	2	0.45	0.3	0.45
(2,333)	1:A:124:ALA:HB3	1:A:76:MET:HG3	2	0.45	0.3	0.45
(2,589)	1:A:71:LYS:HG2	1:A:71:LYS:HA	2	0.43	0.02	0.43
(2,265)	1:A:110:VAL:HG22	1:A:114:ASP:HB2	2	0.34	0.0	0.34
(2,265)	1:A:110:VAL:HG21	1:A:114:ASP:HB2	2	0.34	0.0	0.34
(2,265)	1:A:110:VAL:HG23	1:A:114:ASP:HB2	2	0.34	0.0	0.34
(2,1544)	1:A:74:SER:HB3	1:A:71:LYS:HG2	2	0.33	0.04	0.33
(2,1544)	1:A:74:SER:HB3	1:A:75:LYS:HG2	2	0.33	0.04	0.33
(2,1544)	1:A:74:SER:HB3	1:A:78:LYS:HG3	2	0.33	0.04	0.33
(2,1544)	1:A:74:SER:HB3	1:A:97:THR:HG21	2	0.33	0.04	0.33
(2,1544)	1:A:74:SER:HB3	1:A:97:THR:HG22	2	0.33	0.04	0.33
(2,1544)	1:A:74:SER:HB3	1:A:97:THR:HG23	2	0.33	0.04	0.33
(2,807)	1:A:67:LYS:H	1:A:71:LYS:HG3	2	0.32	0.12	0.32
(2,1507)	1:A:133:SER:HB3	1:A:138:ALA:HB2	2	0.29	0.11	0.29
(2,1507)	1:A:133:SER:HB3	1:A:138:ALA:HB1	2	0.29	0.11	0.29
(2,1507)	1:A:133:SER:HB3	1:A:138:ALA:HB3	2	0.29	0.11	0.29
(2,1507)	1:A:133:SER:HB3	1:A:61:ARG:HB3	2	0.29	0.11	0.29
(2,538)	1:A:120:HIS:HB2	1:A:117:GLN:HA	2	0.24	0.03	0.24
(2,488)	1:A:74:SER:HB3	1:A:95:PHE:HE1	2	0.2	0.05	0.2
(2,488)	1:A:74:SER:HB3	1:A:95:PHE:HE2	2	0.2	0.05	0.2
(2,1426)	1:A:124:ALA:HB2	1:A:117:GLN:HB2	2	0.2	0.04	0.2
(2,1426)	1:A:124:ALA:HB2	1:A:117:GLN:HB3	2	0.2	0.04	0.2
(2,1426)	1:A:124:ALA:HB1	1:A:117:GLN:HB2	2	0.2	0.04	0.2
(2,1426)	1:A:124:ALA:HB1	1:A:117:GLN:HB3	2	0.2	0.04	0.2
(2,1426)	1:A:124:ALA:HB3	1:A:117:GLN:HB2	2	0.2	0.04	0.2
(2,1426)	1:A:124:ALA:HB3	1:A:117:GLN:HB3	2	0.2	0.04	0.2
(2,1426)	1:A:124:ALA:HB2	1:A:118:LEU:HB3	2	0.2	0.04	0.2
(2,1426)	1:A:124:ALA:HB1	1:A:118:LEU:HB3	2	0.2	0.04	0.2
(2,1426)	1:A:124:ALA:HB3	1:A:118:LEU:HB3	2	0.2	0.04	0.2
(2,1345)	1:A:107:PRO:HB3	1:A:110:VAL:HG12	2	0.18	0.03	0.18
(2,1345)	1:A:107:PRO:HB3	1:A:110:VAL:HG11	2	0.18	0.03	0.18
(2,1345)	1:A:107:PRO:HB3	1:A:110:VAL:HG13	2	0.18	0.03	0.18
(2,1345)	1:A:110:VAL:HG12	1:A:114:ASP:HB2	2	0.18	0.03	0.18
(2,1345)	1:A:110:VAL:HG11	1:A:114:ASP:HB2	2	0.18	0.03	0.18
(2,1345)	1:A:110:VAL:HG13	1:A:114:ASP:HB2	2	0.18	0.03	0.18
(2,1455)	1:A:93:ILE:HD12	1:A:78:LYS:HD3	2	0.18	0.03	0.18
(2,1455)	1:A:93:ILE:HD11	1:A:78:LYS:HD3	2	0.18	0.03	0.18
(2,1455)	1:A:93:ILE:HD13	1:A:78:LYS:HD3	2	0.18	0.03	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(2,1455)	1:A:93:ILE:HD12	1:A:85:ARG:HG2	2	0.18	0.03	0.18
(2,1455)	1:A:93:ILE:HD11	1:A:85:ARG:HG2	2	0.18	0.03	0.18
(2,1455)	1:A:93:ILE:HD13	1:A:85:ARG:HG2	2	0.18	0.03	0.18
(2,1380)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:128:VAL:HG22	2	0.18	0.03	0.18
(2,1380)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:128:VAL:HG21	2	0.18	0.03	0.18
(2,1380)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:128:VAL:HG23	2	0.18	0.03	0.18
(2,1380)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:128:VAL:HG12	2	0.18	0.03	0.18
(2,1380)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:128:VAL:HG11	2	0.18	0.03	0.18
(2,1380)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:128:VAL:HG13	2	0.18	0.03	0.18
(2,1380)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:128:VAL:HG22	2	0.18	0.03	0.18
(2,1380)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:128:VAL:HG21	2	0.18	0.03	0.18
(2,1380)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:128:VAL:HG23	2	0.18	0.03	0.18
(2,1380)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:128:VAL:HG12	2	0.18	0.03	0.18
(2,1380)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:128:VAL:HG11	2	0.18	0.03	0.18
(2,1380)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:128:VAL:HG13	2	0.18	0.03	0.18
(2,1380)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:128:VAL:HG22	2	0.18	0.03	0.18
(2,1380)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:128:VAL:HG21	2	0.18	0.03	0.18
(2,1380)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:128:VAL:HG23	2	0.18	0.03	0.18
(2,1380)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:128:VAL:HG12	2	0.18	0.03	0.18
(2,1380)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:128:VAL:HG11	2	0.18	0.03	0.18
(2,1380)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:128:VAL:HG13	2	0.18	0.03	0.18
(2,1380)	1:A:129:VAL:HG12	1:A:64:VAL:HG12	2	0.18	0.03	0.18
(2,1380)	1:A:129:VAL:HG12	1:A:64:VAL:HG11	2	0.18	0.03	0.18
(2,1380)	1:A:129:VAL:HG12	1:A:64:VAL:HG13	2	0.18	0.03	0.18
(2,1380)	1:A:129:VAL:HG11	1:A:64:VAL:HG12	2	0.18	0.03	0.18
(2,1380)	1:A:129:VAL:HG11	1:A:64:VAL:HG11	2	0.18	0.03	0.18
(2,1380)	1:A:129:VAL:HG11	1:A:64:VAL:HG13	2	0.18	0.03	0.18
(2,1380)	1:A:129:VAL:HG13	1:A:64:VAL:HG12	2	0.18	0.03	0.18
(2,1380)	1:A:129:VAL:HG13	1:A:64:VAL:HG11	2	0.18	0.03	0.18
(2,1380)	1:A:129:VAL:HG13	1:A:64:VAL:HG13	2	0.18	0.03	0.18
(2,1269)	1:A:78:LYS:HD2	1:A:75:LYS:HE2	2	0.17	0.04	0.17
(2,1269)	1:A:78:LYS:HD2	1:A:75:LYS:HE3	2	0.17	0.04	0.17
(2,1269)	1:A:78:LYS:HD2	1:A:75:LYS:H	2	0.17	0.04	0.17
(2,1269)	1:A:78:LYS:HD3	1:A:75:LYS:HE3	2	0.17	0.04	0.17
(2,1752)	1:A:74:SER:HA	1:A:78:LYS:HE2	2	0.16	0.01	0.16
(2,1752)	1:A:78:LYS:HE2	1:A:75:LYS:HA	2	0.16	0.01	0.16
(2,642)	1:A:113:HIS:HB2	1:A:113:HIS:HD2	2	0.16	0.03	0.16
(2,257)	1:A:89:LEU:HD22	1:A:114:ASP:HB3	2	0.16	0.01	0.16
(2,257)	1:A:89:LEU:HD21	1:A:114:ASP:HB3	2	0.16	0.01	0.16
(2,257)	1:A:89:LEU:HD23	1:A:114:ASP:HB3	2	0.16	0.01	0.16
(2,893)	1:A:115:MET:H	1:A:114:ASP:HB3	2	0.16	0.02	0.16
(2,343)	1:A:86:ILE:HG22	1:A:91:GLY:HA2	2	0.15	0.02	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

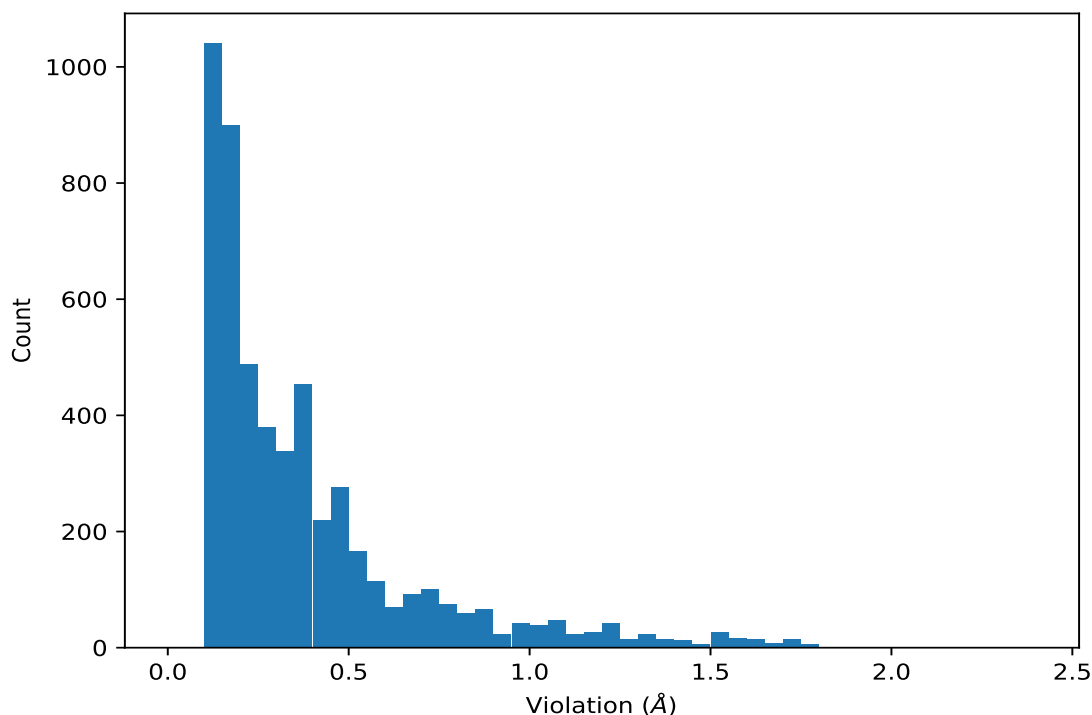
Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(2,343)	1:A:86:ILE:HG21	1:A:91:GLY:HA2	2	0.15	0.02	0.15
(2,343)	1:A:86:ILE:HG23	1:A:91:GLY:HA2	2	0.15	0.02	0.15
(2,1708)	1:A:91:GLY:HA3	1:A:58:GLU:HA	2	0.15	0.02	0.15
(2,1708)	1:A:91:GLY:HA3	1:A:60:THR:HB	2	0.15	0.02	0.15
(2,1708)	1:A:91:GLY:HA3	1:A:89:LEU:HA	2	0.15	0.02	0.15
(2,1541)	1:A:81:SER:HB2	1:A:81:SER:HA	2	0.14	0.02	0.14
(2,1541)	1:A:81:SER:HB3	1:A:81:SER:HA	2	0.14	0.02	0.14
(2,1178)	1:A:86:ILE:HB	1:A:82:PHE:HD1	2	0.12	0.01	0.12
(2,1178)	1:A:86:ILE:HB	1:A:82:PHE:HD2	2	0.12	0.01	0.12
(2,1178)	1:A:85:ARG:H	1:A:86:ILE:HB	2	0.12	0.01	0.12
(2,1241)	1:A:120:HIS:HB3	1:A:119:LEU:HD12	2	0.12	0.02	0.12
(2,1241)	1:A:120:HIS:HB3	1:A:119:LEU:HD11	2	0.12	0.02	0.12
(2,1241)	1:A:120:HIS:HB3	1:A:119:LEU:HD13	2	0.12	0.02	0.12
(2,1241)	1:A:120:HIS:HB3	1:A:123:LEU:HD22	2	0.12	0.02	0.12
(2,1241)	1:A:120:HIS:HB3	1:A:123:LEU:HD21	2	0.12	0.02	0.12
(2,1241)	1:A:120:HIS:HB3	1:A:123:LEU:HD23	2	0.12	0.02	0.12
(2,331)	1:A:125:ALA:HB2	1:A:121:ASP:HB3	2	0.12	0.01	0.12
(2,331)	1:A:125:ALA:HB1	1:A:121:ASP:HB3	2	0.12	0.01	0.12
(2,331)	1:A:125:ALA:HB3	1:A:121:ASP:HB3	2	0.12	0.01	0.12
(2,956)	1:A:101:VAL:H	1:A:65:THR:HG21	2	0.12	0.01	0.12
(2,956)	1:A:101:VAL:H	1:A:65:THR:HG22	2	0.12	0.01	0.12
(2,956)	1:A:101:VAL:H	1:A:65:THR:HG23	2	0.12	0.01	0.12
(2,1249)	1:A:117:GLN:HB2	1:A:113:HIS:HA	2	0.12	0.01	0.12
(2,1249)	1:A:117:GLN:HB3	1:A:113:HIS:HA	2	0.12	0.01	0.12
(2,1249)	1:A:117:GLN:HB2	1:A:114:ASP:HA	2	0.12	0.01	0.12
(2,1249)	1:A:117:GLN:HB3	1:A:114:ASP:HA	2	0.12	0.01	0.12
(2,817)	1:A:110:VAL:H	1:A:107:PRO:HG2	2	0.12	0.0	0.12

¹Number of violated models, ²Standard deviation

9.5 All violated distance restraints [i](#)

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

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



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

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

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,4)	1:A:58:GLU:HG2	1:A:91:GLY:HA3	10	2.37
(1,4)	1:A:58:GLU:HG2	1:A:91:GLY:HA3	2	1.97
(1,4)	1:A:58:GLU:HG2	1:A:91:GLY:HA3	3	1.9
(2,402)	1:A:84:THR:HB	1:A:88:GLU:HG3	7	1.83
(2,88)	1:A:63:MET:HB2	1:A:132:ASP:HB2	8	1.77
(2,709)	1:A:119:LEU:HB3	1:A:116:ASP:HA	6	1.77
(2,709)	1:A:119:LEU:HB3	1:A:116:ASP:HA	7	1.77
(2,709)	1:A:119:LEU:HB3	1:A:116:ASP:HA	9	1.76
(1,15)	1:A:136:LYS:HD3	1:A:107:PRO:HB2	2	1.76
(2,846)	1:A:85:ARG:H	1:A:86:ILE:HG13	9	1.75
(2,846)	1:A:85:ARG:H	1:A:86:ILE:HG13	7	1.74
(2,131)	1:A:136:LYS:HD3	1:A:58:GLU:HG3	3	1.74
(2,846)	1:A:85:ARG:H	1:A:86:ILE:HG13	3	1.73
(2,846)	1:A:85:ARG:H	1:A:86:ILE:HG13	5	1.73
(2,709)	1:A:119:LEU:HB3	1:A:116:ASP:HA	1	1.73
(2,709)	1:A:119:LEU:HB3	1:A:116:ASP:HA	5	1.73

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,709)	1:A:119:LEU:HB3	1:A:116:ASP:HA	8	1.73
(2,709)	1:A:119:LEU:HB3	1:A:116:ASP:HA	4	1.72
(2,846)	1:A:85:ARG:H	1:A:86:ILE:HG13	1	1.71
(2,846)	1:A:85:ARG:H	1:A:86:ILE:HG13	6	1.71
(2,846)	1:A:85:ARG:H	1:A:86:ILE:HG13	8	1.71
(2,846)	1:A:85:ARG:H	1:A:86:ILE:HG13	10	1.71
(2,709)	1:A:119:LEU:HB3	1:A:116:ASP:HA	3	1.71
(1,15)	1:A:136:LYS:HD3	1:A:107:PRO:HB2	1	1.71
(2,846)	1:A:85:ARG:H	1:A:86:ILE:HG13	2	1.7
(2,186)	1:A:96:LEU:HG	1:A:103:MET:HG2	5	1.68
(2,846)	1:A:85:ARG:H	1:A:86:ILE:HG13	4	1.66
(2,143)	1:A:93:ILE:HG13	1:A:82:PHE:HB2	6	1.66
(1,46)	1:A:108:LYS:HE3	1:A:59:MET:HA	8	1.66
(2,86)	1:A:63:MET:HB2	1:A:132:ASP:HB3	1	1.65
(2,403)	1:A:84:THR:HA	1:A:87:GLU:HB3	8	1.65
(2,143)	1:A:93:ILE:HG13	1:A:82:PHE:HB2	7	1.65
(2,88)	1:A:63:MET:HB2	1:A:132:ASP:HB2	7	1.64
(2,186)	1:A:96:LEU:HG	1:A:103:MET:HG2	6	1.64
(2,403)	1:A:84:THR:HA	1:A:87:GLU:HB3	7	1.63
(2,403)	1:A:84:THR:HA	1:A:87:GLU:HB3	5	1.62
(2,1842)	1:A:85:ARG:H	1:A:87:GLU:HB3	1	1.62
(2,1842)	1:A:85:ARG:H	1:A:88:GLU:HB3	1	1.62
(1,15)	1:A:136:LYS:HD3	1:A:107:PRO:HB2	6	1.62
(2,403)	1:A:84:THR:HA	1:A:87:GLU:HB3	10	1.61
(2,403)	1:A:84:THR:HA	1:A:87:GLU:HB3	6	1.6
(2,1842)	1:A:85:ARG:H	1:A:87:GLU:HB3	8	1.6
(2,1842)	1:A:85:ARG:H	1:A:88:GLU:HB3	8	1.6
(2,143)	1:A:93:ILE:HG13	1:A:82:PHE:HB2	1	1.6
(2,143)	1:A:93:ILE:HG13	1:A:82:PHE:HB2	4	1.6
(2,143)	1:A:93:ILE:HG13	1:A:82:PHE:HB2	10	1.6
(2,403)	1:A:84:THR:HA	1:A:87:GLU:HB3	3	1.59
(2,1842)	1:A:85:ARG:H	1:A:87:GLU:HB3	3	1.59
(2,1842)	1:A:85:ARG:H	1:A:88:GLU:HB3	3	1.59
(2,709)	1:A:119:LEU:HB3	1:A:116:ASP:HA	2	1.58
(2,709)	1:A:119:LEU:HB3	1:A:116:ASP:HA	10	1.58
(2,403)	1:A:84:THR:HA	1:A:87:GLU:HB3	2	1.58
(2,1842)	1:A:85:ARG:H	1:A:87:GLU:HB3	6	1.58
(2,1842)	1:A:85:ARG:H	1:A:88:GLU:HB3	6	1.58
(2,143)	1:A:93:ILE:HG13	1:A:82:PHE:HB2	3	1.58
(2,143)	1:A:93:ILE:HG13	1:A:82:PHE:HB2	5	1.58
(2,86)	1:A:63:MET:HB2	1:A:132:ASP:HB3	7	1.57
(2,403)	1:A:84:THR:HA	1:A:87:GLU:HB3	1	1.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,597)	1:A:61:ARG:HA	1:A:103:MET:HG3	8	1.55
(2,1842)	1:A:85:ARG:H	1:A:87:GLU:HB3	2	1.55
(2,1842)	1:A:85:ARG:H	1:A:88:GLU:HB3	2	1.55
(2,143)	1:A:93:ILE:HG13	1:A:82:PHE:HB2	2	1.55
(2,139)	1:A:71:LYS:HD3	1:A:74:SER:HA	2	1.55
(2,88)	1:A:63:MET:HB2	1:A:132:ASP:HB2	9	1.54
(2,1343)	1:A:137:LEU:HD12	1:A:136:LYS:HE2	10	1.54
(2,1343)	1:A:137:LEU:HD11	1:A:136:LYS:HE2	10	1.54
(2,1343)	1:A:137:LEU:HD13	1:A:136:LYS:HE2	10	1.54
(2,1343)	1:A:137:LEU:HD12	1:A:136:LYS:HE3	10	1.54
(2,1343)	1:A:137:LEU:HD11	1:A:136:LYS:HE3	10	1.54
(2,1343)	1:A:137:LEU:HD13	1:A:136:LYS:HE3	10	1.54
(2,1343)	1:A:106:LEU:HD22	1:A:113:HIS:HB2	10	1.54
(2,1343)	1:A:106:LEU:HD21	1:A:113:HIS:HB2	10	1.54
(2,1343)	1:A:106:LEU:HD23	1:A:113:HIS:HB2	10	1.54
(1,46)	1:A:108:LYS:HE3	1:A:59:MET:HA	10	1.54
(2,568)	1:A:94:SER:HA	1:A:96:LEU:HD12	7	1.53
(2,568)	1:A:94:SER:HA	1:A:96:LEU:HD11	7	1.53
(2,568)	1:A:94:SER:HA	1:A:96:LEU:HD13	7	1.53
(2,1908)	1:A:84:THR:H	1:A:87:GLU:HG2	7	1.53
(2,1908)	1:A:84:THR:H	1:A:88:GLU:HG3	7	1.53
(2,143)	1:A:93:ILE:HG13	1:A:82:PHE:HB2	9	1.52
(2,139)	1:A:71:LYS:HD3	1:A:74:SER:HA	3	1.52
(1,7)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:59:MET:HG3	4	1.52
(2,2)	1:A:95:PHE:HB2	1:A:78:LYS:HD3	9	1.51
(2,143)	1:A:93:ILE:HG13	1:A:82:PHE:HB2	8	1.51
(2,403)	1:A:84:THR:HA	1:A:87:GLU:HB3	9	1.5
(2,1842)	1:A:85:ARG:H	1:A:87:GLU:HB3	7	1.5
(2,1842)	1:A:85:ARG:H	1:A:88:GLU:HB3	7	1.5
(2,139)	1:A:71:LYS:HD3	1:A:74:SER:HA	6	1.5
(1,15)	1:A:136:LYS:HD3	1:A:107:PRO:HB2	3	1.5
(1,7)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:59:MET:HG3	10	1.48
(1,7)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:59:MET:HG3	2	1.47
(1,14)	1:A:69:GLU:HB3	1:A:65:THR:HB	4	1.47
(2,1842)	1:A:85:ARG:H	1:A:87:GLU:HB3	5	1.46
(2,1842)	1:A:85:ARG:H	1:A:88:GLU:HB3	5	1.46
(1,15)	1:A:136:LYS:HD3	1:A:107:PRO:HB2	8	1.45
(2,221)	1:A:71:LYS:HG3	1:A:67:LYS:HA	5	1.44
(2,88)	1:A:63:MET:HB2	1:A:132:ASP:HB2	5	1.43
(2,1268)	1:A:78:LYS:HD3	1:A:74:SER:HB3	2	1.42
(2,1268)	1:A:78:LYS:HD2	1:A:74:SER:HB3	2	1.42
(2,597)	1:A:61:ARG:HA	1:A:103:MET:HG3	6	1.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1842)	1:A:85:ARG:H	1:A:87:GLU:HB3	4	1.41
(2,1842)	1:A:85:ARG:H	1:A:88:GLU:HB3	4	1.41
(2,1268)	1:A:78:LYS:HD3	1:A:74:SER:HB3	1	1.41
(2,1268)	1:A:78:LYS:HD2	1:A:74:SER:HB3	1	1.41
(2,403)	1:A:84:THR:HA	1:A:87:GLU:HB3	4	1.4
(2,1268)	1:A:78:LYS:HD3	1:A:74:SER:HB3	3	1.4
(2,1268)	1:A:78:LYS:HD2	1:A:74:SER:HB3	3	1.4
(1,7)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:59:MET:HG3	3	1.4
(2,139)	1:A:71:LYS:HD3	1:A:74:SER:HA	5	1.39
(2,139)	1:A:71:LYS:HD3	1:A:74:SER:HA	7	1.39
(2,86)	1:A:63:MET:HB2	1:A:132:ASP:HB3	8	1.37
(2,528)	1:A:78:LYS:HG2	1:A:75:LYS:HA	7	1.37
(2,221)	1:A:71:LYS:HG3	1:A:67:LYS:HA	8	1.37
(1,15)	1:A:136:LYS:HD3	1:A:107:PRO:HB2	10	1.37
(2,1842)	1:A:85:ARG:H	1:A:87:GLU:HB3	10	1.36
(2,1842)	1:A:85:ARG:H	1:A:88:GLU:HB3	10	1.36
(2,1256)	1:A:75:LYS:HD3	1:A:78:LYS:HE3	7	1.36
(2,1256)	1:A:136:LYS:HD2	1:A:59:MET:HG3	7	1.36
(1,14)	1:A:69:GLU:HB3	1:A:65:THR:HB	7	1.36
(2,1530)	1:A:129:VAL:HA	1:A:119:LEU:HB2	7	1.35
(2,1530)	1:A:129:VAL:HA	1:A:61:ARG:HG2	7	1.35
(2,1268)	1:A:78:LYS:HD3	1:A:74:SER:HB3	6	1.35
(2,1268)	1:A:78:LYS:HD2	1:A:74:SER:HB3	6	1.35
(2,685)	1:A:69:GLU:HA	1:A:67:LYS:HE3	1	1.34
(2,1842)	1:A:85:ARG:H	1:A:87:GLU:HB3	9	1.34
(2,1842)	1:A:85:ARG:H	1:A:88:GLU:HB3	9	1.34
(1,15)	1:A:136:LYS:HD3	1:A:107:PRO:HB2	4	1.34
(2,72)	1:A:59:MET:HG3	1:A:136:LYS:HB3	4	1.33
(2,660)	1:A:91:GLY:HA2	1:A:86:ILE:HD12	3	1.33
(2,660)	1:A:91:GLY:HA2	1:A:86:ILE:HD11	3	1.33
(2,660)	1:A:91:GLY:HA2	1:A:86:ILE:HD13	3	1.33
(2,6)	1:A:72:ASN:HB2	1:A:126:GLY:HA2	6	1.33
(2,186)	1:A:96:LEU:HG	1:A:103:MET:HG2	8	1.33
(2,1781)	1:A:66:GLU:HG3	1:A:73:PHE:HB2	10	1.33
(2,1781)	1:A:87:GLU:HG2	1:A:85:ARG:HD2	10	1.33
(2,88)	1:A:63:MET:HB2	1:A:132:ASP:HB2	2	1.32
(2,139)	1:A:71:LYS:HD3	1:A:74:SER:HA	8	1.32
(2,1268)	1:A:78:LYS:HD3	1:A:74:SER:HB3	7	1.32
(2,1268)	1:A:78:LYS:HD2	1:A:74:SER:HB3	7	1.32
(1,15)	1:A:136:LYS:HD3	1:A:107:PRO:HB2	5	1.32
(2,86)	1:A:63:MET:HB2	1:A:132:ASP:HB3	2	1.31
(2,86)	1:A:63:MET:HB2	1:A:132:ASP:HB3	10	1.31

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,660)	1:A:91:GLY:HA2	1:A:86:ILE:HD12	9	1.31
(2,660)	1:A:91:GLY:HA2	1:A:86:ILE:HD11	9	1.31
(2,660)	1:A:91:GLY:HA2	1:A:86:ILE:HD13	9	1.31
(2,6)	1:A:72:ASN:HB2	1:A:126:GLY:HA2	3	1.3
(2,394)	1:A:99:THR:HB	1:A:98:GLU:HB3	5	1.29
(2,1530)	1:A:129:VAL:HA	1:A:119:LEU:HB2	5	1.29
(2,1530)	1:A:129:VAL:HA	1:A:61:ARG:HG2	5	1.29
(1,7)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:59:MET:HG3	8	1.29
(1,7)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:59:MET:HG3	1	1.28
(2,585)	1:A:66:GLU:HG3	1:A:71:LYS:HA	10	1.27
(2,86)	1:A:63:MET:HB2	1:A:132:ASP:HB3	6	1.25
(2,660)	1:A:91:GLY:HA2	1:A:86:ILE:HD12	2	1.25
(2,660)	1:A:91:GLY:HA2	1:A:86:ILE:HD11	2	1.25
(2,660)	1:A:91:GLY:HA2	1:A:86:ILE:HD13	2	1.25
(2,1579)	1:A:104:ILE:HA	1:A:105:GLU:HG2	4	1.25
(2,1579)	1:A:65:THR:HA	1:A:69:GLU:HB3	4	1.25
(2,1158)	1:A:72:ASN:HB2	1:A:70:SER:HB2	6	1.25
(2,1158)	1:A:72:ASN:HB2	1:A:70:SER:HB3	6	1.25
(2,59)	1:A:105:GLU:HG3	1:A:59:MET:HG3	4	1.24
(2,528)	1:A:78:LYS:HG2	1:A:75:LYS:HA	5	1.24
(2,1530)	1:A:129:VAL:HA	1:A:119:LEU:HB2	1	1.24
(2,1530)	1:A:129:VAL:HA	1:A:61:ARG:HG2	1	1.24
(1,7)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:59:MET:HG3	9	1.24
(2,88)	1:A:63:MET:HB2	1:A:132:ASP:HB2	3	1.23
(2,660)	1:A:91:GLY:HA2	1:A:86:ILE:HD12	8	1.23
(2,660)	1:A:91:GLY:HA2	1:A:86:ILE:HD11	8	1.23
(2,660)	1:A:91:GLY:HA2	1:A:86:ILE:HD13	8	1.23
(2,1268)	1:A:78:LYS:HD3	1:A:74:SER:HB3	10	1.23
(2,1268)	1:A:78:LYS:HD2	1:A:74:SER:HB3	10	1.23
(2,660)	1:A:91:GLY:HA2	1:A:86:ILE:HD12	4	1.22
(2,660)	1:A:91:GLY:HA2	1:A:86:ILE:HD11	4	1.22
(2,660)	1:A:91:GLY:HA2	1:A:86:ILE:HD13	4	1.22
(2,660)	1:A:91:GLY:HA2	1:A:86:ILE:HD12	10	1.22
(2,660)	1:A:91:GLY:HA2	1:A:86:ILE:HD11	10	1.22
(2,660)	1:A:91:GLY:HA2	1:A:86:ILE:HD13	10	1.22
(2,1579)	1:A:104:ILE:HA	1:A:105:GLU:HG2	7	1.22
(2,1579)	1:A:65:THR:HA	1:A:69:GLU:HB3	7	1.22
(2,1530)	1:A:129:VAL:HA	1:A:119:LEU:HB2	2	1.22
(2,1530)	1:A:129:VAL:HA	1:A:61:ARG:HG2	2	1.22
(2,1530)	1:A:129:VAL:HA	1:A:119:LEU:HB2	10	1.22
(2,1530)	1:A:129:VAL:HA	1:A:61:ARG:HG2	10	1.22
(2,394)	1:A:99:THR:HB	1:A:98:GLU:HB3	3	1.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,394)	1:A:99:THR:HB	1:A:98:GLU:HB3	7	1.21
(2,1248)	1:A:67:LYS:HD3	1:A:69:GLU:HB3	4	1.21
(2,1248)	1:A:122:ILE:HG13	1:A:85:ARG:HG3	4	1.21
(2,1170)	1:A:98:GLU:HG3	1:A:96:LEU:HD22	8	1.21
(2,1170)	1:A:98:GLU:HG3	1:A:96:LEU:HD21	8	1.21
(2,1170)	1:A:98:GLU:HG3	1:A:96:LEU:HD23	8	1.21
(2,1170)	1:A:98:GLU:HG3	1:A:96:LEU:HD12	8	1.21
(2,1170)	1:A:98:GLU:HG3	1:A:96:LEU:HD11	8	1.21
(2,1170)	1:A:98:GLU:HG3	1:A:96:LEU:HD13	8	1.21
(2,1170)	1:A:98:GLU:HG3	1:A:101:VAL:HG22	8	1.21
(2,1170)	1:A:98:GLU:HG3	1:A:101:VAL:HG21	8	1.21
(2,1170)	1:A:98:GLU:HG3	1:A:101:VAL:HG23	8	1.21
(2,1170)	1:A:98:GLU:HG3	1:A:101:VAL:HG12	8	1.21
(2,1170)	1:A:98:GLU:HG3	1:A:101:VAL:HG11	8	1.21
(2,1170)	1:A:98:GLU:HG3	1:A:101:VAL:HG13	8	1.21
(2,660)	1:A:91:GLY:HA2	1:A:86:ILE:HD12	7	1.2
(2,660)	1:A:91:GLY:HA2	1:A:86:ILE:HD11	7	1.2
(2,660)	1:A:91:GLY:HA2	1:A:86:ILE:HD13	7	1.2
(1,15)	1:A:136:LYS:HD3	1:A:107:PRO:HB2	9	1.2
(2,1530)	1:A:129:VAL:HA	1:A:119:LEU:HB2	6	1.19
(2,1530)	1:A:129:VAL:HA	1:A:61:ARG:HG2	6	1.19
(2,134)	1:A:120:HIS:HB3	1:A:119:LEU:HB3	7	1.19
(2,134)	1:A:120:HIS:HB3	1:A:119:LEU:HB3	9	1.19
(2,1325)	1:A:136:LYS:HG3	1:A:58:GLU:HG2	10	1.19
(2,1325)	1:A:71:LYS:HG3	1:A:68:GLN:HB3	10	1.19
(2,1325)	1:A:108:LYS:HG3	1:A:115:MET:HB3	10	1.19
(2,1158)	1:A:72:ASN:HB2	1:A:70:SER:HB2	3	1.19
(2,1158)	1:A:72:ASN:HB2	1:A:70:SER:HB3	3	1.19
(1,7)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:59:MET:HG3	7	1.19
(2,660)	1:A:91:GLY:HA2	1:A:86:ILE:HD12	1	1.18
(2,660)	1:A:91:GLY:HA2	1:A:86:ILE:HD11	1	1.18
(2,660)	1:A:91:GLY:HA2	1:A:86:ILE:HD13	1	1.18
(2,134)	1:A:120:HIS:HB3	1:A:119:LEU:HB3	8	1.18
(2,1056)	1:A:113:HIS:H	1:A:114:ASP:HB3	8	1.18
(2,394)	1:A:99:THR:HB	1:A:98:GLU:HB3	10	1.17
(2,134)	1:A:120:HIS:HB3	1:A:119:LEU:HB3	6	1.17
(2,1158)	1:A:72:ASN:HB2	1:A:70:SER:HB2	2	1.17
(2,1158)	1:A:72:ASN:HB2	1:A:70:SER:HB3	2	1.17
(1,7)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:59:MET:HG3	6	1.17
(1,29)	1:A:82:PHE:HA	1:A:86:ILE:HG13	9	1.17
(2,167)	1:A:61:ARG:HG2	1:A:105:GLU:HA	7	1.16
(2,134)	1:A:120:HIS:HB3	1:A:119:LEU:HB3	1	1.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,134)	1:A:120:HIS:HB3	1:A:119:LEU:HB3	4	1.16
(2,660)	1:A:91:GLY:HA2	1:A:86:ILE:HD12	6	1.15
(2,660)	1:A:91:GLY:HA2	1:A:86:ILE:HD11	6	1.15
(2,660)	1:A:91:GLY:HA2	1:A:86:ILE:HD13	6	1.15
(2,394)	1:A:99:THR:HB	1:A:98:GLU:HB3	4	1.14
(2,394)	1:A:99:THR:HB	1:A:98:GLU:HB3	9	1.14
(2,660)	1:A:91:GLY:HA2	1:A:86:ILE:HD12	5	1.13
(2,660)	1:A:91:GLY:HA2	1:A:86:ILE:HD11	5	1.13
(2,660)	1:A:91:GLY:HA2	1:A:86:ILE:HD13	5	1.13
(2,586)	1:A:71:LYS:HA	1:A:66:GLU:HB2	2	1.13
(2,134)	1:A:120:HIS:HB3	1:A:119:LEU:HB3	3	1.13
(2,134)	1:A:120:HIS:HB3	1:A:119:LEU:HB3	5	1.13
(2,1056)	1:A:113:HIS:H	1:A:114:ASP:HB3	5	1.13
(2,86)	1:A:63:MET:HB2	1:A:132:ASP:HB3	4	1.12
(2,6)	1:A:72:ASN:HB2	1:A:126:GLY:HA2	2	1.12
(2,59)	1:A:105:GLU:HG3	1:A:59:MET:HG3	7	1.12
(2,1579)	1:A:104:ILE:HA	1:A:105:GLU:HG2	3	1.12
(2,1579)	1:A:65:THR:HA	1:A:69:GLU:HB3	3	1.12
(2,1056)	1:A:113:HIS:H	1:A:114:ASP:HB3	9	1.12
(2,59)	1:A:105:GLU:HG3	1:A:59:MET:HG3	8	1.1
(2,1530)	1:A:129:VAL:HA	1:A:119:LEU:HB2	3	1.1
(2,1530)	1:A:129:VAL:HA	1:A:61:ARG:HG2	3	1.1
(2,1530)	1:A:129:VAL:HA	1:A:119:LEU:HB2	8	1.1
(2,1530)	1:A:129:VAL:HA	1:A:61:ARG:HG2	8	1.1
(2,131)	1:A:136:LYS:HD3	1:A:58:GLU:HG3	6	1.1
(1,7)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:59:MET:HG3	5	1.1
(1,29)	1:A:82:PHE:HA	1:A:86:ILE:HG13	5	1.1
(2,88)	1:A:63:MET:HB2	1:A:132:ASP:HB2	10	1.09
(2,597)	1:A:61:ARG:HA	1:A:103:MET:HG3	5	1.09
(2,59)	1:A:105:GLU:HG3	1:A:59:MET:HG3	9	1.09
(2,1296)	1:A:85:ARG:H	1:A:86:ILE:HG13	9	1.09
(2,1296)	1:A:86:ILE:HG13	1:A:82:PHE:HD1	9	1.09
(2,1296)	1:A:86:ILE:HG13	1:A:82:PHE:HD2	9	1.09
(2,1174)	1:A:66:GLU:HG3	1:A:71:LYS:HB2	2	1.09
(2,1174)	1:A:66:GLU:HG3	1:A:71:LYS:HD3	2	1.09
(2,1056)	1:A:113:HIS:H	1:A:114:ASP:HB3	4	1.09
(1,29)	1:A:82:PHE:HA	1:A:86:ILE:HG13	10	1.09
(2,679)	1:A:89:LEU:HB3	1:A:114:ASP:HB2	8	1.08
(2,394)	1:A:99:THR:HB	1:A:98:GLU:HB3	1	1.08
(2,1741)	1:A:136:LYS:HE2	1:A:136:LYS:HA	5	1.08
(2,1741)	1:A:67:LYS:HE2	1:A:70:SER:HA	5	1.08
(2,1741)	1:A:71:LYS:HE2	1:A:72:ASN:HA	5	1.08

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1741)	1:A:75:LYS:HE2	1:A:79:SER:HA	5	1.08
(2,1530)	1:A:129:VAL:HA	1:A:119:LEU:HB2	9	1.08
(2,1530)	1:A:129:VAL:HA	1:A:61:ARG:HG2	9	1.08
(2,131)	1:A:136:LYS:HD3	1:A:58:GLU:HG3	8	1.08
(2,1238)	1:A:134:GLU:HB3	1:A:131:LEU:HA	3	1.08
(2,1238)	1:A:134:GLU:HB3	1:A:132:ASP:HA	3	1.08
(2,1177)	1:A:58:GLU:HG2	1:A:107:PRO:HD2	10	1.08
(2,1177)	1:A:58:GLU:HG2	1:A:107:PRO:HD3	10	1.08
(2,1056)	1:A:113:HIS:H	1:A:114:ASP:HB3	7	1.08
(1,24)	1:A:75:LYS:HG3	1:A:78:LYS:HE3	4	1.08
(2,1579)	1:A:104:ILE:HA	1:A:105:GLU:HG2	9	1.07
(2,1579)	1:A:65:THR:HA	1:A:69:GLU:HB3	9	1.07
(2,1579)	1:A:104:ILE:HA	1:A:105:GLU:HG2	10	1.07
(2,1579)	1:A:65:THR:HA	1:A:69:GLU:HB3	10	1.07
(2,609)	1:A:96:LEU:HA	1:A:96:LEU:HD12	7	1.06
(2,609)	1:A:96:LEU:HA	1:A:96:LEU:HD11	7	1.06
(2,609)	1:A:96:LEU:HA	1:A:96:LEU:HD13	7	1.06
(2,586)	1:A:71:LYS:HA	1:A:66:GLU:HB2	1	1.06
(2,1579)	1:A:104:ILE:HA	1:A:105:GLU:HG2	6	1.06
(2,1579)	1:A:65:THR:HA	1:A:69:GLU:HB3	6	1.06
(2,1296)	1:A:85:ARG:H	1:A:86:ILE:HG13	8	1.06
(2,1296)	1:A:86:ILE:HG13	1:A:82:PHE:HD1	8	1.06
(2,1296)	1:A:86:ILE:HG13	1:A:82:PHE:HD2	8	1.06
(2,1174)	1:A:66:GLU:HG3	1:A:71:LYS:HB2	3	1.06
(2,1174)	1:A:66:GLU:HG3	1:A:71:LYS:HD3	3	1.06
(2,679)	1:A:89:LEU:HB3	1:A:114:ASP:HB2	6	1.05
(2,1624)	1:A:76:MET:HG3	1:A:118:LEU:HA	6	1.05
(2,1624)	1:A:118:LEU:HA	1:A:114:ASP:HB2	6	1.05
(2,134)	1:A:120:HIS:HB3	1:A:119:LEU:HB3	2	1.05
(2,1174)	1:A:66:GLU:HG3	1:A:71:LYS:HB2	6	1.05
(2,1174)	1:A:66:GLU:HG3	1:A:71:LYS:HD3	6	1.05
(2,1056)	1:A:113:HIS:H	1:A:114:ASP:HB3	1	1.05
(2,59)	1:A:105:GLU:HG3	1:A:59:MET:HG3	5	1.04
(2,394)	1:A:99:THR:HB	1:A:98:GLU:HB3	6	1.04
(2,1579)	1:A:104:ILE:HA	1:A:105:GLU:HG2	5	1.04
(2,1579)	1:A:65:THR:HA	1:A:69:GLU:HB3	5	1.04
(2,1530)	1:A:129:VAL:HA	1:A:119:LEU:HB2	4	1.04
(2,1530)	1:A:129:VAL:HA	1:A:61:ARG:HG2	4	1.04
(2,1296)	1:A:85:ARG:H	1:A:86:ILE:HG13	4	1.04
(2,1296)	1:A:86:ILE:HG13	1:A:82:PHE:HD1	4	1.04
(2,1296)	1:A:86:ILE:HG13	1:A:82:PHE:HD2	4	1.04
(2,1268)	1:A:78:LYS:HD3	1:A:74:SER:HB3	4	1.04

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1268)	1:A:78:LYS:HD2	1:A:74:SER:HB3	4	1.04
(1,29)	1:A:82:PHE:HA	1:A:86:ILE:HG13	3	1.04
(1,29)	1:A:82:PHE:HA	1:A:86:ILE:HG13	8	1.04
(2,86)	1:A:63:MET:HB2	1:A:132:ASP:HB3	5	1.03
(2,1296)	1:A:85:ARG:H	1:A:86:ILE:HG13	3	1.03
(2,1296)	1:A:86:ILE:HG13	1:A:82:PHE:HD1	3	1.03
(2,1296)	1:A:86:ILE:HG13	1:A:82:PHE:HD2	3	1.03
(2,1056)	1:A:113:HIS:H	1:A:114:ASP:HB3	3	1.03
(1,46)	1:A:108:LYS:HE3	1:A:59:MET:HA	9	1.03
(1,29)	1:A:82:PHE:HA	1:A:86:ILE:HG13	4	1.03
(1,29)	1:A:82:PHE:HA	1:A:86:ILE:HG13	6	1.03
(2,1579)	1:A:104:ILE:HA	1:A:105:GLU:HG2	1	1.02
(2,1579)	1:A:65:THR:HA	1:A:69:GLU:HB3	1	1.02
(2,1296)	1:A:85:ARG:H	1:A:86:ILE:HG13	5	1.02
(2,1296)	1:A:86:ILE:HG13	1:A:82:PHE:HD1	5	1.02
(2,1296)	1:A:86:ILE:HG13	1:A:82:PHE:HD2	5	1.02
(1,29)	1:A:82:PHE:HA	1:A:86:ILE:HG13	2	1.02
(2,586)	1:A:71:LYS:HA	1:A:66:GLU:HB2	6	1.01
(2,88)	1:A:63:MET:HB2	1:A:132:ASP:HB2	4	1.0
(2,86)	1:A:63:MET:HB2	1:A:132:ASP:HB3	9	1.0
(2,679)	1:A:89:LEU:HB3	1:A:114:ASP:HB2	3	1.0
(2,623)	1:A:59:MET:HA	1:A:107:PRO:HB2	2	1.0
(2,1296)	1:A:85:ARG:H	1:A:86:ILE:HG13	7	1.0
(2,1296)	1:A:86:ILE:HG13	1:A:82:PHE:HD1	7	1.0
(2,1296)	1:A:86:ILE:HG13	1:A:82:PHE:HD2	7	1.0
(2,1296)	1:A:85:ARG:H	1:A:86:ILE:HG13	10	1.0
(2,1296)	1:A:86:ILE:HG13	1:A:82:PHE:HD1	10	1.0
(2,1296)	1:A:86:ILE:HG13	1:A:82:PHE:HD2	10	1.0
(1,29)	1:A:82:PHE:HA	1:A:86:ILE:HG13	7	1.0
(2,623)	1:A:59:MET:HA	1:A:107:PRO:HB2	10	0.99
(2,59)	1:A:105:GLU:HG3	1:A:59:MET:HG3	6	0.99
(2,528)	1:A:78:LYS:HG2	1:A:75:LYS:HA	9	0.99
(2,134)	1:A:120:HIS:HB3	1:A:119:LEU:HB3	10	0.99
(2,1296)	1:A:85:ARG:H	1:A:86:ILE:HG13	6	0.99
(2,1296)	1:A:86:ILE:HG13	1:A:82:PHE:HD1	6	0.99
(2,1296)	1:A:86:ILE:HG13	1:A:82:PHE:HD2	6	0.99
(1,15)	1:A:136:LYS:HD3	1:A:107:PRO:HB2	7	0.99
(2,727)	1:A:111:SER:HB3	1:A:114:ASP:HB3	4	0.98
(2,727)	1:A:111:SER:HB3	1:A:114:ASP:HB3	9	0.98
(2,679)	1:A:89:LEU:HB3	1:A:114:ASP:HB2	7	0.98
(2,679)	1:A:89:LEU:HB3	1:A:114:ASP:HB2	5	0.97
(2,1741)	1:A:136:LYS:HE2	1:A:136:LYS:HA	10	0.97

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1741)	1:A:67:LYS:HE2	1:A:70:SER:HA	10	0.97
(2,1741)	1:A:71:LYS:HE2	1:A:72:ASN:HA	10	0.97
(2,1741)	1:A:75:LYS:HE2	1:A:79:SER:HA	10	0.97
(2,1579)	1:A:104:ILE:HA	1:A:105:GLU:HG2	8	0.97
(2,1579)	1:A:65:THR:HA	1:A:69:GLU:HB3	8	0.97
(2,1296)	1:A:85:ARG:H	1:A:86:ILE:HG13	1	0.97
(2,1296)	1:A:86:ILE:HG13	1:A:82:PHE:HD1	1	0.97
(2,1296)	1:A:86:ILE:HG13	1:A:82:PHE:HD2	1	0.97
(2,1226)	1:A:66:GLU:HB2	1:A:73:PHE:HB3	10	0.97
(2,1226)	1:A:66:GLU:HB2	1:A:75:LYS:H	10	0.97
(2,1226)	1:A:71:LYS:HB3	1:A:72:ASN:HB2	10	0.97
(2,1226)	1:A:71:LYS:HB3	1:A:72:ASN:HB3	10	0.97
(1,60)	1:A:119:LEU:H	1:A:114:ASP:HB2	6	0.97
(2,727)	1:A:111:SER:HB3	1:A:114:ASP:HB3	1	0.96
(2,1554)	1:A:86:ILE:HA	1:A:87:GLU:HB3	5	0.96
(2,1554)	1:A:86:ILE:HA	1:A:88:GLU:HB3	5	0.96
(2,1327)	1:A:136:LYS:HG3	1:A:58:GLU:HG2	10	0.96
(2,1327)	1:A:136:LYS:HG3	1:A:58:GLU:HG3	10	0.96
(2,1296)	1:A:85:ARG:H	1:A:86:ILE:HG13	2	0.96
(2,1296)	1:A:86:ILE:HG13	1:A:82:PHE:HD1	2	0.96
(2,1296)	1:A:86:ILE:HG13	1:A:82:PHE:HD2	2	0.96
(2,1056)	1:A:113:HIS:H	1:A:114:ASP:HB3	6	0.96
(1,29)	1:A:82:PHE:HA	1:A:86:ILE:HG13	1	0.96
(2,727)	1:A:111:SER:HB3	1:A:114:ASP:HB3	8	0.95
(2,679)	1:A:89:LEU:HB3	1:A:114:ASP:HB2	1	0.95
(2,623)	1:A:59:MET:HA	1:A:107:PRO:HB2	1	0.95
(2,1268)	1:A:78:LYS:HD3	1:A:74:SER:HB3	5	0.95
(2,1268)	1:A:78:LYS:HD2	1:A:74:SER:HB3	5	0.95
(2,1177)	1:A:58:GLU:HG2	1:A:107:PRO:HD2	3	0.95
(2,1177)	1:A:58:GLU:HG2	1:A:107:PRO:HD3	3	0.95
(2,679)	1:A:89:LEU:HB3	1:A:114:ASP:HB2	4	0.93
(2,623)	1:A:59:MET:HA	1:A:107:PRO:HB2	8	0.93
(2,129)	1:A:120:HIS:HB2	1:A:117:GLN:HB2	5	0.93
(2,129)	1:A:120:HIS:HB2	1:A:117:GLN:HB3	5	0.93
(1,60)	1:A:119:LEU:H	1:A:114:ASP:HB2	1	0.93
(2,689)	1:A:108:LYS:HG3	1:A:108:LYS:HE3	9	0.92
(2,1579)	1:A:104:ILE:HA	1:A:105:GLU:HG2	2	0.92
(2,1579)	1:A:65:THR:HA	1:A:69:GLU:HB3	2	0.92
(2,1376)	1:A:129:VAL:HG12	1:A:63:MET:HG2	6	0.92
(2,1376)	1:A:129:VAL:HG11	1:A:63:MET:HG2	6	0.92
(2,1376)	1:A:129:VAL:HG13	1:A:63:MET:HG2	6	0.92
(2,1376)	1:A:129:VAL:HG12	1:A:127:GLY:HA2	6	0.92

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1376)	1:A:129:VAL:HG11	1:A:127:GLY:HA2	6	0.92
(2,1376)	1:A:129:VAL:HG13	1:A:127:GLY:HA2	6	0.92
(2,1325)	1:A:136:LYS:HG3	1:A:58:GLU:HG2	2	0.92
(2,1325)	1:A:71:LYS:HG3	1:A:68:GLN:HB3	2	0.92
(2,1325)	1:A:108:LYS:HG3	1:A:115:MET:HB3	2	0.92
(2,727)	1:A:111:SER:HB3	1:A:114:ASP:HB3	7	0.91
(2,586)	1:A:71:LYS:HA	1:A:66:GLU:HB2	5	0.91
(2,586)	1:A:71:LYS:HA	1:A:66:GLU:HB2	10	0.91
(2,1624)	1:A:76:MET:HG3	1:A:118:LEU:HA	8	0.91
(2,1624)	1:A:118:LEU:HA	1:A:114:ASP:HB2	8	0.91
(2,129)	1:A:120:HIS:HB2	1:A:117:GLN:HB2	7	0.91
(2,129)	1:A:120:HIS:HB2	1:A:117:GLN:HB3	7	0.91
(2,727)	1:A:111:SER:HB3	1:A:114:ASP:HB3	5	0.89
(2,687)	1:A:108:LYS:HE3	1:A:60:THR:HA	8	0.89
(2,623)	1:A:59:MET:HA	1:A:107:PRO:HB2	3	0.89
(2,62)	1:A:107:PRO:HB3	1:A:109:THR:HG21	10	0.89
(2,62)	1:A:107:PRO:HB3	1:A:109:THR:HG22	10	0.89
(2,62)	1:A:107:PRO:HB3	1:A:109:THR:HG23	10	0.89
(2,1376)	1:A:129:VAL:HG12	1:A:63:MET:HG2	10	0.89
(2,1376)	1:A:129:VAL:HG11	1:A:63:MET:HG2	10	0.89
(2,1376)	1:A:129:VAL:HG13	1:A:63:MET:HG2	10	0.89
(2,1376)	1:A:129:VAL:HG12	1:A:127:GLY:HA2	10	0.89
(2,1376)	1:A:129:VAL:HG11	1:A:127:GLY:HA2	10	0.89
(2,1376)	1:A:129:VAL:HG13	1:A:127:GLY:HA2	10	0.89
(2,1248)	1:A:67:LYS:HD3	1:A:69:GLU:HB3	7	0.89
(2,1248)	1:A:122:ILE:HG13	1:A:85:ARG:HG3	7	0.89
(2,1208)	1:A:66:GLU:HB3	1:A:100:GLY:HA2	7	0.89
(2,1208)	1:A:66:GLU:HB3	1:A:74:SER:HA	7	0.89
(2,1177)	1:A:58:GLU:HG2	1:A:107:PRO:HD2	2	0.89
(2,1177)	1:A:58:GLU:HG2	1:A:107:PRO:HD3	2	0.89
(1,60)	1:A:119:LEU:H	1:A:114:ASP:HB2	3	0.89
(2,867)	1:A:87:GLU:H	1:A:86:ILE:HG13	3	0.88
(2,727)	1:A:111:SER:HB3	1:A:114:ASP:HB3	3	0.88
(2,131)	1:A:136:LYS:HD3	1:A:58:GLU:HG3	1	0.88
(2,867)	1:A:87:GLU:H	1:A:86:ILE:HG13	9	0.87
(2,689)	1:A:108:LYS:HG3	1:A:108:LYS:HE3	10	0.87
(2,1624)	1:A:76:MET:HG3	1:A:118:LEU:HA	3	0.87
(2,1624)	1:A:118:LEU:HA	1:A:114:ASP:HB2	3	0.87
(2,1532)	1:A:88:GLU:HB3	1:A:81:SER:HA	1	0.87
(2,1532)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:83:SER:HA	1	0.87
(2,1532)	1:A:88:GLU:HB3	1:A:81:SER:HA	2	0.87
(2,1532)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:83:SER:HA	2	0.87

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1257)	1:A:136:LYS:HD2	1:A:59:MET:HG2	5	0.87
(2,1257)	1:A:136:LYS:HD3	1:A:58:GLU:HG3	5	0.87
(2,1257)	1:A:136:LYS:HD3	1:A:59:MET:HG2	5	0.87
(2,1257)	1:A:75:LYS:HD3	1:A:78:LYS:HE2	5	0.87
(2,867)	1:A:87:GLU:H	1:A:86:ILE:HG13	4	0.86
(2,772)	1:A:62:LEU:H	1:A:103:MET:HG3	8	0.86
(2,1712)	1:A:91:GLY:HA2	1:A:86:ILE:HB	9	0.86
(2,1712)	1:A:91:GLY:HA2	1:A:105:GLU:HG3	9	0.86
(2,1624)	1:A:76:MET:HG3	1:A:118:LEU:HA	1	0.86
(2,1624)	1:A:118:LEU:HA	1:A:114:ASP:HB2	1	0.86
(2,1624)	1:A:76:MET:HG3	1:A:118:LEU:HA	4	0.86
(2,1624)	1:A:118:LEU:HA	1:A:114:ASP:HB2	4	0.86
(2,1554)	1:A:86:ILE:HA	1:A:87:GLU:HB3	1	0.86
(2,1554)	1:A:86:ILE:HA	1:A:88:GLU:HB3	1	0.86
(2,1554)	1:A:86:ILE:HA	1:A:87:GLU:HB3	6	0.86
(2,1554)	1:A:86:ILE:HA	1:A:88:GLU:HB3	6	0.86
(2,1376)	1:A:129:VAL:HG12	1:A:63:MET:HG2	3	0.86
(2,1376)	1:A:129:VAL:HG11	1:A:63:MET:HG2	3	0.86
(2,1376)	1:A:129:VAL:HG13	1:A:63:MET:HG2	3	0.86
(2,1376)	1:A:129:VAL:HG12	1:A:127:GLY:HA2	3	0.86
(2,1376)	1:A:129:VAL:HG11	1:A:127:GLY:HA2	3	0.86
(2,1376)	1:A:129:VAL:HG13	1:A:127:GLY:HA2	3	0.86
(2,1327)	1:A:136:LYS:HG3	1:A:58:GLU:HG2	2	0.86
(2,1327)	1:A:136:LYS:HG3	1:A:58:GLU:HG3	2	0.86
(2,623)	1:A:59:MET:HA	1:A:107:PRO:HB2	4	0.85
(2,612)	1:A:77:ALA:HA	1:A:76:MET:HB2	2	0.85
(2,612)	1:A:77:ALA:HA	1:A:76:MET:HB2	3	0.85
(2,1712)	1:A:91:GLY:HA2	1:A:86:ILE:HB	6	0.85
(2,1712)	1:A:91:GLY:HA2	1:A:105:GLU:HG3	6	0.85
(2,1682)	1:A:62:LEU:HA	1:A:63:MET:HB2	8	0.85
(2,1682)	1:A:62:LEU:HA	1:A:103:MET:HG3	8	0.85
(2,1624)	1:A:76:MET:HG3	1:A:118:LEU:HA	9	0.85
(2,1624)	1:A:118:LEU:HA	1:A:114:ASP:HB2	9	0.85
(2,1532)	1:A:88:GLU:HB3	1:A:81:SER:HA	7	0.85
(2,1532)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:83:SER:HA	7	0.85
(1,8)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:90:GLY:HA2	3	0.85
(1,60)	1:A:119:LEU:H	1:A:114:ASP:HB2	8	0.85
(2,911)	1:A:88:GLU:H	1:A:88:GLU:HG3	7	0.84
(2,867)	1:A:87:GLU:H	1:A:86:ILE:HG13	8	0.84
(2,623)	1:A:59:MET:HA	1:A:107:PRO:HB2	6	0.84
(2,586)	1:A:71:LYS:HA	1:A:66:GLU:HB2	3	0.84
(2,33)	1:A:88:GLU:HG2	1:A:88:GLU:HA	7	0.84

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1532)	1:A:88:GLU:HB3	1:A:81:SER:HA	3	0.84
(2,1532)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:83:SER:HA	3	0.84
(2,1256)	1:A:75:LYS:HD3	1:A:78:LYS:HE3	3	0.84
(2,1256)	1:A:136:LYS:HD2	1:A:59:MET:HG3	3	0.84
(2,1071)	1:A:86:ILE:H	1:A:86:ILE:HG13	3	0.84
(2,1071)	1:A:86:ILE:H	1:A:86:ILE:HG13	6	0.84
(1,60)	1:A:119:LEU:H	1:A:114:ASP:HB2	7	0.84
(2,867)	1:A:87:GLU:H	1:A:86:ILE:HG13	2	0.83
(2,1624)	1:A:76:MET:HG3	1:A:118:LEU:HA	5	0.83
(2,1624)	1:A:118:LEU:HA	1:A:114:ASP:HB2	5	0.83
(2,1071)	1:A:86:ILE:H	1:A:86:ILE:HG13	7	0.83
(2,1071)	1:A:86:ILE:H	1:A:86:ILE:HG13	9	0.83
(1,60)	1:A:119:LEU:H	1:A:114:ASP:HB2	5	0.83
(2,689)	1:A:108:LYS:HG3	1:A:108:LYS:HE3	8	0.82
(2,612)	1:A:77:ALA:HA	1:A:76:MET:HB2	5	0.82
(2,133)	1:A:67:LYS:HD3	1:A:69:GLU:HB3	4	0.82
(2,131)	1:A:136:LYS:HD3	1:A:58:GLU:HG3	5	0.82
(2,1301)	1:A:106:LEU:HG	1:A:91:GLY:HA2	3	0.82
(2,1301)	1:A:118:LEU:HG	1:A:117:GLN:HA	3	0.82
(2,1252)	1:A:136:LYS:HD3	1:A:59:MET:HG2	6	0.82
(2,1252)	1:A:66:GLU:HG3	1:A:71:LYS:HD3	6	0.82
(2,1071)	1:A:86:ILE:H	1:A:86:ILE:HG13	1	0.82
(2,1071)	1:A:86:ILE:H	1:A:86:ILE:HG13	4	0.82
(2,1071)	1:A:86:ILE:H	1:A:86:ILE:HG13	8	0.82
(1,24)	1:A:75:LYS:HG3	1:A:78:LYS:HE3	10	0.82
(2,88)	1:A:63:MET:HB2	1:A:132:ASP:HB2	6	0.81
(2,867)	1:A:87:GLU:H	1:A:86:ILE:HG13	1	0.81
(2,612)	1:A:77:ALA:HA	1:A:76:MET:HB2	6	0.81
(2,612)	1:A:77:ALA:HA	1:A:76:MET:HB2	8	0.81
(2,612)	1:A:77:ALA:HA	1:A:76:MET:HB2	9	0.81
(2,59)	1:A:105:GLU:HG3	1:A:59:MET:HG3	3	0.81
(2,586)	1:A:71:LYS:HA	1:A:66:GLU:HB2	4	0.81
(2,1712)	1:A:91:GLY:HA2	1:A:86:ILE:HB	8	0.81
(2,1712)	1:A:91:GLY:HA2	1:A:105:GLU:HG3	8	0.81
(2,1376)	1:A:129:VAL:HG12	1:A:63:MET:HG2	7	0.81
(2,1376)	1:A:129:VAL:HG11	1:A:63:MET:HG2	7	0.81
(2,1376)	1:A:129:VAL:HG13	1:A:63:MET:HG2	7	0.81
(2,1376)	1:A:129:VAL:HG12	1:A:127:GLY:HA2	7	0.81
(2,1376)	1:A:129:VAL:HG11	1:A:127:GLY:HA2	7	0.81
(2,1376)	1:A:129:VAL:HG13	1:A:127:GLY:HA2	7	0.81
(1,60)	1:A:119:LEU:H	1:A:114:ASP:HB2	4	0.81
(2,679)	1:A:89:LEU:HB3	1:A:114:ASP:HB2	9	0.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,612)	1:A:77:ALA:HA	1:A:76:MET:HB2	10	0.8
(2,1908)	1:A:84:THR:H	1:A:87:GLU:HG2	8	0.8
(2,1908)	1:A:84:THR:H	1:A:88:GLU:HG3	8	0.8
(2,1376)	1:A:129:VAL:HG12	1:A:63:MET:HG2	8	0.8
(2,1376)	1:A:129:VAL:HG11	1:A:63:MET:HG2	8	0.8
(2,1376)	1:A:129:VAL:HG13	1:A:63:MET:HG2	8	0.8
(2,1376)	1:A:129:VAL:HG12	1:A:127:GLY:HA2	8	0.8
(2,1376)	1:A:129:VAL:HG11	1:A:127:GLY:HA2	8	0.8
(2,1376)	1:A:129:VAL:HG13	1:A:127:GLY:HA2	8	0.8
(2,129)	1:A:120:HIS:HB2	1:A:117:GLN:HB2	8	0.8
(2,129)	1:A:120:HIS:HB2	1:A:117:GLN:HB3	8	0.8
(2,1071)	1:A:86:ILE:H	1:A:86:ILE:HG13	5	0.8
(2,867)	1:A:87:GLU:H	1:A:86:ILE:HG13	7	0.79
(2,62)	1:A:107:PRO:HB3	1:A:109:THR:HG21	2	0.79
(2,62)	1:A:107:PRO:HB3	1:A:109:THR:HG22	2	0.79
(2,62)	1:A:107:PRO:HB3	1:A:109:THR:HG23	2	0.79
(2,612)	1:A:77:ALA:HA	1:A:76:MET:HB2	1	0.79
(2,612)	1:A:77:ALA:HA	1:A:76:MET:HB2	7	0.79
(2,1712)	1:A:91:GLY:HA2	1:A:86:ILE:HB	1	0.79
(2,1712)	1:A:91:GLY:HA2	1:A:105:GLU:HG3	1	0.79
(2,1712)	1:A:91:GLY:HA2	1:A:86:ILE:HB	7	0.79
(2,1712)	1:A:91:GLY:HA2	1:A:105:GLU:HG3	7	0.79
(2,1554)	1:A:86:ILE:HA	1:A:87:GLU:HB3	8	0.79
(2,1554)	1:A:86:ILE:HA	1:A:88:GLU:HB3	8	0.79
(2,1376)	1:A:129:VAL:HG12	1:A:63:MET:HG2	2	0.79
(2,1376)	1:A:129:VAL:HG11	1:A:63:MET:HG2	2	0.79
(2,1376)	1:A:129:VAL:HG13	1:A:63:MET:HG2	2	0.79
(2,1376)	1:A:129:VAL:HG12	1:A:127:GLY:HA2	2	0.79
(2,1376)	1:A:129:VAL:HG11	1:A:127:GLY:HA2	2	0.79
(2,1376)	1:A:129:VAL:HG13	1:A:127:GLY:HA2	2	0.79
(2,1376)	1:A:129:VAL:HG12	1:A:63:MET:HG2	4	0.79
(2,1376)	1:A:129:VAL:HG11	1:A:63:MET:HG2	4	0.79
(2,1376)	1:A:129:VAL:HG13	1:A:63:MET:HG2	4	0.79
(2,1376)	1:A:129:VAL:HG12	1:A:127:GLY:HA2	4	0.79
(2,1376)	1:A:129:VAL:HG11	1:A:127:GLY:HA2	4	0.79
(2,1376)	1:A:129:VAL:HG13	1:A:127:GLY:HA2	4	0.79
(2,1301)	1:A:106:LEU:HG	1:A:91:GLY:HA2	9	0.79
(2,1301)	1:A:118:LEU:HG	1:A:117:GLN:HA	9	0.79
(2,1071)	1:A:86:ILE:H	1:A:86:ILE:HG13	2	0.79
(1,4)	1:A:58:GLU:HG2	1:A:91:GLY:HA3	4	0.79
(2,867)	1:A:87:GLU:H	1:A:86:ILE:HG13	6	0.78
(2,623)	1:A:59:MET:HA	1:A:107:PRO:HB2	7	0.78

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,623)	1:A:59:MET:HA	1:A:107:PRO:HB2	9	0.78
(2,360)	1:A:122:ILE:HG22	1:A:127:GLY:HA2	10	0.78
(2,360)	1:A:122:ILE:HG21	1:A:127:GLY:HA2	10	0.78
(2,360)	1:A:122:ILE:HG23	1:A:127:GLY:HA2	10	0.78
(2,1712)	1:A:91:GLY:HA2	1:A:86:ILE:HB	4	0.78
(2,1712)	1:A:91:GLY:HA2	1:A:105:GLU:HG3	4	0.78
(2,1653)	1:A:66:GLU:HA	1:A:74:SER:HA	7	0.78
(2,1653)	1:A:66:GLU:HA	1:A:100:GLY:HA2	7	0.78
(2,772)	1:A:62:LEU:H	1:A:103:MET:HG3	6	0.77
(2,623)	1:A:59:MET:HA	1:A:107:PRO:HB2	5	0.77
(2,586)	1:A:71:LYS:HA	1:A:66:GLU:HB2	7	0.77
(2,1301)	1:A:106:LEU:HG	1:A:91:GLY:HA2	8	0.77
(2,1301)	1:A:118:LEU:HG	1:A:117:GLN:HA	8	0.77
(1,4)	1:A:58:GLU:HG2	1:A:91:GLY:HA3	1	0.77
(2,65)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:107:PRO:HD2	2	0.76
(2,65)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:107:PRO:HD2	3	0.76
(2,65)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:107:PRO:HD2	7	0.76
(2,65)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:107:PRO:HD2	10	0.76
(2,612)	1:A:77:ALA:HA	1:A:76:MET:HB2	4	0.76
(2,1554)	1:A:86:ILE:HA	1:A:87:GLU:HB3	2	0.76
(2,1554)	1:A:86:ILE:HA	1:A:88:GLU:HB3	2	0.76
(2,1554)	1:A:86:ILE:HA	1:A:87:GLU:HB3	4	0.76
(2,1554)	1:A:86:ILE:HA	1:A:88:GLU:HB3	4	0.76
(2,1174)	1:A:66:GLU:HG3	1:A:71:LYS:HB2	7	0.76
(2,1174)	1:A:66:GLU:HG3	1:A:71:LYS:HD3	7	0.76
(1,11)	1:A:66:GLU:HB3	1:A:101:VAL:HA	6	0.76
(2,65)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:107:PRO:HD2	1	0.75
(2,65)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:107:PRO:HD2	6	0.75
(2,65)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:107:PRO:HD2	8	0.75
(2,65)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:107:PRO:HD2	9	0.75
(2,333)	1:A:124:ALA:HB2	1:A:76:MET:HG3	6	0.75
(2,333)	1:A:124:ALA:HB1	1:A:76:MET:HG3	6	0.75
(2,333)	1:A:124:ALA:HB3	1:A:76:MET:HG3	6	0.75
(2,1712)	1:A:91:GLY:HA2	1:A:86:ILE:HB	5	0.75
(2,1712)	1:A:91:GLY:HA2	1:A:105:GLU:HG3	5	0.75
(2,1624)	1:A:76:MET:HG3	1:A:118:LEU:HA	7	0.75
(2,1624)	1:A:118:LEU:HA	1:A:114:ASP:HB2	7	0.75
(2,1376)	1:A:129:VAL:HG12	1:A:63:MET:HG2	1	0.75
(2,1376)	1:A:129:VAL:HG11	1:A:63:MET:HG2	1	0.75
(2,1376)	1:A:129:VAL:HG13	1:A:63:MET:HG2	1	0.75
(2,1376)	1:A:129:VAL:HG12	1:A:127:GLY:HA2	1	0.75
(2,1376)	1:A:129:VAL:HG11	1:A:127:GLY:HA2	1	0.75

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1376)	1:A:129:VAL:HG13	1:A:127:GLY:HA2	1	0.75
(2,1301)	1:A:106:LEU:HG	1:A:91:GLY:HA2	4	0.75
(2,1301)	1:A:118:LEU:HG	1:A:117:GLN:HA	4	0.75
(2,867)	1:A:87:GLU:H	1:A:86:ILE:HG13	10	0.74
(2,65)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:107:PRO:HD2	4	0.74
(2,65)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:107:PRO:HD2	5	0.74
(2,1554)	1:A:86:ILE:HA	1:A:87:GLU:HB3	3	0.74
(2,1554)	1:A:86:ILE:HA	1:A:88:GLU:HB3	3	0.74
(2,1376)	1:A:129:VAL:HG12	1:A:63:MET:HG2	5	0.74
(2,1376)	1:A:129:VAL:HG11	1:A:63:MET:HG2	5	0.74
(2,1376)	1:A:129:VAL:HG13	1:A:63:MET:HG2	5	0.74
(2,1376)	1:A:129:VAL:HG12	1:A:127:GLY:HA2	5	0.74
(2,1376)	1:A:129:VAL:HG11	1:A:127:GLY:HA2	5	0.74
(2,1376)	1:A:129:VAL:HG13	1:A:127:GLY:HA2	5	0.74
(2,1376)	1:A:129:VAL:HG12	1:A:63:MET:HG2	9	0.74
(2,1376)	1:A:129:VAL:HG11	1:A:63:MET:HG2	9	0.74
(2,1376)	1:A:129:VAL:HG13	1:A:63:MET:HG2	9	0.74
(2,1376)	1:A:129:VAL:HG12	1:A:127:GLY:HA2	9	0.74
(2,1376)	1:A:129:VAL:HG11	1:A:127:GLY:HA2	9	0.74
(2,1376)	1:A:129:VAL:HG13	1:A:127:GLY:HA2	9	0.74
(2,86)	1:A:63:MET:HB2	1:A:132:ASP:HB3	3	0.73
(2,237)	1:A:110:VAL:HG12	1:A:107:PRO:HD3	2	0.73
(2,237)	1:A:110:VAL:HG11	1:A:107:PRO:HD3	2	0.73
(2,237)	1:A:110:VAL:HG13	1:A:107:PRO:HD3	2	0.73
(2,1908)	1:A:84:THR:H	1:A:87:GLU:HG2	2	0.73
(2,1908)	1:A:84:THR:H	1:A:88:GLU:HG3	2	0.73
(2,1712)	1:A:91:GLY:HA2	1:A:86:ILE:HB	3	0.73
(2,1712)	1:A:91:GLY:HA2	1:A:105:GLU:HG3	3	0.73
(2,1682)	1:A:62:LEU:HA	1:A:63:MET:HB2	6	0.73
(2,1682)	1:A:62:LEU:HA	1:A:103:MET:HG3	6	0.73
(2,1386)	1:A:109:THR:HG21	1:A:58:GLU:HG2	3	0.73
(2,1386)	1:A:109:THR:HG22	1:A:58:GLU:HG2	3	0.73
(2,1386)	1:A:109:THR:HG23	1:A:58:GLU:HG2	3	0.73
(2,1386)	1:A:84:THR:HG21	1:A:87:GLU:HB3	3	0.73
(2,1386)	1:A:84:THR:HG22	1:A:87:GLU:HB3	3	0.73
(2,1386)	1:A:84:THR:HG23	1:A:87:GLU:HB3	3	0.73
(2,1386)	1:A:84:THR:HG21	1:A:88:GLU:HB3	3	0.73
(2,1386)	1:A:84:THR:HG22	1:A:88:GLU:HB3	3	0.73
(2,1386)	1:A:84:THR:HG23	1:A:88:GLU:HB3	3	0.73
(2,1301)	1:A:106:LEU:HG	1:A:91:GLY:HA2	2	0.73
(2,1301)	1:A:118:LEU:HG	1:A:117:GLN:HA	2	0.73
(2,129)	1:A:120:HIS:HB2	1:A:117:GLN:HB2	10	0.73

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,129)	1:A:120:HIS:HB2	1:A:117:GLN:HB3	10	0.73
(2,1071)	1:A:86:ILE:H	1:A:86:ILE:HG13	10	0.73
(1,45)	1:A:125:ALA:HA	1:A:127:GLY:HA2	7	0.73
(1,4)	1:A:58:GLU:HG2	1:A:91:GLY:HA3	6	0.73
(1,24)	1:A:75:LYS:HG3	1:A:78:LYS:HE3	3	0.73
(2,1908)	1:A:84:THR:H	1:A:87:GLU:HG2	3	0.72
(2,1908)	1:A:84:THR:H	1:A:88:GLU:HG3	3	0.72
(2,1653)	1:A:66:GLU:HA	1:A:74:SER:HA	10	0.72
(2,1653)	1:A:66:GLU:HA	1:A:100:GLY:HA2	10	0.72
(2,1554)	1:A:86:ILE:HA	1:A:87:GLU:HB3	10	0.72
(2,1554)	1:A:86:ILE:HA	1:A:88:GLU:HB3	10	0.72
(2,1483)	1:A:84:THR:HA	1:A:87:GLU:HG2	7	0.72
(2,1483)	1:A:88:GLU:HG3	1:A:84:THR:HA	7	0.72
(1,6)	1:A:101:VAL:HB	1:A:103:MET:HG2	5	0.72
(1,4)	1:A:58:GLU:HG2	1:A:91:GLY:HA3	5	0.72
(2,88)	1:A:63:MET:HB2	1:A:132:ASP:HB2	1	0.71
(2,867)	1:A:87:GLU:H	1:A:86:ILE:HG13	5	0.71
(2,59)	1:A:105:GLU:HG3	1:A:59:MET:HG3	10	0.71
(2,586)	1:A:71:LYS:HA	1:A:66:GLU:HB2	8	0.71
(2,1908)	1:A:84:THR:H	1:A:87:GLU:HG2	1	0.71
(2,1908)	1:A:84:THR:H	1:A:88:GLU:HG3	1	0.71
(2,1360)	1:A:119:LEU:HD22	1:A:115:MET:HG3	7	0.71
(2,1360)	1:A:119:LEU:HD21	1:A:115:MET:HG3	7	0.71
(2,1360)	1:A:119:LEU:HD23	1:A:115:MET:HG3	7	0.71
(2,1360)	1:A:63:MET:HB2	1:A:96:LEU:HD22	7	0.71
(2,1360)	1:A:63:MET:HB2	1:A:96:LEU:HD21	7	0.71
(2,1360)	1:A:63:MET:HB2	1:A:96:LEU:HD23	7	0.71
(2,1360)	1:A:63:MET:HB3	1:A:96:LEU:HD22	7	0.71
(2,1360)	1:A:63:MET:HB3	1:A:96:LEU:HD21	7	0.71
(2,1360)	1:A:63:MET:HB3	1:A:96:LEU:HD23	7	0.71
(2,1301)	1:A:106:LEU:HG	1:A:91:GLY:HA2	10	0.71
(2,1301)	1:A:118:LEU:HG	1:A:117:GLN:HA	10	0.71
(2,129)	1:A:120:HIS:HB2	1:A:117:GLN:HB2	3	0.71
(2,129)	1:A:120:HIS:HB2	1:A:117:GLN:HB3	3	0.71
(2,1226)	1:A:66:GLU:HB2	1:A:73:PHE:HB3	1	0.71
(2,1226)	1:A:66:GLU:HB2	1:A:75:LYS:H	1	0.71
(2,1226)	1:A:71:LYS:HB3	1:A:72:ASN:HB2	1	0.71
(2,1226)	1:A:71:LYS:HB3	1:A:72:ASN:HB3	1	0.71
(2,1226)	1:A:66:GLU:HB2	1:A:73:PHE:HB3	7	0.71
(2,1226)	1:A:66:GLU:HB2	1:A:75:LYS:H	7	0.71
(2,1226)	1:A:71:LYS:HB3	1:A:72:ASN:HB2	7	0.71
(2,1226)	1:A:71:LYS:HB3	1:A:72:ASN:HB3	7	0.71

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,4)	1:A:58:GLU:HG2	1:A:91:GLY:HA3	7	0.71
(2,59)	1:A:105:GLU:HG3	1:A:59:MET:HG3	1	0.7
(2,1904)	1:A:66:GLU:H	1:A:67:LYS:HB2	2	0.7
(2,1904)	1:A:66:GLU:H	1:A:71:LYS:HD3	2	0.7
(2,1741)	1:A:136:LYS:HE2	1:A:136:LYS:HA	6	0.7
(2,1741)	1:A:67:LYS:HE2	1:A:70:SER:HA	6	0.7
(2,1741)	1:A:71:LYS:HE2	1:A:72:ASN:HA	6	0.7
(2,1741)	1:A:75:LYS:HE2	1:A:79:SER:HA	6	0.7
(2,1301)	1:A:106:LEU:HG	1:A:91:GLY:HA2	1	0.7
(2,1301)	1:A:118:LEU:HG	1:A:117:GLN:HA	1	0.7
(2,129)	1:A:120:HIS:HB2	1:A:117:GLN:HB2	4	0.7
(2,129)	1:A:120:HIS:HB2	1:A:117:GLN:HB3	4	0.7
(2,1256)	1:A:75:LYS:HD3	1:A:78:LYS:HE3	10	0.7
(2,1256)	1:A:136:LYS:HD2	1:A:59:MET:HG3	10	0.7
(2,1226)	1:A:66:GLU:HB2	1:A:73:PHE:HB3	9	0.7
(2,1226)	1:A:66:GLU:HB2	1:A:75:LYS:H	9	0.7
(2,1226)	1:A:71:LYS:HB3	1:A:72:ASN:HB2	9	0.7
(2,1226)	1:A:71:LYS:HB3	1:A:72:ASN:HB3	9	0.7
(1,8)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:90:GLY:HA2	9	0.7
(2,586)	1:A:71:LYS:HA	1:A:66:GLU:HB2	9	0.69
(2,237)	1:A:110:VAL:HG12	1:A:107:PRO:HD3	1	0.69
(2,237)	1:A:110:VAL:HG11	1:A:107:PRO:HD3	1	0.69
(2,237)	1:A:110:VAL:HG13	1:A:107:PRO:HD3	1	0.69
(2,237)	1:A:110:VAL:HG12	1:A:107:PRO:HD3	10	0.69
(2,237)	1:A:110:VAL:HG11	1:A:107:PRO:HD3	10	0.69
(2,237)	1:A:110:VAL:HG13	1:A:107:PRO:HD3	10	0.69
(2,1301)	1:A:106:LEU:HG	1:A:91:GLY:HA2	6	0.69
(2,1301)	1:A:118:LEU:HG	1:A:117:GLN:HA	6	0.69
(2,129)	1:A:120:HIS:HB2	1:A:117:GLN:HB2	9	0.69
(2,129)	1:A:120:HIS:HB2	1:A:117:GLN:HB3	9	0.69
(1,45)	1:A:125:ALA:HA	1:A:127:GLY:HA2	2	0.69
(1,45)	1:A:125:ALA:HA	1:A:127:GLY:HA2	5	0.69
(1,11)	1:A:66:GLU:HB3	1:A:101:VAL:HA	8	0.69
(2,946)	1:A:58:GLU:H	1:A:58:GLU:HB2	8	0.68
(2,946)	1:A:58:GLU:H	1:A:58:GLU:HB2	8	0.68
(2,946)	1:A:58:GLU:H	1:A:58:GLU:HB2	8	0.68
(2,37)	1:A:66:GLU:HG3	1:A:73:PHE:HB3	10	0.68
(2,1712)	1:A:91:GLY:HA2	1:A:86:ILE:HB	2	0.68
(2,1712)	1:A:91:GLY:HA2	1:A:105:GLU:HG3	2	0.68
(2,1712)	1:A:91:GLY:HA2	1:A:86:ILE:HB	10	0.68
(2,1712)	1:A:91:GLY:HA2	1:A:105:GLU:HG3	10	0.68
(2,129)	1:A:120:HIS:HB2	1:A:117:GLN:HB2	6	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,129)	1:A:120:HIS:HB2	1:A:117:GLN:HB3	6	0.68
(1,23)	1:A:93:ILE:HG12	1:A:78:LYS:HG2	9	0.68
(2,649)	1:A:70:SER:HB2	1:A:126:GLY:HA3	10	0.67
(2,240)	1:A:110:VAL:HG12	1:A:89:LEU:HB2	10	0.67
(2,240)	1:A:110:VAL:HG11	1:A:89:LEU:HB2	10	0.67
(2,240)	1:A:110:VAL:HG13	1:A:89:LEU:HB2	10	0.67
(2,237)	1:A:110:VAL:HG12	1:A:107:PRO:HD3	3	0.67
(2,237)	1:A:110:VAL:HG11	1:A:107:PRO:HD3	3	0.67
(2,237)	1:A:110:VAL:HG13	1:A:107:PRO:HD3	3	0.67
(2,237)	1:A:110:VAL:HG12	1:A:107:PRO:HD3	4	0.67
(2,237)	1:A:110:VAL:HG11	1:A:107:PRO:HD3	4	0.67
(2,237)	1:A:110:VAL:HG13	1:A:107:PRO:HD3	4	0.67
(2,1741)	1:A:136:LYS:HE2	1:A:136:LYS:HA	7	0.67
(2,1741)	1:A:67:LYS:HE2	1:A:70:SER:HA	7	0.67
(2,1741)	1:A:71:LYS:HE2	1:A:72:ASN:HA	7	0.67
(2,1741)	1:A:75:LYS:HE2	1:A:79:SER:HA	7	0.67
(2,1532)	1:A:88:GLU:HB3	1:A:81:SER:HA	4	0.67
(2,1532)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:83:SER:HA	4	0.67
(2,1301)	1:A:106:LEU:HG	1:A:91:GLY:HA2	7	0.67
(2,1301)	1:A:118:LEU:HG	1:A:117:GLN:HA	7	0.67
(2,1226)	1:A:66:GLU:HB2	1:A:73:PHE:HB3	4	0.67
(2,1226)	1:A:66:GLU:HB2	1:A:75:LYS:H	4	0.67
(2,1226)	1:A:71:LYS:HB3	1:A:72:ASN:HB2	4	0.67
(2,1226)	1:A:71:LYS:HB3	1:A:72:ASN:HB3	4	0.67
(1,8)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:90:GLY:HA2	2	0.67
(1,60)	1:A:119:LEU:H	1:A:114:ASP:HB2	9	0.67
(1,45)	1:A:125:ALA:HA	1:A:127:GLY:HA2	8	0.67
(1,11)	1:A:66:GLU:HB3	1:A:101:VAL:HA	5	0.67
(2,726)	1:A:111:SER:HB2	1:A:113:HIS:HB3	2	0.66
(2,523)	1:A:87:GLU:HG3	1:A:87:GLU:HA	9	0.66
(2,1833)	1:A:137:LEU:H	1:A:134:GLU:HB2	4	0.66
(2,1833)	1:A:137:LEU:H	1:A:135:VAL:HB	4	0.66
(2,1833)	1:A:137:LEU:H	1:A:105:GLU:HG3	4	0.66
(2,1833)	1:A:137:LEU:H	1:A:134:GLU:HB2	10	0.66
(2,1833)	1:A:137:LEU:H	1:A:135:VAL:HB	10	0.66
(2,1833)	1:A:137:LEU:H	1:A:105:GLU:HG3	10	0.66
(2,1386)	1:A:109:THR:HG21	1:A:58:GLU:HG2	2	0.66
(2,1386)	1:A:109:THR:HG22	1:A:58:GLU:HG2	2	0.66
(2,1386)	1:A:109:THR:HG23	1:A:58:GLU:HG2	2	0.66
(2,1386)	1:A:84:THR:HG21	1:A:87:GLU:HB3	2	0.66
(2,1386)	1:A:84:THR:HG22	1:A:87:GLU:HB3	2	0.66
(2,1386)	1:A:84:THR:HG23	1:A:87:GLU:HB3	2	0.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1386)	1:A:84:THR:HG21	1:A:88:GLU:HB3	2	0.66
(2,1386)	1:A:84:THR:HG22	1:A:88:GLU:HB3	2	0.66
(2,1386)	1:A:84:THR:HG23	1:A:88:GLU:HB3	2	0.66
(2,1301)	1:A:106:LEU:HG	1:A:91:GLY:HA2	5	0.66
(2,1301)	1:A:118:LEU:HG	1:A:117:GLN:HA	5	0.66
(2,1258)	1:A:108:LYS:HD3	1:A:59:MET:HA	9	0.66
(2,1258)	1:A:136:LYS:HD2	1:A:59:MET:HA	9	0.66
(2,1258)	1:A:136:LYS:HD3	1:A:59:MET:HA	9	0.66
(1,45)	1:A:125:ALA:HA	1:A:127:GLY:HA2	9	0.66
(1,4)	1:A:58:GLU:HG2	1:A:91:GLY:HA3	8	0.66
(1,4)	1:A:58:GLU:HG2	1:A:91:GLY:HA3	9	0.66
(2,62)	1:A:107:PRO:HB3	1:A:109:THR:HG21	3	0.65
(2,62)	1:A:107:PRO:HB3	1:A:109:THR:HG22	3	0.65
(2,62)	1:A:107:PRO:HB3	1:A:109:THR:HG23	3	0.65
(2,51)	1:A:103:MET:HB2	1:A:61:ARG:HG2	7	0.65
(2,237)	1:A:110:VAL:HG12	1:A:107:PRO:HD3	6	0.65
(2,237)	1:A:110:VAL:HG11	1:A:107:PRO:HD3	6	0.65
(2,237)	1:A:110:VAL:HG13	1:A:107:PRO:HD3	6	0.65
(2,1208)	1:A:66:GLU:HB3	1:A:100:GLY:HA2	10	0.65
(2,1208)	1:A:66:GLU:HB3	1:A:74:SER:HA	10	0.65
(2,1173)	1:A:66:GLU:HG3	1:A:70:SER:HB2	10	0.65
(2,1173)	1:A:66:GLU:HG3	1:A:70:SER:HB3	10	0.65
(1,8)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:90:GLY:HA2	7	0.65
(1,45)	1:A:125:ALA:HA	1:A:127:GLY:HA2	1	0.65
(1,45)	1:A:125:ALA:HA	1:A:127:GLY:HA2	3	0.65
(1,45)	1:A:125:ALA:HA	1:A:127:GLY:HA2	10	0.65
(1,11)	1:A:66:GLU:HB3	1:A:101:VAL:HA	4	0.65
(2,360)	1:A:122:ILE:HG22	1:A:127:GLY:HA2	7	0.64
(2,360)	1:A:122:ILE:HG21	1:A:127:GLY:HA2	7	0.64
(2,360)	1:A:122:ILE:HG23	1:A:127:GLY:HA2	7	0.64
(2,1908)	1:A:84:THR:H	1:A:87:GLU:HG2	6	0.64
(2,1908)	1:A:84:THR:H	1:A:88:GLU:HG3	6	0.64
(2,1866)	1:A:88:GLU:H	1:A:87:GLU:HB3	9	0.64
(2,1866)	1:A:88:GLU:H	1:A:88:GLU:HB3	9	0.64
(2,1509)	1:A:110:VAL:HA	1:A:107:PRO:HB3	2	0.64
(2,1509)	1:A:110:VAL:HA	1:A:114:ASP:HB2	2	0.64
(1,6)	1:A:101:VAL:HB	1:A:103:MET:HG2	6	0.64
(1,24)	1:A:75:LYS:HG3	1:A:78:LYS:HE3	2	0.64
(2,679)	1:A:89:LEU:HB3	1:A:114:ASP:HB2	2	0.63
(2,679)	1:A:89:LEU:HB3	1:A:114:ASP:HB2	10	0.63
(2,44)	1:A:103:MET:HB2	1:A:96:LEU:HD22	7	0.63
(2,44)	1:A:103:MET:HB2	1:A:96:LEU:HD21	7	0.63

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,44)	1:A:103:MET:HB2	1:A:96:LEU:HD23	7	0.63
(2,1866)	1:A:88:GLU:H	1:A:87:GLU:HB3	4	0.63
(2,1866)	1:A:88:GLU:H	1:A:88:GLU:HB3	4	0.63
(2,1682)	1:A:62:LEU:HA	1:A:63:MET:HB2	5	0.63
(2,1682)	1:A:62:LEU:HA	1:A:103:MET:HG3	5	0.63
(2,1509)	1:A:110:VAL:HA	1:A:107:PRO:HB3	10	0.63
(2,1509)	1:A:110:VAL:HA	1:A:114:ASP:HB2	10	0.63
(2,1174)	1:A:66:GLU:HG3	1:A:71:LYS:HB2	8	0.63
(2,1174)	1:A:66:GLU:HG3	1:A:71:LYS:HD3	8	0.63
(1,8)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:90:GLY:HA2	10	0.63
(1,11)	1:A:66:GLU:HB3	1:A:101:VAL:HA	7	0.63
(2,587)	1:A:71:LYS:HD3	1:A:71:LYS:HA	3	0.62
(2,237)	1:A:110:VAL:HG12	1:A:107:PRO:HD3	7	0.62
(2,237)	1:A:110:VAL:HG11	1:A:107:PRO:HD3	7	0.62
(2,237)	1:A:110:VAL:HG13	1:A:107:PRO:HD3	7	0.62
(2,237)	1:A:110:VAL:HG12	1:A:107:PRO:HD3	8	0.62
(2,237)	1:A:110:VAL:HG11	1:A:107:PRO:HD3	8	0.62
(2,237)	1:A:110:VAL:HG13	1:A:107:PRO:HD3	8	0.62
(2,1904)	1:A:66:GLU:H	1:A:67:LYS:HB2	6	0.62
(2,1904)	1:A:66:GLU:H	1:A:71:LYS:HD3	6	0.62
(2,1258)	1:A:108:LYS:HD3	1:A:59:MET:HA	7	0.62
(2,1258)	1:A:136:LYS:HD2	1:A:59:MET:HA	7	0.62
(2,1258)	1:A:136:LYS:HD3	1:A:59:MET:HA	7	0.62
(1,8)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:90:GLY:HA2	5	0.62
(1,45)	1:A:125:ALA:HA	1:A:127:GLY:HA2	4	0.62
(2,560)	1:A:70:SER:HB2	1:A:70:SER:HA	10	0.61
(2,360)	1:A:122:ILE:HG22	1:A:127:GLY:HA2	4	0.61
(2,360)	1:A:122:ILE:HG21	1:A:127:GLY:HA2	4	0.61
(2,360)	1:A:122:ILE:HG23	1:A:127:GLY:HA2	4	0.61
(2,1866)	1:A:88:GLU:H	1:A:87:GLU:HB3	3	0.61
(2,1866)	1:A:88:GLU:H	1:A:88:GLU:HB3	3	0.61
(2,1554)	1:A:86:ILE:HA	1:A:87:GLU:HB3	9	0.61
(2,1554)	1:A:86:ILE:HA	1:A:88:GLU:HB3	9	0.61
(2,1524)	1:A:108:LYS:HD3	1:A:135:VAL:HA	4	0.61
(2,1524)	1:A:110:VAL:HA	1:A:89:LEU:HB2	4	0.61
(2,1524)	1:A:136:LYS:HD2	1:A:135:VAL:HA	4	0.61
(1,24)	1:A:75:LYS:HG3	1:A:78:LYS:HE3	1	0.61
(2,587)	1:A:71:LYS:HD3	1:A:71:LYS:HA	6	0.6
(2,560)	1:A:70:SER:HB2	1:A:70:SER:HA	1	0.6
(2,560)	1:A:70:SER:HB2	1:A:70:SER:HA	2	0.6
(2,560)	1:A:70:SER:HB2	1:A:70:SER:HA	3	0.6
(2,560)	1:A:70:SER:HB2	1:A:70:SER:HA	4	0.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,560)	1:A:70:SER:HB2	1:A:70:SER:HA	5	0.6
(2,560)	1:A:70:SER:HB2	1:A:70:SER:HA	6	0.6
(2,560)	1:A:70:SER:HB2	1:A:70:SER:HA	8	0.6
(2,1866)	1:A:88:GLU:H	1:A:87:GLU:HB3	8	0.6
(2,1866)	1:A:88:GLU:H	1:A:88:GLU:HB3	8	0.6
(2,1599)	1:A:75:LYS:HG2	1:A:75:LYS:HA	9	0.6
(2,1599)	1:A:78:LYS:HG3	1:A:75:LYS:HA	9	0.6
(2,1298)	1:A:86:ILE:HG13	1:A:85:ARG:HA	2	0.6
(2,1298)	1:A:86:ILE:HG13	1:A:84:THR:HA	2	0.6
(2,1298)	1:A:86:ILE:HG13	1:A:85:ARG:HA	9	0.6
(2,1298)	1:A:86:ILE:HG13	1:A:84:THR:HA	9	0.6
(2,1042)	1:A:89:LEU:H	1:A:88:GLU:HB3	5	0.6
(2,59)	1:A:105:GLU:HG3	1:A:59:MET:HG3	2	0.59
(2,237)	1:A:110:VAL:HG12	1:A:107:PRO:HD3	9	0.59
(2,237)	1:A:110:VAL:HG11	1:A:107:PRO:HD3	9	0.59
(2,237)	1:A:110:VAL:HG13	1:A:107:PRO:HD3	9	0.59
(2,1653)	1:A:66:GLU:HA	1:A:74:SER:HA	8	0.59
(2,1653)	1:A:66:GLU:HA	1:A:100:GLY:HA2	8	0.59
(2,1554)	1:A:86:ILE:HA	1:A:87:GLU:HB3	7	0.59
(2,1554)	1:A:86:ILE:HA	1:A:88:GLU:HB3	7	0.59
(2,1298)	1:A:86:ILE:HG13	1:A:85:ARG:HA	10	0.59
(2,1298)	1:A:86:ILE:HG13	1:A:84:THR:HA	10	0.59
(2,129)	1:A:120:HIS:HB2	1:A:117:GLN:HB2	1	0.59
(2,129)	1:A:120:HIS:HB2	1:A:117:GLN:HB3	1	0.59
(2,1252)	1:A:136:LYS:HD3	1:A:59:MET:HG2	8	0.59
(2,1252)	1:A:66:GLU:HG3	1:A:71:LYS:HD3	8	0.59
(1,8)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:90:GLY:HA2	4	0.59
(2,759)	1:A:111:SER:H	1:A:114:ASP:HB3	3	0.58
(2,587)	1:A:71:LYS:HD3	1:A:71:LYS:HA	2	0.58
(2,1866)	1:A:88:GLU:H	1:A:87:GLU:HB3	2	0.58
(2,1866)	1:A:88:GLU:H	1:A:88:GLU:HB3	2	0.58
(2,1866)	1:A:88:GLU:H	1:A:87:GLU:HB3	10	0.58
(2,1866)	1:A:88:GLU:H	1:A:88:GLU:HB3	10	0.58
(2,1833)	1:A:137:LEU:H	1:A:134:GLU:HB2	7	0.58
(2,1833)	1:A:137:LEU:H	1:A:135:VAL:HB	7	0.58
(2,1833)	1:A:137:LEU:H	1:A:105:GLU:HG3	7	0.58
(2,137)	1:A:69:GLU:HB2	1:A:69:GLU:HA	4	0.58
(2,137)	1:A:69:GLU:HB2	1:A:69:GLU:HA	7	0.58
(2,1324)	1:A:107:PRO:HB3	1:A:108:LYS:HG3	8	0.58
(2,1324)	1:A:115:MET:HG3	1:A:108:LYS:HG3	8	0.58
(2,1226)	1:A:66:GLU:HB2	1:A:73:PHE:HB3	8	0.58
(2,1226)	1:A:66:GLU:HB2	1:A:75:LYS:H	8	0.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1226)	1:A:71:LYS:HB3	1:A:72:ASN:HB2	8	0.58
(2,1226)	1:A:71:LYS:HB3	1:A:72:ASN:HB3	8	0.58
(1,45)	1:A:125:ALA:HA	1:A:127:GLY:HA2	6	0.58
(2,727)	1:A:111:SER:HB3	1:A:114:ASP:HB3	6	0.57
(2,646)	1:A:106:LEU:HG	1:A:107:PRO:HD3	2	0.57
(2,34)	1:A:58:GLU:HG2	1:A:135:VAL:HG22	3	0.57
(2,34)	1:A:58:GLU:HG2	1:A:135:VAL:HG21	3	0.57
(2,34)	1:A:58:GLU:HG2	1:A:135:VAL:HG23	3	0.57
(2,34)	1:A:58:GLU:HG2	1:A:135:VAL:HG12	3	0.57
(2,34)	1:A:58:GLU:HG2	1:A:135:VAL:HG11	3	0.57
(2,34)	1:A:58:GLU:HG2	1:A:135:VAL:HG13	3	0.57
(2,237)	1:A:110:VAL:HG12	1:A:107:PRO:HD3	5	0.57
(2,237)	1:A:110:VAL:HG11	1:A:107:PRO:HD3	5	0.57
(2,237)	1:A:110:VAL:HG13	1:A:107:PRO:HD3	5	0.57
(2,1866)	1:A:88:GLU:H	1:A:87:GLU:HB3	1	0.57
(2,1866)	1:A:88:GLU:H	1:A:88:GLU:HB3	1	0.57
(2,1774)	1:A:63:MET:HB2	1:A:104:ILE:HB	5	0.57
(2,1774)	1:A:104:ILE:HB	1:A:87:GLU:HG2	5	0.57
(2,1774)	1:A:104:ILE:HB	1:A:103:MET:HG3	5	0.57
(2,1599)	1:A:75:LYS:HG2	1:A:75:LYS:HA	5	0.57
(2,1599)	1:A:78:LYS:HG3	1:A:75:LYS:HA	5	0.57
(2,1226)	1:A:66:GLU:HB2	1:A:73:PHE:HB3	3	0.57
(2,1226)	1:A:66:GLU:HB2	1:A:75:LYS:H	3	0.57
(2,1226)	1:A:71:LYS:HB3	1:A:72:ASN:HB2	3	0.57
(2,1226)	1:A:71:LYS:HB3	1:A:72:ASN:HB3	3	0.57
(2,1042)	1:A:89:LEU:H	1:A:88:GLU:HB3	3	0.57
(1,8)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:90:GLY:HA2	8	0.57
(1,5)	1:A:58:GLU:HG2	1:A:90:GLY:HA2	10	0.57
(1,35)	1:A:88:GLU:HG3	1:A:85:ARG:HA	7	0.57
(2,62)	1:A:107:PRO:HB3	1:A:109:THR:HG21	7	0.56
(2,62)	1:A:107:PRO:HB3	1:A:109:THR:HG22	7	0.56
(2,62)	1:A:107:PRO:HB3	1:A:109:THR:HG23	7	0.56
(2,1866)	1:A:88:GLU:H	1:A:87:GLU:HB3	6	0.56
(2,1866)	1:A:88:GLU:H	1:A:88:GLU:HB3	6	0.56
(2,1599)	1:A:75:LYS:HG2	1:A:75:LYS:HA	7	0.56
(2,1599)	1:A:78:LYS:HG3	1:A:75:LYS:HA	7	0.56
(2,1524)	1:A:108:LYS:HD3	1:A:135:VAL:HA	10	0.56
(2,1524)	1:A:110:VAL:HA	1:A:89:LEU:HB2	10	0.56
(2,1524)	1:A:136:LYS:HD2	1:A:135:VAL:HA	10	0.56
(2,1435)	1:A:104:ILE:HG22	1:A:60:THR:HA	8	0.56
(2,1435)	1:A:104:ILE:HG21	1:A:60:THR:HA	8	0.56
(2,1435)	1:A:104:ILE:HG23	1:A:60:THR:HA	8	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1435)	1:A:104:ILE:HG22	1:A:91:GLY:HA2	8	0.56
(2,1435)	1:A:104:ILE:HG21	1:A:91:GLY:HA2	8	0.56
(2,1435)	1:A:104:ILE:HG23	1:A:91:GLY:HA2	8	0.56
(2,131)	1:A:136:LYS:HD3	1:A:58:GLU:HG3	2	0.56
(2,1042)	1:A:89:LEU:H	1:A:88:GLU:HB3	1	0.56
(1,11)	1:A:66:GLU:HB3	1:A:101:VAL:HA	2	0.56
(2,646)	1:A:106:LEU:HG	1:A:107:PRO:HD3	3	0.55
(2,62)	1:A:107:PRO:HB3	1:A:109:THR:HG21	1	0.55
(2,62)	1:A:107:PRO:HB3	1:A:109:THR:HG22	1	0.55
(2,62)	1:A:107:PRO:HB3	1:A:109:THR:HG23	1	0.55
(2,425)	1:A:111:SER:HB2	1:A:114:ASP:HB2	2	0.55
(2,1741)	1:A:136:LYS:HE2	1:A:136:LYS:HA	9	0.55
(2,1741)	1:A:67:LYS:HE2	1:A:70:SER:HA	9	0.55
(2,1741)	1:A:71:LYS:HE2	1:A:72:ASN:HA	9	0.55
(2,1741)	1:A:75:LYS:HE2	1:A:79:SER:HA	9	0.55
(2,1532)	1:A:88:GLU:HB3	1:A:81:SER:HA	6	0.55
(2,1532)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:83:SER:HA	6	0.55
(2,1343)	1:A:137:LEU:HD12	1:A:136:LYS:HE2	4	0.55
(2,1343)	1:A:137:LEU:HD11	1:A:136:LYS:HE2	4	0.55
(2,1343)	1:A:137:LEU:HD13	1:A:136:LYS:HE2	4	0.55
(2,1343)	1:A:137:LEU:HD12	1:A:136:LYS:HE3	4	0.55
(2,1343)	1:A:137:LEU:HD11	1:A:136:LYS:HE3	4	0.55
(2,1343)	1:A:137:LEU:HD13	1:A:136:LYS:HE3	4	0.55
(2,1343)	1:A:106:LEU:HD22	1:A:113:HIS:HB2	4	0.55
(2,1343)	1:A:106:LEU:HD21	1:A:113:HIS:HB2	4	0.55
(2,1343)	1:A:106:LEU:HD23	1:A:113:HIS:HB2	4	0.55
(2,1298)	1:A:86:ILE:HG13	1:A:85:ARG:HA	3	0.55
(2,1298)	1:A:86:ILE:HG13	1:A:84:THR:HA	3	0.55
(2,1298)	1:A:86:ILE:HG13	1:A:85:ARG:HA	6	0.55
(2,1298)	1:A:86:ILE:HG13	1:A:84:THR:HA	6	0.55
(2,1298)	1:A:86:ILE:HG13	1:A:85:ARG:HA	7	0.55
(2,1298)	1:A:86:ILE:HG13	1:A:84:THR:HA	7	0.55
(2,1298)	1:A:86:ILE:HG13	1:A:85:ARG:HA	8	0.55
(2,1298)	1:A:86:ILE:HG13	1:A:84:THR:HA	8	0.55
(2,1245)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG22	5	0.55
(2,1245)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG21	5	0.55
(2,1245)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG23	5	0.55
(2,1245)	1:A:88:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG22	5	0.55
(2,1245)	1:A:88:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG21	5	0.55
(2,1245)	1:A:88:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG23	5	0.55
(2,1208)	1:A:66:GLU:HB3	1:A:100:GLY:HA2	5	0.55
(2,1208)	1:A:66:GLU:HB3	1:A:74:SER:HA	5	0.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,759)	1:A:111:SER:H	1:A:114:ASP:HB3	1	0.54
(2,240)	1:A:110:VAL:HG12	1:A:89:LEU:HB2	5	0.54
(2,240)	1:A:110:VAL:HG11	1:A:89:LEU:HB2	5	0.54
(2,240)	1:A:110:VAL:HG13	1:A:89:LEU:HB2	5	0.54
(2,1774)	1:A:63:MET:HB2	1:A:104:ILE:HB	8	0.54
(2,1774)	1:A:104:ILE:HB	1:A:87:GLU:HG2	8	0.54
(2,1774)	1:A:104:ILE:HB	1:A:103:MET:HG3	8	0.54
(2,1653)	1:A:66:GLU:HA	1:A:74:SER:HA	9	0.54
(2,1653)	1:A:66:GLU:HA	1:A:100:GLY:HA2	9	0.54
(2,1298)	1:A:86:ILE:HG13	1:A:85:ARG:HA	1	0.54
(2,1298)	1:A:86:ILE:HG13	1:A:84:THR:HA	1	0.54
(2,1298)	1:A:86:ILE:HG13	1:A:85:ARG:HA	4	0.54
(2,1298)	1:A:86:ILE:HG13	1:A:84:THR:HA	4	0.54
(2,1298)	1:A:86:ILE:HG13	1:A:85:ARG:HA	5	0.54
(2,1298)	1:A:86:ILE:HG13	1:A:84:THR:HA	5	0.54
(2,1226)	1:A:66:GLU:HB2	1:A:73:PHE:HB3	6	0.54
(2,1226)	1:A:66:GLU:HB2	1:A:75:LYS:H	6	0.54
(2,1226)	1:A:71:LYS:HB3	1:A:72:ASN:HB2	6	0.54
(2,1226)	1:A:71:LYS:HB3	1:A:72:ASN:HB3	6	0.54
(2,1190)	1:A:59:MET:HG2	1:A:133:SER:HB2	2	0.54
(2,1190)	1:A:63:MET:HB2	1:A:130:GLY:HA2	2	0.54
(2,1190)	1:A:107:PRO:HB3	1:A:90:GLY:HA2	2	0.54
(1,8)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:90:GLY:HA2	6	0.54
(2,759)	1:A:111:SER:H	1:A:114:ASP:HB3	4	0.53
(2,360)	1:A:122:ILE:HG22	1:A:127:GLY:HA2	9	0.53
(2,360)	1:A:122:ILE:HG21	1:A:127:GLY:HA2	9	0.53
(2,360)	1:A:122:ILE:HG23	1:A:127:GLY:HA2	9	0.53
(2,1908)	1:A:84:THR:H	1:A:87:GLU:HG2	10	0.53
(2,1908)	1:A:84:THR:H	1:A:88:GLU:HG3	10	0.53
(2,144)	1:A:78:LYS:HB3	1:A:78:LYS:HD2	9	0.53
(2,1435)	1:A:104:ILE:HG22	1:A:60:THR:HA	1	0.53
(2,1435)	1:A:104:ILE:HG21	1:A:60:THR:HA	1	0.53
(2,1435)	1:A:104:ILE:HG23	1:A:60:THR:HA	1	0.53
(2,1435)	1:A:104:ILE:HG22	1:A:91:GLY:HA2	1	0.53
(2,1435)	1:A:104:ILE:HG21	1:A:91:GLY:HA2	1	0.53
(2,1435)	1:A:104:ILE:HG23	1:A:91:GLY:HA2	1	0.53
(2,1435)	1:A:104:ILE:HG22	1:A:60:THR:HA	6	0.53
(2,1435)	1:A:104:ILE:HG21	1:A:60:THR:HA	6	0.53
(2,1435)	1:A:104:ILE:HG23	1:A:60:THR:HA	6	0.53
(2,1435)	1:A:104:ILE:HG22	1:A:91:GLY:HA2	6	0.53
(2,1435)	1:A:104:ILE:HG21	1:A:91:GLY:HA2	6	0.53
(2,1435)	1:A:104:ILE:HG23	1:A:91:GLY:HA2	6	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1435)	1:A:104:ILE:HG22	1:A:60:THR:HA	9	0.53
(2,1435)	1:A:104:ILE:HG21	1:A:60:THR:HA	9	0.53
(2,1435)	1:A:104:ILE:HG23	1:A:60:THR:HA	9	0.53
(2,1435)	1:A:104:ILE:HG22	1:A:91:GLY:HA2	9	0.53
(2,1435)	1:A:104:ILE:HG21	1:A:91:GLY:HA2	9	0.53
(2,1435)	1:A:104:ILE:HG23	1:A:91:GLY:HA2	9	0.53
(2,1265)	1:A:78:LYS:HD3	1:A:78:LYS:HA	9	0.53
(2,1265)	1:A:78:LYS:HD2	1:A:78:LYS:HA	9	0.53
(2,1245)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG22	10	0.53
(2,1245)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG21	10	0.53
(2,1245)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG23	10	0.53
(2,1245)	1:A:88:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG22	10	0.53
(2,1245)	1:A:88:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG21	10	0.53
(2,1245)	1:A:88:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG23	10	0.53
(2,1226)	1:A:66:GLU:HB2	1:A:73:PHE:HB3	2	0.53
(2,1226)	1:A:66:GLU:HB2	1:A:75:LYS:H	2	0.53
(2,1226)	1:A:71:LYS:HB3	1:A:72:ASN:HB2	2	0.53
(2,1226)	1:A:71:LYS:HB3	1:A:72:ASN:HB3	2	0.53
(2,1204)	1:A:59:MET:HG3	1:A:133:SER:HA	4	0.53
(2,1204)	1:A:59:MET:HG3	1:A:134:GLU:HA	4	0.53
(2,1204)	1:A:59:MET:HG3	1:A:58:GLU:HA	4	0.53
(2,1204)	1:A:59:MET:HG3	1:A:60:THR:HB	4	0.53
(2,1190)	1:A:59:MET:HG2	1:A:133:SER:HB2	9	0.53
(2,1190)	1:A:63:MET:HB2	1:A:130:GLY:HA2	9	0.53
(2,1190)	1:A:107:PRO:HB3	1:A:90:GLY:HA2	9	0.53
(2,82)	1:A:59:MET:HG3	1:A:136:LYS:HA	4	0.52
(2,62)	1:A:107:PRO:HB3	1:A:109:THR:HG21	5	0.52
(2,62)	1:A:107:PRO:HB3	1:A:109:THR:HG22	5	0.52
(2,62)	1:A:107:PRO:HB3	1:A:109:THR:HG23	5	0.52
(2,62)	1:A:107:PRO:HB3	1:A:109:THR:HG21	9	0.52
(2,62)	1:A:107:PRO:HB3	1:A:109:THR:HG22	9	0.52
(2,62)	1:A:107:PRO:HB3	1:A:109:THR:HG23	9	0.52
(2,360)	1:A:122:ILE:HG22	1:A:127:GLY:HA2	1	0.52
(2,360)	1:A:122:ILE:HG21	1:A:127:GLY:HA2	1	0.52
(2,360)	1:A:122:ILE:HG23	1:A:127:GLY:HA2	1	0.52
(2,360)	1:A:122:ILE:HG22	1:A:127:GLY:HA2	3	0.52
(2,360)	1:A:122:ILE:HG21	1:A:127:GLY:HA2	3	0.52
(2,360)	1:A:122:ILE:HG23	1:A:127:GLY:HA2	3	0.52
(2,360)	1:A:122:ILE:HG22	1:A:127:GLY:HA2	8	0.52
(2,360)	1:A:122:ILE:HG21	1:A:127:GLY:HA2	8	0.52
(2,360)	1:A:122:ILE:HG23	1:A:127:GLY:HA2	8	0.52
(2,28)	1:A:87:GLU:HG2	1:A:87:GLU:HB3	9	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1774)	1:A:63:MET:HB2	1:A:104:ILE:HB	6	0.52
(2,1774)	1:A:104:ILE:HB	1:A:87:GLU:HG2	6	0.52
(2,1774)	1:A:104:ILE:HB	1:A:103:MET:HG3	6	0.52
(2,1653)	1:A:66:GLU:HA	1:A:74:SER:HA	5	0.52
(2,1653)	1:A:66:GLU:HA	1:A:100:GLY:HA2	5	0.52
(2,1506)	1:A:128:VAL:HB	1:A:70:SER:HB2	7	0.52
(2,1506)	1:A:66:GLU:HB2	1:A:70:SER:HB2	7	0.52
(2,1506)	1:A:128:VAL:HB	1:A:70:SER:HB3	7	0.52
(2,1506)	1:A:66:GLU:HB2	1:A:70:SER:HB3	7	0.52
(2,1506)	1:A:70:SER:HB3	1:A:71:LYS:HB3	7	0.52
(2,1369)	1:A:110:VAL:HG22	1:A:86:ILE:HA	10	0.52
(2,1369)	1:A:110:VAL:HG21	1:A:86:ILE:HA	10	0.52
(2,1369)	1:A:110:VAL:HG23	1:A:86:ILE:HA	10	0.52
(2,1369)	1:A:110:VAL:HG22	1:A:107:PRO:HD3	10	0.52
(2,1369)	1:A:110:VAL:HG21	1:A:107:PRO:HD3	10	0.52
(2,1369)	1:A:110:VAL:HG23	1:A:107:PRO:HD3	10	0.52
(2,1245)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG22	1	0.52
(2,1245)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG21	1	0.52
(2,1245)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG23	1	0.52
(2,1245)	1:A:88:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG22	1	0.52
(2,1245)	1:A:88:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG21	1	0.52
(2,1245)	1:A:88:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG23	1	0.52
(2,1245)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG22	2	0.52
(2,1245)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG21	2	0.52
(2,1245)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG23	2	0.52
(2,1245)	1:A:88:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG22	2	0.52
(2,1245)	1:A:88:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG21	2	0.52
(2,1245)	1:A:88:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG23	2	0.52
(2,1208)	1:A:66:GLU:HB3	1:A:100:GLY:HA2	6	0.52
(2,1208)	1:A:66:GLU:HB3	1:A:74:SER:HA	6	0.52
(2,1208)	1:A:66:GLU:HB3	1:A:100:GLY:HA2	8	0.52
(2,1208)	1:A:66:GLU:HB3	1:A:74:SER:HA	8	0.52
(2,772)	1:A:62:LEU:H	1:A:103:MET:HG3	5	0.51
(2,759)	1:A:111:SER:H	1:A:114:ASP:HB3	5	0.51
(2,646)	1:A:106:LEU:HG	1:A:107:PRO:HD3	6	0.51
(2,1532)	1:A:88:GLU:HB3	1:A:81:SER:HA	8	0.51
(2,1532)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:83:SER:HA	8	0.51
(2,1435)	1:A:104:ILE:HG22	1:A:60:THR:HA	7	0.51
(2,1435)	1:A:104:ILE:HG21	1:A:60:THR:HA	7	0.51
(2,1435)	1:A:104:ILE:HG23	1:A:60:THR:HA	7	0.51
(2,1435)	1:A:104:ILE:HG22	1:A:91:GLY:HA2	7	0.51
(2,1435)	1:A:104:ILE:HG21	1:A:91:GLY:HA2	7	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1435)	1:A:104:ILE:HG23	1:A:91:GLY:HA2	7	0.51
(2,1325)	1:A:136:LYS:HG3	1:A:58:GLU:HG2	4	0.51
(2,1325)	1:A:71:LYS:HG3	1:A:68:GLN:HB3	4	0.51
(2,1325)	1:A:108:LYS:HG3	1:A:115:MET:HB3	4	0.51
(2,1208)	1:A:66:GLU:HB3	1:A:100:GLY:HA2	3	0.51
(2,1208)	1:A:66:GLU:HB3	1:A:74:SER:HA	3	0.51
(2,759)	1:A:111:SER:H	1:A:114:ASP:HB3	6	0.5
(2,759)	1:A:111:SER:H	1:A:114:ASP:HB3	9	0.5
(2,1867)	1:A:88:GLU:H	1:A:86:ILE:HB	7	0.5
(2,1867)	1:A:88:GLU:H	1:A:89:LEU:HB3	7	0.5
(2,1833)	1:A:137:LEU:H	1:A:134:GLU:HB2	2	0.5
(2,1833)	1:A:137:LEU:H	1:A:135:VAL:HB	2	0.5
(2,1833)	1:A:137:LEU:H	1:A:105:GLU:HG3	2	0.5
(2,1504)	1:A:133:SER:HB3	1:A:62:LEU:HD22	4	0.5
(2,1504)	1:A:133:SER:HB3	1:A:62:LEU:HD21	4	0.5
(2,1504)	1:A:133:SER:HB3	1:A:62:LEU:HD23	4	0.5
(2,1504)	1:A:70:SER:HB2	1:A:64:VAL:HG22	4	0.5
(2,1504)	1:A:70:SER:HB2	1:A:64:VAL:HG21	4	0.5
(2,1504)	1:A:70:SER:HB2	1:A:64:VAL:HG23	4	0.5
(2,1504)	1:A:70:SER:HB3	1:A:64:VAL:HG22	4	0.5
(2,1504)	1:A:70:SER:HB3	1:A:64:VAL:HG21	4	0.5
(2,1504)	1:A:70:SER:HB3	1:A:64:VAL:HG23	4	0.5
(2,1435)	1:A:104:ILE:HG22	1:A:60:THR:HA	4	0.5
(2,1435)	1:A:104:ILE:HG21	1:A:60:THR:HA	4	0.5
(2,1435)	1:A:104:ILE:HG23	1:A:60:THR:HA	4	0.5
(2,1435)	1:A:104:ILE:HG22	1:A:91:GLY:HA2	4	0.5
(2,1435)	1:A:104:ILE:HG21	1:A:91:GLY:HA2	4	0.5
(2,1435)	1:A:104:ILE:HG23	1:A:91:GLY:HA2	4	0.5
(2,1435)	1:A:104:ILE:HG22	1:A:60:THR:HA	5	0.5
(2,1435)	1:A:104:ILE:HG21	1:A:60:THR:HA	5	0.5
(2,1435)	1:A:104:ILE:HG23	1:A:60:THR:HA	5	0.5
(2,1435)	1:A:104:ILE:HG22	1:A:91:GLY:HA2	5	0.5
(2,1435)	1:A:104:ILE:HG21	1:A:91:GLY:HA2	5	0.5
(2,1435)	1:A:104:ILE:HG23	1:A:91:GLY:HA2	5	0.5
(2,129)	1:A:120:HIS:HB2	1:A:117:GLN:HB2	2	0.5
(2,129)	1:A:120:HIS:HB2	1:A:117:GLN:HB3	2	0.5
(2,1252)	1:A:136:LYS:HD3	1:A:59:MET:HG2	7	0.5
(2,1252)	1:A:66:GLU:HG3	1:A:71:LYS:HD3	7	0.5
(2,121)	1:A:58:GLU:HB3	1:A:59:MET:HA	8	0.5
(2,1208)	1:A:66:GLU:HB3	1:A:100:GLY:HA2	2	0.5
(2,1208)	1:A:66:GLU:HB3	1:A:74:SER:HA	2	0.5
(2,759)	1:A:111:SER:H	1:A:114:ASP:HB3	8	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,646)	1:A:106:LEU:HG	1:A:107:PRO:HD3	5	0.49
(2,360)	1:A:122:ILE:HG22	1:A:127:GLY:HA2	6	0.49
(2,360)	1:A:122:ILE:HG21	1:A:127:GLY:HA2	6	0.49
(2,360)	1:A:122:ILE:HG23	1:A:127:GLY:HA2	6	0.49
(2,1866)	1:A:88:GLU:H	1:A:87:GLU:HB3	5	0.49
(2,1866)	1:A:88:GLU:H	1:A:88:GLU:HB3	5	0.49
(2,1653)	1:A:66:GLU:HA	1:A:74:SER:HA	3	0.49
(2,1653)	1:A:66:GLU:HA	1:A:100:GLY:HA2	3	0.49
(2,1369)	1:A:110:VAL:HG22	1:A:86:ILE:HA	1	0.49
(2,1369)	1:A:110:VAL:HG21	1:A:86:ILE:HA	1	0.49
(2,1369)	1:A:110:VAL:HG23	1:A:86:ILE:HA	1	0.49
(2,1369)	1:A:110:VAL:HG22	1:A:107:PRO:HD3	1	0.49
(2,1369)	1:A:110:VAL:HG21	1:A:107:PRO:HD3	1	0.49
(2,1369)	1:A:110:VAL:HG23	1:A:107:PRO:HD3	1	0.49
(2,1245)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG22	3	0.49
(2,1245)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG21	3	0.49
(2,1245)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG23	3	0.49
(2,1245)	1:A:88:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG22	3	0.49
(2,1245)	1:A:88:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG21	3	0.49
(2,1245)	1:A:88:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG23	3	0.49
(2,1226)	1:A:66:GLU:HB2	1:A:73:PHE:HB3	5	0.49
(2,1226)	1:A:66:GLU:HB2	1:A:75:LYS:H	5	0.49
(2,1226)	1:A:71:LYS:HB3	1:A:72:ASN:HB2	5	0.49
(2,1226)	1:A:71:LYS:HB3	1:A:72:ASN:HB3	5	0.49
(2,1208)	1:A:66:GLU:HB3	1:A:100:GLY:HA2	9	0.49
(2,1208)	1:A:66:GLU:HB3	1:A:74:SER:HA	9	0.49
(2,759)	1:A:111:SER:H	1:A:114:ASP:HB3	7	0.48
(2,646)	1:A:106:LEU:HG	1:A:107:PRO:HD3	10	0.48
(2,1506)	1:A:128:VAL:HB	1:A:70:SER:HB2	9	0.48
(2,1506)	1:A:66:GLU:HB2	1:A:70:SER:HB2	9	0.48
(2,1506)	1:A:128:VAL:HB	1:A:70:SER:HB3	9	0.48
(2,1506)	1:A:66:GLU:HB2	1:A:70:SER:HB3	9	0.48
(2,1506)	1:A:70:SER:HB3	1:A:71:LYS:HB3	9	0.48
(2,1504)	1:A:133:SER:HB3	1:A:62:LEU:HD22	7	0.48
(2,1504)	1:A:133:SER:HB3	1:A:62:LEU:HD21	7	0.48
(2,1504)	1:A:133:SER:HB3	1:A:62:LEU:HD23	7	0.48
(2,1504)	1:A:70:SER:HB2	1:A:64:VAL:HG22	7	0.48
(2,1504)	1:A:70:SER:HB2	1:A:64:VAL:HG21	7	0.48
(2,1504)	1:A:70:SER:HB2	1:A:64:VAL:HG23	7	0.48
(2,1504)	1:A:70:SER:HB3	1:A:64:VAL:HG22	7	0.48
(2,1504)	1:A:70:SER:HB3	1:A:64:VAL:HG21	7	0.48
(2,1504)	1:A:70:SER:HB3	1:A:64:VAL:HG23	7	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1435)	1:A:104:ILE:HG22	1:A:60:THR:HA	3	0.48
(2,1435)	1:A:104:ILE:HG21	1:A:60:THR:HA	3	0.48
(2,1435)	1:A:104:ILE:HG23	1:A:60:THR:HA	3	0.48
(2,1435)	1:A:104:ILE:HG22	1:A:91:GLY:HA2	3	0.48
(2,1435)	1:A:104:ILE:HG21	1:A:91:GLY:HA2	3	0.48
(2,1435)	1:A:104:ILE:HG23	1:A:91:GLY:HA2	3	0.48
(2,1369)	1:A:110:VAL:HG22	1:A:86:ILE:HA	2	0.48
(2,1369)	1:A:110:VAL:HG21	1:A:86:ILE:HA	2	0.48
(2,1369)	1:A:110:VAL:HG23	1:A:86:ILE:HA	2	0.48
(2,1369)	1:A:110:VAL:HG22	1:A:107:PRO:HD3	2	0.48
(2,1369)	1:A:110:VAL:HG21	1:A:107:PRO:HD3	2	0.48
(2,1369)	1:A:110:VAL:HG23	1:A:107:PRO:HD3	2	0.48
(2,1369)	1:A:110:VAL:HG22	1:A:86:ILE:HA	3	0.48
(2,1369)	1:A:110:VAL:HG21	1:A:86:ILE:HA	3	0.48
(2,1369)	1:A:110:VAL:HG23	1:A:86:ILE:HA	3	0.48
(2,1369)	1:A:110:VAL:HG22	1:A:107:PRO:HD3	3	0.48
(2,1369)	1:A:110:VAL:HG21	1:A:107:PRO:HD3	3	0.48
(2,1369)	1:A:110:VAL:HG23	1:A:107:PRO:HD3	3	0.48
(2,1369)	1:A:110:VAL:HG22	1:A:86:ILE:HA	4	0.48
(2,1369)	1:A:110:VAL:HG21	1:A:86:ILE:HA	4	0.48
(2,1369)	1:A:110:VAL:HG23	1:A:86:ILE:HA	4	0.48
(2,1369)	1:A:110:VAL:HG22	1:A:107:PRO:HD3	4	0.48
(2,1369)	1:A:110:VAL:HG21	1:A:107:PRO:HD3	4	0.48
(2,1369)	1:A:110:VAL:HG23	1:A:107:PRO:HD3	4	0.48
(2,1245)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG22	4	0.48
(2,1245)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG21	4	0.48
(2,1245)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG23	4	0.48
(2,1245)	1:A:88:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG22	4	0.48
(2,1245)	1:A:88:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG21	4	0.48
(2,1245)	1:A:88:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG23	4	0.48
(2,1245)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG22	6	0.48
(2,1245)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG21	6	0.48
(2,1245)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG23	6	0.48
(2,1245)	1:A:88:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG22	6	0.48
(2,1245)	1:A:88:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG21	6	0.48
(2,1245)	1:A:88:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG23	6	0.48
(2,1245)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG22	9	0.48
(2,1245)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG21	9	0.48
(2,1245)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG23	9	0.48
(2,1245)	1:A:88:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG22	9	0.48
(2,1245)	1:A:88:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG21	9	0.48
(2,1245)	1:A:88:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG23	9	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,64)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:135:VAL:HG22	3	0.47
(2,64)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:135:VAL:HG21	3	0.47
(2,64)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:135:VAL:HG23	3	0.47
(2,64)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:135:VAL:HG12	3	0.47
(2,64)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:135:VAL:HG11	3	0.47
(2,64)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:135:VAL:HG13	3	0.47
(2,1867)	1:A:88:GLU:H	1:A:86:ILE:HB	1	0.47
(2,1867)	1:A:88:GLU:H	1:A:89:LEU:HB3	1	0.47
(2,1867)	1:A:88:GLU:H	1:A:86:ILE:HB	5	0.47
(2,1867)	1:A:88:GLU:H	1:A:89:LEU:HB3	5	0.47
(2,1833)	1:A:137:LEU:H	1:A:134:GLU:HB2	5	0.47
(2,1833)	1:A:137:LEU:H	1:A:135:VAL:HB	5	0.47
(2,1833)	1:A:137:LEU:H	1:A:105:GLU:HG3	5	0.47
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:61:ARG:HG3	4	0.47
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:61:ARG:HG3	4	0.47
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:61:ARG:HG3	4	0.47
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:61:ARG:HG3	4	0.47
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:61:ARG:HG3	4	0.47
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:61:ARG:HG3	4	0.47
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:62:LEU:HG	4	0.47
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:62:LEU:HG	4	0.47
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:62:LEU:HG	4	0.47
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:62:LEU:HG	4	0.47
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:62:LEU:HG	4	0.47
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:62:LEU:HG	4	0.47
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:71:LYS:HG3	4	0.47
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:71:LYS:HG3	4	0.47
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:71:LYS:HG3	4	0.47
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:71:LYS:HG3	4	0.47
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:71:LYS:HG3	4	0.47
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:71:LYS:HG3	4	0.47
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:119:LEU:HB2	4	0.47
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:119:LEU:HB2	4	0.47
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:119:LEU:HB2	4	0.47
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:119:LEU:HB2	4	0.47
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:119:LEU:HB2	4	0.47
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:119:LEU:HB2	4	0.47
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:124:ALA:HB2	4	0.47
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:124:ALA:HB1	4	0.47
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:124:ALA:HB3	4	0.47
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:124:ALA:HB2	4	0.47
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:124:ALA:HB1	4	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:124:ALA:HB3	4	0.47
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:124:ALA:HB2	4	0.47
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:124:ALA:HB1	4	0.47
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:124:ALA:HB3	4	0.47
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:124:ALA:HB2	4	0.47
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:124:ALA:HB1	4	0.47
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:124:ALA:HB3	4	0.47
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:124:ALA:HB2	4	0.47
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:124:ALA:HB1	4	0.47
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:124:ALA:HB3	4	0.47
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:124:ALA:HB2	4	0.47
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:124:ALA:HB1	4	0.47
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:124:ALA:HB3	4	0.47
(2,1369)	1:A:110:VAL:HG22	1:A:86:ILE:HA	6	0.47
(2,1369)	1:A:110:VAL:HG21	1:A:86:ILE:HA	6	0.47
(2,1369)	1:A:110:VAL:HG23	1:A:86:ILE:HA	6	0.47
(2,1369)	1:A:110:VAL:HG22	1:A:107:PRO:HD3	6	0.47
(2,1369)	1:A:110:VAL:HG21	1:A:107:PRO:HD3	6	0.47
(2,1369)	1:A:110:VAL:HG23	1:A:107:PRO:HD3	6	0.47
(2,1369)	1:A:110:VAL:HG22	1:A:86:ILE:HA	8	0.47
(2,1369)	1:A:110:VAL:HG21	1:A:86:ILE:HA	8	0.47
(2,1369)	1:A:110:VAL:HG23	1:A:86:ILE:HA	8	0.47
(2,1369)	1:A:110:VAL:HG22	1:A:107:PRO:HD3	8	0.47
(2,1369)	1:A:110:VAL:HG21	1:A:107:PRO:HD3	8	0.47
(2,1369)	1:A:110:VAL:HG23	1:A:107:PRO:HD3	8	0.47
(2,1369)	1:A:110:VAL:HG22	1:A:86:ILE:HA	9	0.47
(2,1369)	1:A:110:VAL:HG21	1:A:86:ILE:HA	9	0.47
(2,1369)	1:A:110:VAL:HG23	1:A:86:ILE:HA	9	0.47
(2,1369)	1:A:110:VAL:HG22	1:A:107:PRO:HD3	9	0.47
(2,1369)	1:A:110:VAL:HG21	1:A:107:PRO:HD3	9	0.47
(2,1369)	1:A:110:VAL:HG23	1:A:107:PRO:HD3	9	0.47
(2,1258)	1:A:108:LYS:HD3	1:A:59:MET:HA	4	0.47
(2,1258)	1:A:136:LYS:HD2	1:A:59:MET:HA	4	0.47
(2,1258)	1:A:136:LYS:HD3	1:A:59:MET:HA	4	0.47
(2,1190)	1:A:59:MET:HG2	1:A:133:SER:HB2	5	0.47
(2,1190)	1:A:63:MET:HB2	1:A:130:GLY:HA2	5	0.47
(2,1190)	1:A:107:PRO:HB3	1:A:90:GLY:HA2	5	0.47
(2,1190)	1:A:59:MET:HG2	1:A:133:SER:HB2	7	0.47
(2,1190)	1:A:63:MET:HB2	1:A:130:GLY:HA2	7	0.47
(2,1190)	1:A:107:PRO:HB3	1:A:90:GLY:HA2	7	0.47
(2,87)	1:A:59:MET:HG2	1:A:136:LYS:HG3	10	0.46
(2,1867)	1:A:88:GLU:H	1:A:86:ILE:HB	6	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1867)	1:A:88:GLU:H	1:A:89:LEU:HB3	6	0.46
(2,1524)	1:A:108:LYS:HD3	1:A:135:VAL:HA	2	0.46
(2,1524)	1:A:110:VAL:HA	1:A:89:LEU:HB2	2	0.46
(2,1524)	1:A:136:LYS:HD2	1:A:135:VAL:HA	2	0.46
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:61:ARG:HG3	6	0.46
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:61:ARG:HG3	6	0.46
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:61:ARG:HG3	6	0.46
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:61:ARG:HG3	6	0.46
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:61:ARG:HG3	6	0.46
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:61:ARG:HG3	6	0.46
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:62:LEU:HG	6	0.46
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:62:LEU:HG	6	0.46
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:62:LEU:HG	6	0.46
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:62:LEU:HG	6	0.46
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:62:LEU:HG	6	0.46
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:62:LEU:HG	6	0.46
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:71:LYS:HG3	6	0.46
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:71:LYS:HG3	6	0.46
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:71:LYS:HG3	6	0.46
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:71:LYS:HG3	6	0.46
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:71:LYS:HG3	6	0.46
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:71:LYS:HG3	6	0.46
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:119:LEU:HB2	6	0.46
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:119:LEU:HB2	6	0.46
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:119:LEU:HB2	6	0.46
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:119:LEU:HB2	6	0.46
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:119:LEU:HB2	6	0.46
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:119:LEU:HB2	6	0.46
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:124:ALA:HB2	6	0.46
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:124:ALA:HB1	6	0.46
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:124:ALA:HB3	6	0.46
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:124:ALA:HB2	6	0.46
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:124:ALA:HB1	6	0.46
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:124:ALA:HB3	6	0.46
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:124:ALA:HB2	6	0.46
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:124:ALA:HB1	6	0.46
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:124:ALA:HB3	6	0.46
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:124:ALA:HB2	6	0.46
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:124:ALA:HB1	6	0.46
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:124:ALA:HB3	6	0.46
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:124:ALA:HB2	6	0.46
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:124:ALA:HB1	6	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:124:ALA:HB3	6	0.46
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:124:ALA:HB2	6	0.46
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:124:ALA:HB1	6	0.46
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:124:ALA:HB3	6	0.46
(2,1386)	1:A:109:THR:HG21	1:A:58:GLU:HG2	10	0.46
(2,1386)	1:A:109:THR:HG22	1:A:58:GLU:HG2	10	0.46
(2,1386)	1:A:109:THR:HG23	1:A:58:GLU:HG2	10	0.46
(2,1386)	1:A:84:THR:HG21	1:A:87:GLU:HB3	10	0.46
(2,1386)	1:A:84:THR:HG22	1:A:87:GLU:HB3	10	0.46
(2,1386)	1:A:84:THR:HG23	1:A:87:GLU:HB3	10	0.46
(2,1386)	1:A:84:THR:HG21	1:A:88:GLU:HB3	10	0.46
(2,1386)	1:A:84:THR:HG22	1:A:88:GLU:HB3	10	0.46
(2,1386)	1:A:84:THR:HG23	1:A:88:GLU:HB3	10	0.46
(2,1369)	1:A:110:VAL:HG22	1:A:86:ILE:HA	7	0.46
(2,1369)	1:A:110:VAL:HG21	1:A:86:ILE:HA	7	0.46
(2,1369)	1:A:110:VAL:HG23	1:A:86:ILE:HA	7	0.46
(2,1369)	1:A:110:VAL:HG22	1:A:107:PRO:HD3	7	0.46
(2,1369)	1:A:110:VAL:HG21	1:A:107:PRO:HD3	7	0.46
(2,1369)	1:A:110:VAL:HG23	1:A:107:PRO:HD3	7	0.46
(2,1331)	1:A:123:LEU:HD22	1:A:123:LEU:HA	10	0.46
(2,1331)	1:A:123:LEU:HD21	1:A:123:LEU:HA	10	0.46
(2,1331)	1:A:123:LEU:HD23	1:A:123:LEU:HA	10	0.46
(2,1331)	1:A:137:LEU:HD12	1:A:137:LEU:HA	10	0.46
(2,1331)	1:A:137:LEU:HD11	1:A:137:LEU:HA	10	0.46
(2,1331)	1:A:137:LEU:HD13	1:A:137:LEU:HA	10	0.46
(2,1331)	1:A:119:LEU:HD12	1:A:60:THR:HB	10	0.46
(2,1331)	1:A:119:LEU:HD11	1:A:60:THR:HB	10	0.46
(2,1331)	1:A:119:LEU:HD13	1:A:60:THR:HB	10	0.46
(2,1245)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG22	7	0.46
(2,1245)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG21	7	0.46
(2,1245)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG23	7	0.46
(2,1245)	1:A:88:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG22	7	0.46
(2,1245)	1:A:88:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG21	7	0.46
(2,1245)	1:A:88:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG23	7	0.46
(2,1245)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG22	8	0.46
(2,1245)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG21	8	0.46
(2,1245)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG23	8	0.46
(2,1245)	1:A:88:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG22	8	0.46
(2,1245)	1:A:88:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG21	8	0.46
(2,1245)	1:A:88:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG23	8	0.46
(2,121)	1:A:58:GLU:HB3	1:A:59:MET:HA	2	0.46
(2,1174)	1:A:66:GLU:HG3	1:A:71:LYS:HB2	5	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1174)	1:A:66:GLU:HG3	1:A:71:LYS:HD3	5	0.46
(2,589)	1:A:71:LYS:HG2	1:A:71:LYS:HA	8	0.45
(2,360)	1:A:122:ILE:HG22	1:A:127:GLY:HA2	5	0.45
(2,360)	1:A:122:ILE:HG21	1:A:127:GLY:HA2	5	0.45
(2,360)	1:A:122:ILE:HG23	1:A:127:GLY:HA2	5	0.45
(2,1908)	1:A:84:THR:H	1:A:87:GLU:HG2	4	0.45
(2,1908)	1:A:84:THR:H	1:A:88:GLU:HG3	4	0.45
(2,1867)	1:A:88:GLU:H	1:A:86:ILE:HB	8	0.45
(2,1867)	1:A:88:GLU:H	1:A:89:LEU:HB3	8	0.45
(2,1846)	1:A:106:LEU:H	1:A:105:GLU:HB2	5	0.45
(2,1846)	1:A:106:LEU:H	1:A:105:GLU:HG3	5	0.45
(2,1653)	1:A:66:GLU:HA	1:A:74:SER:HA	1	0.45
(2,1653)	1:A:66:GLU:HA	1:A:100:GLY:HA2	1	0.45
(2,1500)	1:A:133:SER:HB3	1:A:105:GLU:HG3	9	0.45
(2,1500)	1:A:128:VAL:HB	1:A:70:SER:HB2	9	0.45
(2,1500)	1:A:66:GLU:HB2	1:A:70:SER:HB2	9	0.45
(2,1500)	1:A:128:VAL:HB	1:A:70:SER:HB3	9	0.45
(2,1500)	1:A:66:GLU:HB2	1:A:70:SER:HB3	9	0.45
(2,1500)	1:A:70:SER:HB3	1:A:71:LYS:HB3	9	0.45
(2,1190)	1:A:59:MET:HG2	1:A:133:SER:HB2	10	0.45
(2,1190)	1:A:63:MET:HB2	1:A:130:GLY:HA2	10	0.45
(2,1190)	1:A:107:PRO:HB3	1:A:90:GLY:HA2	10	0.45
(1,11)	1:A:66:GLU:HB3	1:A:101:VAL:HA	9	0.45
(2,807)	1:A:67:LYS:H	1:A:71:LYS:HG3	8	0.44
(2,687)	1:A:108:LYS:HE3	1:A:60:THR:HA	10	0.44
(2,587)	1:A:71:LYS:HD3	1:A:71:LYS:HA	7	0.44
(2,258)	1:A:89:LEU:HD22	1:A:114:ASP:HB2	9	0.44
(2,258)	1:A:89:LEU:HD21	1:A:114:ASP:HB2	9	0.44
(2,258)	1:A:89:LEU:HD23	1:A:114:ASP:HB2	9	0.44
(2,1904)	1:A:66:GLU:H	1:A:67:LYS:HB2	3	0.44
(2,1904)	1:A:66:GLU:H	1:A:71:LYS:HD3	3	0.44
(2,1867)	1:A:88:GLU:H	1:A:86:ILE:HB	3	0.44
(2,1867)	1:A:88:GLU:H	1:A:89:LEU:HB3	3	0.44
(2,1653)	1:A:66:GLU:HA	1:A:74:SER:HA	2	0.44
(2,1653)	1:A:66:GLU:HA	1:A:100:GLY:HA2	2	0.44
(2,1524)	1:A:108:LYS:HD3	1:A:135:VAL:HA	7	0.44
(2,1524)	1:A:110:VAL:HA	1:A:89:LEU:HB2	7	0.44
(2,1524)	1:A:136:LYS:HD2	1:A:135:VAL:HA	7	0.44
(2,1435)	1:A:104:ILE:HG22	1:A:60:THR:HA	2	0.44
(2,1435)	1:A:104:ILE:HG21	1:A:60:THR:HA	2	0.44
(2,1435)	1:A:104:ILE:HG23	1:A:60:THR:HA	2	0.44
(2,1435)	1:A:104:ILE:HG22	1:A:91:GLY:HA2	2	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1435)	1:A:104:ILE:HG21	1:A:91:GLY:HA2	2	0.44
(2,1435)	1:A:104:ILE:HG23	1:A:91:GLY:HA2	2	0.44
(2,1435)	1:A:104:ILE:HG22	1:A:60:THR:HA	10	0.44
(2,1435)	1:A:104:ILE:HG21	1:A:60:THR:HA	10	0.44
(2,1435)	1:A:104:ILE:HG23	1:A:60:THR:HA	10	0.44
(2,1435)	1:A:104:ILE:HG22	1:A:91:GLY:HA2	10	0.44
(2,1435)	1:A:104:ILE:HG21	1:A:91:GLY:HA2	10	0.44
(2,1435)	1:A:104:ILE:HG23	1:A:91:GLY:HA2	10	0.44
(2,121)	1:A:58:GLU:HB3	1:A:59:MET:HA	5	0.44
(2,1190)	1:A:59:MET:HG2	1:A:133:SER:HB2	6	0.44
(2,1190)	1:A:63:MET:HB2	1:A:130:GLY:HA2	6	0.44
(2,1190)	1:A:107:PRO:HB3	1:A:90:GLY:HA2	6	0.44
(2,646)	1:A:106:LEU:HG	1:A:107:PRO:HD3	1	0.43
(2,646)	1:A:106:LEU:HG	1:A:107:PRO:HD3	4	0.43
(2,633)	1:A:120:HIS:HB2	1:A:120:HIS:HD2	4	0.43
(2,570)	1:A:121:ASP:HA	1:A:120:HIS:HB2	10	0.43
(2,1867)	1:A:88:GLU:H	1:A:86:ILE:HB	2	0.43
(2,1867)	1:A:88:GLU:H	1:A:89:LEU:HB3	2	0.43
(2,1866)	1:A:88:GLU:H	1:A:87:GLU:HB3	7	0.43
(2,1866)	1:A:88:GLU:H	1:A:88:GLU:HB3	7	0.43
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:61:ARG:HG3	8	0.43
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:61:ARG:HG3	8	0.43
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:61:ARG:HG3	8	0.43
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:61:ARG:HG3	8	0.43
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:61:ARG:HG3	8	0.43
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:61:ARG:HG3	8	0.43
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:62:LEU:HG	8	0.43
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:62:LEU:HG	8	0.43
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:62:LEU:HG	8	0.43
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:62:LEU:HG	8	0.43
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:62:LEU:HG	8	0.43
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:62:LEU:HG	8	0.43
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:71:LYS:HG3	8	0.43
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:71:LYS:HG3	8	0.43
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:71:LYS:HG3	8	0.43
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:71:LYS:HG3	8	0.43
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:71:LYS:HG3	8	0.43
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:71:LYS:HG3	8	0.43
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:119:LEU:HB2	8	0.43
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:119:LEU:HB2	8	0.43
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:119:LEU:HB2	8	0.43
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:119:LEU:HB2	8	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:119:LEU:HB2	8	0.43
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:119:LEU:HB2	8	0.43
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:124:ALA:HB2	8	0.43
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:124:ALA:HB1	8	0.43
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:124:ALA:HB3	8	0.43
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:124:ALA:HB2	8	0.43
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:124:ALA:HB1	8	0.43
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:124:ALA:HB3	8	0.43
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:124:ALA:HB2	8	0.43
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:124:ALA:HB1	8	0.43
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:124:ALA:HB3	8	0.43
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:124:ALA:HB2	8	0.43
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:124:ALA:HB1	8	0.43
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:124:ALA:HB3	8	0.43
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:124:ALA:HB2	8	0.43
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:124:ALA:HB1	8	0.43
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:124:ALA:HB3	8	0.43
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:124:ALA:HB2	8	0.43
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:124:ALA:HB1	8	0.43
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:124:ALA:HB3	8	0.43
(2,1043)	1:A:89:LEU:H	1:A:89:LEU:HB3	9	0.43
(2,633)	1:A:120:HIS:HB2	1:A:120:HIS:HD2	1	0.42
(2,633)	1:A:120:HIS:HB2	1:A:120:HIS:HD2	6	0.42
(2,240)	1:A:110:VAL:HG12	1:A:89:LEU:HB2	2	0.42
(2,240)	1:A:110:VAL:HG11	1:A:89:LEU:HB2	2	0.42
(2,240)	1:A:110:VAL:HG13	1:A:89:LEU:HB2	2	0.42
(2,1908)	1:A:84:THR:H	1:A:87:GLU:HG2	5	0.42
(2,1908)	1:A:84:THR:H	1:A:88:GLU:HG3	5	0.42
(2,1867)	1:A:88:GLU:H	1:A:86:ILE:HB	4	0.42
(2,1867)	1:A:88:GLU:H	1:A:89:LEU:HB3	4	0.42
(2,1653)	1:A:66:GLU:HA	1:A:74:SER:HA	4	0.42
(2,1653)	1:A:66:GLU:HA	1:A:100:GLY:HA2	4	0.42
(2,1431)	1:A:124:ALA:HB2	1:A:76:MET:HG3	6	0.42
(2,1431)	1:A:124:ALA:HB1	1:A:76:MET:HG3	6	0.42
(2,1431)	1:A:124:ALA:HB3	1:A:76:MET:HG3	6	0.42
(2,1431)	1:A:122:ILE:HG13	1:A:124:ALA:HB2	6	0.42
(2,1431)	1:A:122:ILE:HG13	1:A:124:ALA:HB1	6	0.42
(2,1431)	1:A:122:ILE:HG13	1:A:124:ALA:HB3	6	0.42
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:61:ARG:HG3	1	0.42
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:61:ARG:HG3	1	0.42
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:61:ARG:HG3	1	0.42
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:61:ARG:HG3	1	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:61:ARG:HG3	1	0.42
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:61:ARG:HG3	1	0.42
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:62:LEU:HG	1	0.42
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:62:LEU:HG	1	0.42
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:62:LEU:HG	1	0.42
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:62:LEU:HG	1	0.42
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:62:LEU:HG	1	0.42
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:62:LEU:HG	1	0.42
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:71:LYS:HG3	1	0.42
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:71:LYS:HG3	1	0.42
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:71:LYS:HG3	1	0.42
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:71:LYS:HG3	1	0.42
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:71:LYS:HG3	1	0.42
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:71:LYS:HG3	1	0.42
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:119:LEU:HB2	1	0.42
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:119:LEU:HB2	1	0.42
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:119:LEU:HB2	1	0.42
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:119:LEU:HB2	1	0.42
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:119:LEU:HB2	1	0.42
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:119:LEU:HB2	1	0.42
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:124:ALA:HB2	1	0.42
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:124:ALA:HB1	1	0.42
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:124:ALA:HB3	1	0.42
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:124:ALA:HB2	1	0.42
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:124:ALA:HB1	1	0.42
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:124:ALA:HB3	1	0.42
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:124:ALA:HB2	1	0.42
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:124:ALA:HB1	1	0.42
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:124:ALA:HB3	1	0.42
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:124:ALA:HB2	1	0.42
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:124:ALA:HB1	1	0.42
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:124:ALA:HB3	1	0.42
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:124:ALA:HB2	1	0.42
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:124:ALA:HB1	1	0.42
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:124:ALA:HB3	1	0.42
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:124:ALA:HB2	1	0.42
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:124:ALA:HB1	1	0.42
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:124:ALA:HB3	1	0.42
(2,1257)	1:A:136:LYS:HD2	1:A:59:MET:HG2	1	0.42
(2,1257)	1:A:136:LYS:HD3	1:A:58:GLU:HG3	1	0.42
(2,1257)	1:A:136:LYS:HD3	1:A:59:MET:HG2	1	0.42
(2,1257)	1:A:75:LYS:HD3	1:A:78:LYS:HE2	1	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,121)	1:A:58:GLU:HB3	1:A:59:MET:HA	1	0.42
(2,121)	1:A:58:GLU:HB3	1:A:59:MET:HA	3	0.42
(2,121)	1:A:58:GLU:HB3	1:A:59:MET:HA	6	0.42
(2,1043)	1:A:89:LEU:H	1:A:89:LEU:HB3	3	0.42
(2,1042)	1:A:89:LEU:H	1:A:88:GLU:HB3	6	0.42
(1,26)	1:A:107:PRO:HA	1:A:59:MET:HG3	4	0.42
(1,11)	1:A:66:GLU:HB3	1:A:101:VAL:HA	1	0.42
(2,646)	1:A:106:LEU:HG	1:A:107:PRO:HD3	7	0.41
(2,64)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:135:VAL:HG22	4	0.41
(2,64)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:135:VAL:HG21	4	0.41
(2,64)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:135:VAL:HG23	4	0.41
(2,64)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:135:VAL:HG12	4	0.41
(2,64)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:135:VAL:HG11	4	0.41
(2,64)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:135:VAL:HG13	4	0.41
(2,633)	1:A:120:HIS:HB2	1:A:120:HIS:HD2	3	0.41
(2,633)	1:A:120:HIS:HB2	1:A:120:HIS:HD2	8	0.41
(2,633)	1:A:120:HIS:HB2	1:A:120:HIS:HD2	9	0.41
(2,633)	1:A:120:HIS:HB2	1:A:120:HIS:HD2	10	0.41
(2,589)	1:A:71:LYS:HG2	1:A:71:LYS:HA	5	0.41
(2,570)	1:A:121:ASP:HA	1:A:120:HIS:HB2	8	0.41
(2,1861)	1:A:77:ALA:H	1:A:127:GLY:HA2	6	0.41
(2,1861)	1:A:121:ASP:H	1:A:116:ASP:HB2	6	0.41
(2,1861)	1:A:121:ASP:H	1:A:127:GLY:HA2	6	0.41
(2,1861)	1:A:77:ALA:H	1:A:78:LYS:HE3	6	0.41
(2,1833)	1:A:137:LEU:H	1:A:134:GLU:HB2	1	0.41
(2,1833)	1:A:137:LEU:H	1:A:135:VAL:HB	1	0.41
(2,1833)	1:A:137:LEU:H	1:A:105:GLU:HG3	1	0.41
(2,1833)	1:A:137:LEU:H	1:A:134:GLU:HB2	3	0.41
(2,1833)	1:A:137:LEU:H	1:A:135:VAL:HB	3	0.41
(2,1833)	1:A:137:LEU:H	1:A:105:GLU:HG3	3	0.41
(2,1833)	1:A:137:LEU:H	1:A:134:GLU:HB2	9	0.41
(2,1833)	1:A:137:LEU:H	1:A:135:VAL:HB	9	0.41
(2,1833)	1:A:137:LEU:H	1:A:105:GLU:HG3	9	0.41
(2,1256)	1:A:75:LYS:HD3	1:A:78:LYS:HE3	5	0.41
(2,1256)	1:A:136:LYS:HD2	1:A:59:MET:HG3	5	0.41
(2,1043)	1:A:89:LEU:H	1:A:89:LEU:HB3	1	0.41
(2,654)	1:A:72:ASN:HB2	1:A:126:GLY:HA3	6	0.4
(2,64)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:135:VAL:HG22	5	0.4
(2,64)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:135:VAL:HG21	5	0.4
(2,64)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:135:VAL:HG23	5	0.4
(2,64)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:135:VAL:HG12	5	0.4
(2,64)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:135:VAL:HG11	5	0.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,64)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:135:VAL:HG13	5	0.4
(2,633)	1:A:120:HIS:HB2	1:A:120:HIS:HD2	2	0.4
(2,633)	1:A:120:HIS:HB2	1:A:120:HIS:HD2	5	0.4
(2,633)	1:A:120:HIS:HB2	1:A:120:HIS:HD2	7	0.4
(2,570)	1:A:121:ASP:HA	1:A:120:HIS:HB2	1	0.4
(2,570)	1:A:121:ASP:HA	1:A:120:HIS:HB2	3	0.4
(2,570)	1:A:121:ASP:HA	1:A:120:HIS:HB2	5	0.4
(2,286)	1:A:88:GLU:HG3	1:A:84:THR:HG21	7	0.4
(2,286)	1:A:88:GLU:HG3	1:A:84:THR:HG22	7	0.4
(2,286)	1:A:88:GLU:HG3	1:A:84:THR:HG23	7	0.4
(2,258)	1:A:89:LEU:HD22	1:A:114:ASP:HB2	4	0.4
(2,258)	1:A:89:LEU:HD21	1:A:114:ASP:HB2	4	0.4
(2,258)	1:A:89:LEU:HD23	1:A:114:ASP:HB2	4	0.4
(2,1867)	1:A:88:GLU:H	1:A:86:ILE:HB	9	0.4
(2,1867)	1:A:88:GLU:H	1:A:89:LEU:HB3	9	0.4
(2,1846)	1:A:106:LEU:H	1:A:105:GLU:HB2	8	0.4
(2,1846)	1:A:106:LEU:H	1:A:105:GLU:HG3	8	0.4
(2,1653)	1:A:66:GLU:HA	1:A:74:SER:HA	6	0.4
(2,1653)	1:A:66:GLU:HA	1:A:100:GLY:HA2	6	0.4
(2,1507)	1:A:133:SER:HB3	1:A:138:ALA:HB2	8	0.4
(2,1507)	1:A:133:SER:HB3	1:A:138:ALA:HB1	8	0.4
(2,1507)	1:A:133:SER:HB3	1:A:138:ALA:HB3	8	0.4
(2,1507)	1:A:133:SER:HB3	1:A:61:ARG:HB3	8	0.4
(2,1500)	1:A:133:SER:HB3	1:A:105:GLU:HG3	2	0.4
(2,1500)	1:A:128:VAL:HB	1:A:70:SER:HB2	2	0.4
(2,1500)	1:A:66:GLU:HB2	1:A:70:SER:HB2	2	0.4
(2,1500)	1:A:128:VAL:HB	1:A:70:SER:HB3	2	0.4
(2,1500)	1:A:66:GLU:HB2	1:A:70:SER:HB3	2	0.4
(2,1500)	1:A:70:SER:HB3	1:A:71:LYS:HB3	2	0.4
(2,132)	1:A:75:LYS:HD3	1:A:75:LYS:HA	7	0.4
(2,1042)	1:A:89:LEU:H	1:A:88:GLU:HB3	4	0.4
(2,1042)	1:A:89:LEU:H	1:A:88:GLU:HB3	9	0.4
(2,744)	1:A:105:GLU:H	1:A:105:GLU:HG2	7	0.39
(2,62)	1:A:107:PRO:HB3	1:A:109:THR:HG21	6	0.39
(2,62)	1:A:107:PRO:HB3	1:A:109:THR:HG22	6	0.39
(2,62)	1:A:107:PRO:HB3	1:A:109:THR:HG23	6	0.39
(2,583)	1:A:136:LYS:HA	1:A:133:SER:HB2	1	0.39
(2,360)	1:A:122:ILE:HG22	1:A:127:GLY:HA2	2	0.39
(2,360)	1:A:122:ILE:HG21	1:A:127:GLY:HA2	2	0.39
(2,360)	1:A:122:ILE:HG23	1:A:127:GLY:HA2	2	0.39
(2,311)	1:A:135:VAL:HG22	1:A:133:SER:HB2	1	0.39
(2,311)	1:A:135:VAL:HG21	1:A:133:SER:HB2	1	0.39

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,311)	1:A:135:VAL:HG23	1:A:133:SER:HB2	1	0.39
(2,311)	1:A:135:VAL:HG12	1:A:133:SER:HB2	1	0.39
(2,311)	1:A:135:VAL:HG11	1:A:133:SER:HB2	1	0.39
(2,311)	1:A:135:VAL:HG13	1:A:133:SER:HB2	1	0.39
(2,240)	1:A:110:VAL:HG12	1:A:89:LEU:HB2	6	0.39
(2,240)	1:A:110:VAL:HG11	1:A:89:LEU:HB2	6	0.39
(2,240)	1:A:110:VAL:HG13	1:A:89:LEU:HB2	6	0.39
(2,1861)	1:A:77:ALA:H	1:A:127:GLY:HA2	9	0.39
(2,1861)	1:A:121:ASP:H	1:A:116:ASP:HB2	9	0.39
(2,1861)	1:A:121:ASP:H	1:A:127:GLY:HA2	9	0.39
(2,1861)	1:A:77:ALA:H	1:A:78:LYS:HE3	9	0.39
(2,1657)	1:A:61:ARG:HG2	1:A:105:GLU:HA	7	0.39
(2,1657)	1:A:105:GLU:HA	1:A:106:LEU:HB2	7	0.39
(2,1657)	1:A:105:GLU:HA	1:A:106:LEU:HB3	7	0.39
(2,1624)	1:A:76:MET:HG3	1:A:118:LEU:HA	10	0.39
(2,1624)	1:A:118:LEU:HA	1:A:114:ASP:HB2	10	0.39
(2,1425)	1:A:138:ALA:HB2	1:A:61:ARG:HG3	1	0.39
(2,1425)	1:A:138:ALA:HB1	1:A:61:ARG:HG3	1	0.39
(2,1425)	1:A:138:ALA:HB3	1:A:61:ARG:HG3	1	0.39
(2,1425)	1:A:138:ALA:HB2	1:A:106:LEU:HB2	1	0.39
(2,1425)	1:A:138:ALA:HB2	1:A:106:LEU:HB3	1	0.39
(2,1425)	1:A:138:ALA:HB1	1:A:106:LEU:HB2	1	0.39
(2,1425)	1:A:138:ALA:HB1	1:A:106:LEU:HB3	1	0.39
(2,1425)	1:A:138:ALA:HB3	1:A:106:LEU:HB2	1	0.39
(2,1425)	1:A:138:ALA:HB3	1:A:106:LEU:HB3	1	0.39
(2,1425)	1:A:138:ALA:HB2	1:A:108:LYS:HG3	1	0.39
(2,1425)	1:A:138:ALA:HB1	1:A:108:LYS:HG3	1	0.39
(2,1425)	1:A:138:ALA:HB3	1:A:108:LYS:HG3	1	0.39
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:61:ARG:HG3	5	0.39
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:61:ARG:HG3	5	0.39
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:61:ARG:HG3	5	0.39
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:61:ARG:HG3	5	0.39
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:61:ARG:HG3	5	0.39
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:61:ARG:HG3	5	0.39
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:62:LEU:HG	5	0.39
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:62:LEU:HG	5	0.39
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:62:LEU:HG	5	0.39
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:62:LEU:HG	5	0.39
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:62:LEU:HG	5	0.39
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:62:LEU:HG	5	0.39
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:71:LYS:HG3	5	0.39
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:71:LYS:HG3	5	0.39

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:71:LYS:HG3	5	0.39
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:71:LYS:HG3	5	0.39
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:71:LYS:HG3	5	0.39
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:71:LYS:HG3	5	0.39
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:119:LEU:HB2	5	0.39
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:119:LEU:HB2	5	0.39
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:119:LEU:HB2	5	0.39
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:119:LEU:HB2	5	0.39
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:119:LEU:HB2	5	0.39
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:119:LEU:HB2	5	0.39
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:124:ALA:HB2	5	0.39
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:124:ALA:HB1	5	0.39
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:124:ALA:HB3	5	0.39
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:124:ALA:HB2	5	0.39
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:124:ALA:HB1	5	0.39
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:124:ALA:HB3	5	0.39
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:124:ALA:HB2	5	0.39
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:124:ALA:HB1	5	0.39
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:124:ALA:HB3	5	0.39
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:124:ALA:HB2	5	0.39
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:124:ALA:HB1	5	0.39
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:124:ALA:HB3	5	0.39
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:124:ALA:HB2	5	0.39
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:124:ALA:HB1	5	0.39
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:124:ALA:HB3	5	0.39
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:124:ALA:HB2	5	0.39
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:124:ALA:HB1	5	0.39
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:124:ALA:HB3	5	0.39
(2,1388)	1:A:109:THR:HG21	1:A:108:LYS:HE3	8	0.39
(2,1388)	1:A:109:THR:HG22	1:A:108:LYS:HE3	8	0.39
(2,1388)	1:A:109:THR:HG23	1:A:108:LYS:HE3	8	0.39
(2,1388)	1:A:84:THR:HG21	1:A:85:ARG:HD2	8	0.39
(2,1388)	1:A:84:THR:HG22	1:A:85:ARG:HD2	8	0.39
(2,1388)	1:A:84:THR:HG23	1:A:85:ARG:HD2	8	0.39
(2,1357)	1:A:96:LEU:HD22	1:A:61:ARG:HD2	7	0.39
(2,1357)	1:A:96:LEU:HD22	1:A:61:ARG:HD3	7	0.39
(2,1357)	1:A:96:LEU:HD21	1:A:61:ARG:HD2	7	0.39
(2,1357)	1:A:96:LEU:HD21	1:A:61:ARG:HD3	7	0.39
(2,1357)	1:A:96:LEU:HD23	1:A:61:ARG:HD2	7	0.39
(2,1357)	1:A:96:LEU:HD23	1:A:61:ARG:HD3	7	0.39
(2,1357)	1:A:119:LEU:HD22	1:A:85:ARG:HD3	7	0.39
(2,1357)	1:A:119:LEU:HD21	1:A:85:ARG:HD3	7	0.39

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1357)	1:A:119:LEU:HD23	1:A:85:ARG:HD3	7	0.39
(2,1357)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:61:ARG:HD2	7	0.39
(2,1357)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:61:ARG:HD3	7	0.39
(2,1357)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:61:ARG:HD2	7	0.39
(2,1357)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:61:ARG:HD3	7	0.39
(2,1357)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:61:ARG:HD2	7	0.39
(2,1357)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:61:ARG:HD3	7	0.39
(2,1208)	1:A:66:GLU:HB3	1:A:100:GLY:HA2	1	0.39
(2,1208)	1:A:66:GLU:HB3	1:A:74:SER:HA	1	0.39
(2,1043)	1:A:89:LEU:H	1:A:89:LEU:HB3	8	0.39
(1,13)	1:A:120:HIS:HB2	1:A:122:ILE:HG13	10	0.39
(2,649)	1:A:70:SER:HB2	1:A:126:GLY:HA3	1	0.38
(2,64)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:135:VAL:HG22	1	0.38
(2,64)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:135:VAL:HG21	1	0.38
(2,64)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:135:VAL:HG23	1	0.38
(2,64)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:135:VAL:HG12	1	0.38
(2,64)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:135:VAL:HG11	1	0.38
(2,64)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:135:VAL:HG13	1	0.38
(2,570)	1:A:121:ASP:HA	1:A:120:HIS:HB2	2	0.38
(2,570)	1:A:121:ASP:HA	1:A:120:HIS:HB2	4	0.38
(2,1867)	1:A:88:GLU:H	1:A:86:ILE:HB	10	0.38
(2,1867)	1:A:88:GLU:H	1:A:89:LEU:HB3	10	0.38
(2,1661)	1:A:134:GLU:HB3	1:A:131:LEU:HA	3	0.38
(2,1661)	1:A:131:LEU:HA	1:A:103:MET:HB3	3	0.38
(2,1661)	1:A:134:GLU:HB3	1:A:132:ASP:HA	3	0.38
(2,1661)	1:A:132:ASP:HA	1:A:103:MET:HB3	3	0.38
(2,1624)	1:A:76:MET:HG3	1:A:118:LEU:HA	2	0.38
(2,1624)	1:A:118:LEU:HA	1:A:114:ASP:HB2	2	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:61:ARG:HG3	9	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:61:ARG:HG3	9	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:61:ARG:HG3	9	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:61:ARG:HG3	9	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:61:ARG:HG3	9	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:61:ARG:HG3	9	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:62:LEU:HG	9	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:62:LEU:HG	9	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:62:LEU:HG	9	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:62:LEU:HG	9	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:62:LEU:HG	9	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:62:LEU:HG	9	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:71:LYS:HG3	9	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:71:LYS:HG3	9	0.38

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:71:LYS:HG3	9	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:71:LYS:HG3	9	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:71:LYS:HG3	9	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:71:LYS:HG3	9	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:119:LEU:HB2	9	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:119:LEU:HB2	9	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:119:LEU:HB2	9	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:119:LEU:HB2	9	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:119:LEU:HB2	9	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:119:LEU:HB2	9	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:124:ALA:HB2	9	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:124:ALA:HB1	9	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:124:ALA:HB3	9	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:124:ALA:HB2	9	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:124:ALA:HB1	9	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:124:ALA:HB3	9	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:124:ALA:HB2	9	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:124:ALA:HB1	9	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:124:ALA:HB3	9	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:124:ALA:HB2	9	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:124:ALA:HB1	9	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:124:ALA:HB3	9	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:124:ALA:HB2	9	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:124:ALA:HB1	9	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:124:ALA:HB3	9	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:124:ALA:HB2	9	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:124:ALA:HB1	9	0.38
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:124:ALA:HB3	9	0.38
(2,1369)	1:A:110:VAL:HG22	1:A:86:ILE:HA	5	0.38
(2,1369)	1:A:110:VAL:HG21	1:A:86:ILE:HA	5	0.38
(2,1369)	1:A:110:VAL:HG23	1:A:86:ILE:HA	5	0.38
(2,1369)	1:A:110:VAL:HG22	1:A:107:PRO:HD3	5	0.38
(2,1369)	1:A:110:VAL:HG21	1:A:107:PRO:HD3	5	0.38
(2,1369)	1:A:110:VAL:HG23	1:A:107:PRO:HD3	5	0.38
(2,131)	1:A:136:LYS:HD3	1:A:58:GLU:HG3	10	0.38
(2,1304)	1:A:106:LEU:HD12	1:A:109:THR:H	4	0.38
(2,1304)	1:A:106:LEU:HD11	1:A:109:THR:H	4	0.38
(2,1304)	1:A:106:LEU:HD13	1:A:109:THR:H	4	0.38
(2,1304)	1:A:106:LEU:HD12	1:A:110:VAL:H	4	0.38
(2,1304)	1:A:106:LEU:HD11	1:A:110:VAL:H	4	0.38
(2,1304)	1:A:106:LEU:HD13	1:A:110:VAL:H	4	0.38
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD12	1:A:82:PHE:HE1	4	0.38

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD12	1:A:82:PHE:HE2	4	0.38
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD11	1:A:82:PHE:HE1	4	0.38
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD11	1:A:82:PHE:HE2	4	0.38
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD13	1:A:82:PHE:HE1	4	0.38
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD13	1:A:82:PHE:HE2	4	0.38
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD12	1:A:82:PHE:HZ	4	0.38
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD11	1:A:82:PHE:HZ	4	0.38
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD13	1:A:82:PHE:HZ	4	0.38
(2,1257)	1:A:136:LYS:HD2	1:A:59:MET:HG2	8	0.38
(2,1257)	1:A:136:LYS:HD3	1:A:58:GLU:HG3	8	0.38
(2,1257)	1:A:136:LYS:HD3	1:A:59:MET:HG2	8	0.38
(2,1257)	1:A:75:LYS:HD3	1:A:78:LYS:HE2	8	0.38
(2,1154)	1:A:72:ASN:HB2	1:A:73:PHE:HD1	2	0.38
(2,1154)	1:A:72:ASN:HB2	1:A:73:PHE:HD2	2	0.38
(2,1154)	1:A:95:PHE:HB2	1:A:73:PHE:HE1	2	0.38
(2,1154)	1:A:95:PHE:HB2	1:A:73:PHE:HE2	2	0.38
(2,1154)	1:A:95:PHE:HB2	1:A:78:LYS:H	2	0.38
(2,1043)	1:A:89:LEU:H	1:A:89:LEU:HB3	4	0.38
(1,60)	1:A:119:LEU:H	1:A:114:ASP:HB2	10	0.38
(2,570)	1:A:121:ASP:HA	1:A:120:HIS:HB2	9	0.37
(2,36)	1:A:66:GLU:HG3	1:A:66:GLU:HB2	1	0.37
(2,36)	1:A:66:GLU:HG3	1:A:66:GLU:HB2	4	0.37
(2,36)	1:A:66:GLU:HG3	1:A:66:GLU:HB2	6	0.37
(2,258)	1:A:89:LEU:HD22	1:A:114:ASP:HB2	1	0.37
(2,258)	1:A:89:LEU:HD21	1:A:114:ASP:HB2	1	0.37
(2,258)	1:A:89:LEU:HD23	1:A:114:ASP:HB2	1	0.37
(2,258)	1:A:89:LEU:HD22	1:A:114:ASP:HB2	8	0.37
(2,258)	1:A:89:LEU:HD21	1:A:114:ASP:HB2	8	0.37
(2,258)	1:A:89:LEU:HD23	1:A:114:ASP:HB2	8	0.37
(2,1846)	1:A:106:LEU:H	1:A:105:GLU:HB2	4	0.37
(2,1846)	1:A:106:LEU:H	1:A:105:GLU:HG3	4	0.37
(2,1544)	1:A:74:SER:HB3	1:A:71:LYS:HG2	5	0.37
(2,1544)	1:A:74:SER:HB3	1:A:75:LYS:HG2	5	0.37
(2,1544)	1:A:74:SER:HB3	1:A:78:LYS:HG3	5	0.37
(2,1544)	1:A:74:SER:HB3	1:A:97:THR:HG21	5	0.37
(2,1544)	1:A:74:SER:HB3	1:A:97:THR:HG22	5	0.37
(2,1544)	1:A:74:SER:HB3	1:A:97:THR:HG23	5	0.37
(2,1524)	1:A:108:LYS:HD3	1:A:135:VAL:HA	9	0.37
(2,1524)	1:A:110:VAL:HA	1:A:89:LEU:HB2	9	0.37
(2,1524)	1:A:136:LYS:HD2	1:A:135:VAL:HA	9	0.37
(2,1523)	1:A:135:VAL:HA	1:A:58:GLU:HG2	10	0.37
(2,1523)	1:A:135:VAL:HA	1:A:107:PRO:HG3	10	0.37

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1523)	1:A:110:VAL:HA	1:A:107:PRO:HG3	10	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:61:ARG:HG3	2	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:61:ARG:HG3	2	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:61:ARG:HG3	2	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:61:ARG:HG3	2	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:61:ARG:HG3	2	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:61:ARG:HG3	2	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:62:LEU:HG	2	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:62:LEU:HG	2	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:62:LEU:HG	2	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:62:LEU:HG	2	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:62:LEU:HG	2	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:62:LEU:HG	2	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:71:LYS:HG3	2	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:71:LYS:HG3	2	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:71:LYS:HG3	2	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:71:LYS:HG3	2	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:71:LYS:HG3	2	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:71:LYS:HG3	2	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:119:LEU:HB2	2	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:119:LEU:HB2	2	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:119:LEU:HB2	2	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:119:LEU:HB2	2	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:119:LEU:HB2	2	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:119:LEU:HB2	2	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:124:ALA:HB2	2	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:124:ALA:HB1	2	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:124:ALA:HB3	2	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:124:ALA:HB2	2	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:124:ALA:HB1	2	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:124:ALA:HB3	2	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:124:ALA:HB2	2	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:124:ALA:HB1	2	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:124:ALA:HB3	2	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:124:ALA:HB2	2	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:124:ALA:HB1	2	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:124:ALA:HB3	2	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:124:ALA:HB2	2	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:124:ALA:HB1	2	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:124:ALA:HB3	2	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:124:ALA:HB2	2	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:124:ALA:HB1	2	0.37

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:124:ALA:HB3	2	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:61:ARG:HG3	3	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:61:ARG:HG3	3	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:61:ARG:HG3	3	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:61:ARG:HG3	3	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:61:ARG:HG3	3	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:61:ARG:HG3	3	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:62:LEU:HG	3	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:62:LEU:HG	3	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:62:LEU:HG	3	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:62:LEU:HG	3	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:62:LEU:HG	3	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:62:LEU:HG	3	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:71:LYS:HG3	3	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:71:LYS:HG3	3	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:71:LYS:HG3	3	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:71:LYS:HG3	3	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:71:LYS:HG3	3	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:71:LYS:HG3	3	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:119:LEU:HB2	3	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:119:LEU:HB2	3	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:119:LEU:HB2	3	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:119:LEU:HB2	3	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:119:LEU:HB2	3	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:119:LEU:HB2	3	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:124:ALA:HB2	3	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:124:ALA:HB1	3	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:124:ALA:HB3	3	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:124:ALA:HB2	3	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:124:ALA:HB1	3	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:124:ALA:HB3	3	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:124:ALA:HB2	3	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:124:ALA:HB1	3	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:124:ALA:HB3	3	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:124:ALA:HB2	3	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:124:ALA:HB1	3	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:124:ALA:HB3	3	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:124:ALA:HB2	3	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:124:ALA:HB1	3	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:124:ALA:HB3	3	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:124:ALA:HB2	3	0.37
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:124:ALA:HB1	3	0.37

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:124:ALA:HB3	3	0.37
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:130:GLY:HA2	10	0.37
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:130:GLY:HA2	10	0.37
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:130:GLY:HA2	10	0.37
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:130:GLY:HA2	10	0.37
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:130:GLY:HA2	10	0.37
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:130:GLY:HA2	10	0.37
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:126:GLY:HA2	10	0.37
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:126:GLY:HA2	10	0.37
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:126:GLY:HA2	10	0.37
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:126:GLY:HA2	10	0.37
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:126:GLY:HA2	10	0.37
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:126:GLY:HA2	10	0.37
(2,1386)	1:A:109:THR:HG21	1:A:58:GLU:HG2	9	0.37
(2,1386)	1:A:109:THR:HG22	1:A:58:GLU:HG2	9	0.37
(2,1386)	1:A:109:THR:HG23	1:A:58:GLU:HG2	9	0.37
(2,1386)	1:A:84:THR:HG21	1:A:87:GLU:HB3	9	0.37
(2,1386)	1:A:84:THR:HG22	1:A:87:GLU:HB3	9	0.37
(2,1386)	1:A:84:THR:HG23	1:A:87:GLU:HB3	9	0.37
(2,1386)	1:A:84:THR:HG21	1:A:88:GLU:HB3	9	0.37
(2,1386)	1:A:84:THR:HG22	1:A:88:GLU:HB3	9	0.37
(2,1386)	1:A:84:THR:HG23	1:A:88:GLU:HB3	9	0.37
(2,1174)	1:A:66:GLU:HG3	1:A:71:LYS:HB2	10	0.37
(2,1174)	1:A:66:GLU:HG3	1:A:71:LYS:HD3	10	0.37
(2,1042)	1:A:89:LEU:H	1:A:88:GLU:HB3	8	0.37
(1,13)	1:A:120:HIS:HB2	1:A:122:ILE:HG13	2	0.37
(1,11)	1:A:66:GLU:HB3	1:A:101:VAL:HA	3	0.37
(2,604)	1:A:131:LEU:HD22	1:A:131:LEU:HA	9	0.36
(2,604)	1:A:131:LEU:HD21	1:A:131:LEU:HA	9	0.36
(2,604)	1:A:131:LEU:HD23	1:A:131:LEU:HA	9	0.36
(2,594)	1:A:61:ARG:HG2	1:A:61:ARG:HA	7	0.36
(2,570)	1:A:121:ASP:HA	1:A:120:HIS:HB2	7	0.36
(2,36)	1:A:66:GLU:HG3	1:A:66:GLU:HB2	2	0.36
(2,36)	1:A:66:GLU:HG3	1:A:66:GLU:HB2	3	0.36
(2,36)	1:A:66:GLU:HG3	1:A:66:GLU:HB2	5	0.36
(2,36)	1:A:66:GLU:HG3	1:A:66:GLU:HB2	8	0.36
(2,258)	1:A:89:LEU:HD22	1:A:114:ASP:HB2	6	0.36
(2,258)	1:A:89:LEU:HD21	1:A:114:ASP:HB2	6	0.36
(2,258)	1:A:89:LEU:HD23	1:A:114:ASP:HB2	6	0.36
(2,258)	1:A:89:LEU:HD22	1:A:114:ASP:HB2	7	0.36
(2,258)	1:A:89:LEU:HD21	1:A:114:ASP:HB2	7	0.36
(2,258)	1:A:89:LEU:HD23	1:A:114:ASP:HB2	7	0.36

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1846)	1:A:106:LEU:H	1:A:105:GLU:HB2	1	0.36
(2,1846)	1:A:106:LEU:H	1:A:105:GLU:HG3	1	0.36
(2,1846)	1:A:106:LEU:H	1:A:105:GLU:HB2	7	0.36
(2,1846)	1:A:106:LEU:H	1:A:105:GLU:HG3	7	0.36
(2,1506)	1:A:128:VAL:HB	1:A:70:SER:HB2	5	0.36
(2,1506)	1:A:66:GLU:HB2	1:A:70:SER:HB2	5	0.36
(2,1506)	1:A:128:VAL:HB	1:A:70:SER:HB3	5	0.36
(2,1506)	1:A:66:GLU:HB2	1:A:70:SER:HB3	5	0.36
(2,1506)	1:A:70:SER:HB3	1:A:71:LYS:HB3	5	0.36
(2,1500)	1:A:133:SER:HB3	1:A:105:GLU:HG3	7	0.36
(2,1500)	1:A:128:VAL:HB	1:A:70:SER:HB2	7	0.36
(2,1500)	1:A:66:GLU:HB2	1:A:70:SER:HB2	7	0.36
(2,1500)	1:A:128:VAL:HB	1:A:70:SER:HB3	7	0.36
(2,1500)	1:A:66:GLU:HB2	1:A:70:SER:HB3	7	0.36
(2,1500)	1:A:70:SER:HB3	1:A:71:LYS:HB3	7	0.36
(2,133)	1:A:67:LYS:HD3	1:A:69:GLU:HB3	7	0.36
(2,1252)	1:A:136:LYS:HD3	1:A:59:MET:HG2	5	0.36
(2,1252)	1:A:66:GLU:HG3	1:A:71:LYS:HD3	5	0.36
(2,1224)	1:A:103:MET:HG2	1:A:102:THR:HB	2	0.36
(2,1224)	1:A:115:MET:HB3	1:A:109:THR:HA	2	0.36
(2,1224)	1:A:115:MET:HB3	1:A:111:SER:HB2	2	0.36
(2,1190)	1:A:59:MET:HG2	1:A:133:SER:HB2	8	0.36
(2,1190)	1:A:63:MET:HB2	1:A:130:GLY:HA2	8	0.36
(2,1190)	1:A:107:PRO:HB3	1:A:90:GLY:HA2	8	0.36
(2,1043)	1:A:89:LEU:H	1:A:89:LEU:HB3	6	0.36
(2,1032)	1:A:84:THR:H	1:A:84:THR:HG21	2	0.36
(2,1032)	1:A:84:THR:H	1:A:84:THR:HG22	2	0.36
(2,1032)	1:A:84:THR:H	1:A:84:THR:HG23	2	0.36
(2,1012)	1:A:119:LEU:H	1:A:119:LEU:HB3	2	0.36
(2,1012)	1:A:119:LEU:H	1:A:119:LEU:HB3	10	0.36
(2,744)	1:A:105:GLU:H	1:A:105:GLU:HG2	6	0.35
(2,744)	1:A:105:GLU:H	1:A:105:GLU:HG2	8	0.35
(2,654)	1:A:72:ASN:HB2	1:A:126:GLY:HA3	3	0.35
(2,530)	1:A:88:GLU:HA	1:A:88:GLU:HB2	1	0.35
(2,530)	1:A:88:GLU:HA	1:A:88:GLU:HB2	3	0.35
(2,530)	1:A:88:GLU:HA	1:A:88:GLU:HB2	4	0.35
(2,530)	1:A:88:GLU:HA	1:A:88:GLU:HB2	5	0.35
(2,530)	1:A:88:GLU:HA	1:A:88:GLU:HB2	6	0.35
(2,423)	1:A:111:SER:HB2	1:A:114:ASP:HB3	2	0.35
(2,36)	1:A:66:GLU:HG3	1:A:66:GLU:HB2	9	0.35
(2,240)	1:A:110:VAL:HG12	1:A:89:LEU:HB2	7	0.35
(2,240)	1:A:110:VAL:HG11	1:A:89:LEU:HB2	7	0.35

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,240)	1:A:110:VAL:HG13	1:A:89:LEU:HB2	7	0.35
(2,1846)	1:A:106:LEU:H	1:A:105:GLU:HB2	6	0.35
(2,1846)	1:A:106:LEU:H	1:A:105:GLU:HG3	6	0.35
(2,1846)	1:A:106:LEU:H	1:A:105:GLU:HB2	9	0.35
(2,1846)	1:A:106:LEU:H	1:A:105:GLU:HG3	9	0.35
(2,1523)	1:A:135:VAL:HA	1:A:58:GLU:HG2	2	0.35
(2,1523)	1:A:135:VAL:HA	1:A:107:PRO:HG3	2	0.35
(2,1523)	1:A:110:VAL:HA	1:A:107:PRO:HG3	2	0.35
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:61:ARG:HG3	10	0.35
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:61:ARG:HG3	10	0.35
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:61:ARG:HG3	10	0.35
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:61:ARG:HG3	10	0.35
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:61:ARG:HG3	10	0.35
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:61:ARG:HG3	10	0.35
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:62:LEU:HG	10	0.35
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:62:LEU:HG	10	0.35
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:62:LEU:HG	10	0.35
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:62:LEU:HG	10	0.35
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:62:LEU:HG	10	0.35
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:62:LEU:HG	10	0.35
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:71:LYS:HG3	10	0.35
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:71:LYS:HG3	10	0.35
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:71:LYS:HG3	10	0.35
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:71:LYS:HG3	10	0.35
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:71:LYS:HG3	10	0.35
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:71:LYS:HG3	10	0.35
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:119:LEU:HB2	10	0.35
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:119:LEU:HB2	10	0.35
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:119:LEU:HB2	10	0.35
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:119:LEU:HB2	10	0.35
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:119:LEU:HB2	10	0.35
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:119:LEU:HB2	10	0.35
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:124:ALA:HB2	10	0.35
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:124:ALA:HB1	10	0.35
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:124:ALA:HB3	10	0.35
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:124:ALA:HB2	10	0.35
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:124:ALA:HB1	10	0.35
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:124:ALA:HB3	10	0.35
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:124:ALA:HB2	10	0.35
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:124:ALA:HB1	10	0.35
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:124:ALA:HB3	10	0.35
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:124:ALA:HB2	10	0.35

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:124:ALA:HB1	10	0.35
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:124:ALA:HB3	10	0.35
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:124:ALA:HB2	10	0.35
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:124:ALA:HB1	10	0.35
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:124:ALA:HB3	10	0.35
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:124:ALA:HB2	10	0.35
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:124:ALA:HB1	10	0.35
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:124:ALA:HB3	10	0.35
(2,1257)	1:A:136:LYS:HD2	1:A:59:MET:HG2	3	0.35
(2,1257)	1:A:136:LYS:HD3	1:A:58:GLU:HG3	3	0.35
(2,1257)	1:A:136:LYS:HD3	1:A:59:MET:HG2	3	0.35
(2,1257)	1:A:75:LYS:HD3	1:A:78:LYS:HE2	3	0.35
(2,1154)	1:A:72:ASN:HB2	1:A:73:PHE:HD1	3	0.35
(2,1154)	1:A:72:ASN:HB2	1:A:73:PHE:HD2	3	0.35
(2,1154)	1:A:95:PHE:HB2	1:A:73:PHE:HE1	3	0.35
(2,1154)	1:A:95:PHE:HB2	1:A:73:PHE:HE2	3	0.35
(2,1154)	1:A:95:PHE:HB2	1:A:78:LYS:H	3	0.35
(2,1149)	1:A:58:GLU:H	1:A:58:GLU:HG2	9	0.35
(2,1149)	1:A:58:GLU:H	1:A:58:GLU:HG2	9	0.35
(2,1149)	1:A:58:GLU:H	1:A:58:GLU:HG2	9	0.35
(2,1043)	1:A:89:LEU:H	1:A:89:LEU:HB3	7	0.35
(2,1012)	1:A:119:LEU:H	1:A:119:LEU:HB3	1	0.35
(1,36)	1:A:85:ARG:HA	1:A:88:GLU:HB3	5	0.35
(1,13)	1:A:120:HIS:HB2	1:A:122:ILE:HG13	3	0.35
(2,744)	1:A:105:GLU:H	1:A:105:GLU:HG2	2	0.34
(2,744)	1:A:105:GLU:H	1:A:105:GLU:HG2	9	0.34
(2,646)	1:A:106:LEU:HG	1:A:107:PRO:HD3	9	0.34
(2,64)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:135:VAL:HG22	6	0.34
(2,64)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:135:VAL:HG21	6	0.34
(2,64)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:135:VAL:HG23	6	0.34
(2,64)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:135:VAL:HG12	6	0.34
(2,64)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:135:VAL:HG11	6	0.34
(2,64)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:135:VAL:HG13	6	0.34
(2,64)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:135:VAL:HG22	7	0.34
(2,64)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:135:VAL:HG21	7	0.34
(2,64)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:135:VAL:HG23	7	0.34
(2,64)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:135:VAL:HG12	7	0.34
(2,64)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:135:VAL:HG11	7	0.34
(2,64)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:135:VAL:HG13	7	0.34
(2,64)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:135:VAL:HG22	10	0.34
(2,64)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:135:VAL:HG21	10	0.34
(2,64)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:135:VAL:HG23	10	0.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,64)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:135:VAL:HG12	10	0.34
(2,64)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:135:VAL:HG11	10	0.34
(2,64)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:135:VAL:HG13	10	0.34
(2,62)	1:A:107:PRO:HB3	1:A:109:THR:HG21	4	0.34
(2,62)	1:A:107:PRO:HB3	1:A:109:THR:HG22	4	0.34
(2,62)	1:A:107:PRO:HB3	1:A:109:THR:HG23	4	0.34
(2,570)	1:A:121:ASP:HA	1:A:120:HIS:HB2	6	0.34
(2,530)	1:A:88:GLU:HA	1:A:88:GLU:HB2	2	0.34
(2,530)	1:A:88:GLU:HA	1:A:88:GLU:HB2	8	0.34
(2,530)	1:A:88:GLU:HA	1:A:88:GLU:HB2	9	0.34
(2,530)	1:A:88:GLU:HA	1:A:88:GLU:HB2	10	0.34
(2,265)	1:A:110:VAL:HG22	1:A:114:ASP:HB2	2	0.34
(2,265)	1:A:110:VAL:HG21	1:A:114:ASP:HB2	2	0.34
(2,265)	1:A:110:VAL:HG23	1:A:114:ASP:HB2	2	0.34
(2,265)	1:A:110:VAL:HG22	1:A:114:ASP:HB2	10	0.34
(2,265)	1:A:110:VAL:HG21	1:A:114:ASP:HB2	10	0.34
(2,265)	1:A:110:VAL:HG23	1:A:114:ASP:HB2	10	0.34
(2,1645)	1:A:71:LYS:HA	1:A:69:GLU:HB2	4	0.34
(2,1645)	1:A:71:LYS:HA	1:A:69:GLU:HB3	4	0.34
(2,1506)	1:A:128:VAL:HB	1:A:70:SER:HB2	3	0.34
(2,1506)	1:A:66:GLU:HB2	1:A:70:SER:HB2	3	0.34
(2,1506)	1:A:128:VAL:HB	1:A:70:SER:HB3	3	0.34
(2,1506)	1:A:66:GLU:HB2	1:A:70:SER:HB3	3	0.34
(2,1506)	1:A:70:SER:HB3	1:A:71:LYS:HB3	3	0.34
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:61:ARG:HG3	7	0.34
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:61:ARG:HG3	7	0.34
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:61:ARG:HG3	7	0.34
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:61:ARG:HG3	7	0.34
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:61:ARG:HG3	7	0.34
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:61:ARG:HG3	7	0.34
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:62:LEU:HG	7	0.34
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:62:LEU:HG	7	0.34
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:62:LEU:HG	7	0.34
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:62:LEU:HG	7	0.34
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:62:LEU:HG	7	0.34
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:62:LEU:HG	7	0.34
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:71:LYS:HG3	7	0.34
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:71:LYS:HG3	7	0.34
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:71:LYS:HG3	7	0.34
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:71:LYS:HG3	7	0.34
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:71:LYS:HG3	7	0.34
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:71:LYS:HG3	7	0.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:119:LEU:HB2	7	0.34
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:119:LEU:HB2	7	0.34
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:119:LEU:HB2	7	0.34
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:119:LEU:HB2	7	0.34
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:119:LEU:HB2	7	0.34
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:119:LEU:HB2	7	0.34
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:124:ALA:HB2	7	0.34
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:124:ALA:HB1	7	0.34
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:124:ALA:HB3	7	0.34
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:124:ALA:HB2	7	0.34
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:124:ALA:HB1	7	0.34
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:124:ALA:HB3	7	0.34
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:124:ALA:HB2	7	0.34
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:124:ALA:HB1	7	0.34
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:124:ALA:HB3	7	0.34
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:124:ALA:HB2	7	0.34
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:124:ALA:HB1	7	0.34
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:124:ALA:HB3	7	0.34
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:124:ALA:HB2	7	0.34
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:124:ALA:HB1	7	0.34
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:124:ALA:HB3	7	0.34
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:124:ALA:HB2	7	0.34
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:124:ALA:HB1	7	0.34
(2,1415)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:124:ALA:HB3	7	0.34
(2,1341)	1:A:136:LYS:HG2	1:A:58:GLU:HG2	2	0.34
(2,1341)	1:A:136:LYS:HG3	1:A:58:GLU:HG2	2	0.34
(2,1324)	1:A:107:PRO:HB3	1:A:108:LYS:HG3	1	0.34
(2,1324)	1:A:115:MET:HG3	1:A:108:LYS:HG3	1	0.34
(2,1304)	1:A:106:LEU:HD12	1:A:109:THR:H	9	0.34
(2,1304)	1:A:106:LEU:HD11	1:A:109:THR:H	9	0.34
(2,1304)	1:A:106:LEU:HD13	1:A:109:THR:H	9	0.34
(2,1304)	1:A:106:LEU:HD12	1:A:110:VAL:H	9	0.34
(2,1304)	1:A:106:LEU:HD11	1:A:110:VAL:H	9	0.34
(2,1304)	1:A:106:LEU:HD13	1:A:110:VAL:H	9	0.34
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD12	1:A:82:PHE:HE1	9	0.34
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD12	1:A:82:PHE:HE2	9	0.34
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD11	1:A:82:PHE:HE1	9	0.34
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD11	1:A:82:PHE:HE2	9	0.34
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD13	1:A:82:PHE:HE1	9	0.34
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD13	1:A:82:PHE:HE2	9	0.34
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD12	1:A:82:PHE:HZ	9	0.34
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD11	1:A:82:PHE:HZ	9	0.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD13	1:A:82:PHE:HZ	9	0.34
(2,1032)	1:A:84:THR:H	1:A:84:THR:HG21	3	0.34
(2,1032)	1:A:84:THR:H	1:A:84:THR:HG22	3	0.34
(2,1032)	1:A:84:THR:H	1:A:84:THR:HG23	3	0.34
(2,1012)	1:A:119:LEU:H	1:A:119:LEU:HB3	8	0.34
(1,60)	1:A:119:LEU:H	1:A:114:ASP:HB2	2	0.34
(1,13)	1:A:120:HIS:HB2	1:A:122:ILE:HG13	4	0.34
(2,646)	1:A:106:LEU:HG	1:A:107:PRO:HD3	8	0.33
(2,258)	1:A:89:LEU:HD22	1:A:114:ASP:HB2	5	0.33
(2,258)	1:A:89:LEU:HD21	1:A:114:ASP:HB2	5	0.33
(2,258)	1:A:89:LEU:HD23	1:A:114:ASP:HB2	5	0.33
(2,240)	1:A:110:VAL:HG12	1:A:89:LEU:HB2	4	0.33
(2,240)	1:A:110:VAL:HG11	1:A:89:LEU:HB2	4	0.33
(2,240)	1:A:110:VAL:HG13	1:A:89:LEU:HB2	4	0.33
(2,1933)	1:A:92:SER:H	1:A:93:ILE:HD12	9	0.33
(2,1933)	1:A:92:SER:H	1:A:93:ILE:HD11	9	0.33
(2,1933)	1:A:92:SER:H	1:A:93:ILE:HD13	9	0.33
(2,1933)	1:A:92:SER:H	1:A:104:ILE:HD12	9	0.33
(2,1933)	1:A:92:SER:H	1:A:104:ILE:HD11	9	0.33
(2,1933)	1:A:92:SER:H	1:A:104:ILE:HD13	9	0.33
(2,1933)	1:A:92:SER:H	1:A:104:ILE:HG12	9	0.33
(2,1861)	1:A:77:ALA:H	1:A:127:GLY:HA2	8	0.33
(2,1861)	1:A:121:ASP:H	1:A:116:ASP:HB2	8	0.33
(2,1861)	1:A:121:ASP:H	1:A:127:GLY:HA2	8	0.33
(2,1861)	1:A:77:ALA:H	1:A:78:LYS:HE3	8	0.33
(2,1726)	1:A:127:GLY:HA2	1:A:66:GLU:HB2	10	0.33
(2,1726)	1:A:127:GLY:HA2	1:A:76:MET:HB2	10	0.33
(2,1726)	1:A:127:GLY:HA2	1:A:128:VAL:HB	10	0.33
(2,1504)	1:A:133:SER:HB3	1:A:62:LEU:HD22	10	0.33
(2,1504)	1:A:133:SER:HB3	1:A:62:LEU:HD21	10	0.33
(2,1504)	1:A:133:SER:HB3	1:A:62:LEU:HD23	10	0.33
(2,1504)	1:A:70:SER:HB2	1:A:64:VAL:HG22	10	0.33
(2,1504)	1:A:70:SER:HB2	1:A:64:VAL:HG21	10	0.33
(2,1504)	1:A:70:SER:HB2	1:A:64:VAL:HG23	10	0.33
(2,1504)	1:A:70:SER:HB3	1:A:64:VAL:HG22	10	0.33
(2,1504)	1:A:70:SER:HB3	1:A:64:VAL:HG21	10	0.33
(2,1504)	1:A:70:SER:HB3	1:A:64:VAL:HG23	10	0.33
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD12	1:A:87:GLU:HB3	6	0.33
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD11	1:A:87:GLU:HB3	6	0.33
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD13	1:A:87:GLU:HB3	6	0.33
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD12	1:A:88:GLU:HB3	6	0.33
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD11	1:A:88:GLU:HB3	6	0.33

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD13	1:A:88:GLU:HB3	6	0.33
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD12	1:A:115:MET:HB3	6	0.33
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD11	1:A:115:MET:HB3	6	0.33
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD13	1:A:115:MET:HB3	6	0.33
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD12	1:A:122:ILE:HG13	6	0.33
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD11	1:A:122:ILE:HG13	6	0.33
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD13	1:A:122:ILE:HG13	6	0.33
(2,1304)	1:A:106:LEU:HD12	1:A:109:THR:H	5	0.33
(2,1304)	1:A:106:LEU:HD11	1:A:109:THR:H	5	0.33
(2,1304)	1:A:106:LEU:HD13	1:A:109:THR:H	5	0.33
(2,1304)	1:A:106:LEU:HD12	1:A:110:VAL:H	5	0.33
(2,1304)	1:A:106:LEU:HD11	1:A:110:VAL:H	5	0.33
(2,1304)	1:A:106:LEU:HD13	1:A:110:VAL:H	5	0.33
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD12	1:A:82:PHE:HE1	5	0.33
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD12	1:A:82:PHE:HE2	5	0.33
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD11	1:A:82:PHE:HE1	5	0.33
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD11	1:A:82:PHE:HE2	5	0.33
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD13	1:A:82:PHE:HE1	5	0.33
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD13	1:A:82:PHE:HE2	5	0.33
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD12	1:A:82:PHE:HZ	5	0.33
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD11	1:A:82:PHE:HZ	5	0.33
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD13	1:A:82:PHE:HZ	5	0.33
(2,1304)	1:A:106:LEU:HD12	1:A:109:THR:H	8	0.33
(2,1304)	1:A:106:LEU:HD11	1:A:109:THR:H	8	0.33
(2,1304)	1:A:106:LEU:HD13	1:A:109:THR:H	8	0.33
(2,1304)	1:A:106:LEU:HD12	1:A:110:VAL:H	8	0.33
(2,1304)	1:A:106:LEU:HD11	1:A:110:VAL:H	8	0.33
(2,1304)	1:A:106:LEU:HD13	1:A:110:VAL:H	8	0.33
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD12	1:A:82:PHE:HE1	8	0.33
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD12	1:A:82:PHE:HE2	8	0.33
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD11	1:A:82:PHE:HE1	8	0.33
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD11	1:A:82:PHE:HE2	8	0.33
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD13	1:A:82:PHE:HE1	8	0.33
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD13	1:A:82:PHE:HE2	8	0.33
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD12	1:A:82:PHE:HZ	8	0.33
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD11	1:A:82:PHE:HZ	8	0.33
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD13	1:A:82:PHE:HZ	8	0.33
(2,1154)	1:A:72:ASN:HB2	1:A:73:PHE:HD1	6	0.33
(2,1154)	1:A:72:ASN:HB2	1:A:73:PHE:HD2	6	0.33
(2,1154)	1:A:95:PHE:HB2	1:A:73:PHE:HE1	6	0.33
(2,1154)	1:A:95:PHE:HB2	1:A:73:PHE:HE2	6	0.33
(2,1154)	1:A:95:PHE:HB2	1:A:78:LYS:H	6	0.33

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1012)	1:A:119:LEU:H	1:A:119:LEU:HB3	3	0.33
(2,1012)	1:A:119:LEU:H	1:A:119:LEU:HB3	4	0.33
(2,1012)	1:A:119:LEU:H	1:A:119:LEU:HB3	5	0.33
(2,1012)	1:A:119:LEU:H	1:A:119:LEU:HB3	6	0.33
(2,1012)	1:A:119:LEU:H	1:A:119:LEU:HB3	9	0.33
(1,13)	1:A:120:HIS:HB2	1:A:122:ILE:HG13	1	0.33
(2,744)	1:A:105:GLU:H	1:A:105:GLU:HG2	3	0.32
(2,744)	1:A:105:GLU:H	1:A:105:GLU:HG2	4	0.32
(2,744)	1:A:105:GLU:H	1:A:105:GLU:HG2	10	0.32
(2,258)	1:A:89:LEU:HD22	1:A:114:ASP:HB2	3	0.32
(2,258)	1:A:89:LEU:HD21	1:A:114:ASP:HB2	3	0.32
(2,258)	1:A:89:LEU:HD23	1:A:114:ASP:HB2	3	0.32
(2,219)	1:A:75:LYS:HG3	1:A:75:LYS:HA	4	0.32
(2,1904)	1:A:66:GLU:H	1:A:67:LYS:HB2	10	0.32
(2,1904)	1:A:66:GLU:H	1:A:71:LYS:HD3	10	0.32
(2,1759)	1:A:82:PHE:HB3	1:A:76:MET:HG2	8	0.32
(2,1759)	1:A:82:PHE:HB3	1:A:85:ARG:HG3	8	0.32
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD12	1:A:87:GLU:HB3	1	0.32
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD11	1:A:87:GLU:HB3	1	0.32
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD13	1:A:87:GLU:HB3	1	0.32
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD12	1:A:88:GLU:HB3	1	0.32
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD11	1:A:88:GLU:HB3	1	0.32
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD13	1:A:88:GLU:HB3	1	0.32
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD12	1:A:115:MET:HB3	1	0.32
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD11	1:A:115:MET:HB3	1	0.32
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD13	1:A:115:MET:HB3	1	0.32
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD12	1:A:122:ILE:HG13	1	0.32
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD11	1:A:122:ILE:HG13	1	0.32
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD13	1:A:122:ILE:HG13	1	0.32
(2,1386)	1:A:109:THR:HG21	1:A:58:GLU:HG2	4	0.32
(2,1386)	1:A:109:THR:HG22	1:A:58:GLU:HG2	4	0.32
(2,1386)	1:A:109:THR:HG23	1:A:58:GLU:HG2	4	0.32
(2,1386)	1:A:84:THR:HG21	1:A:87:GLU:HB3	4	0.32
(2,1386)	1:A:84:THR:HG22	1:A:87:GLU:HB3	4	0.32
(2,1386)	1:A:84:THR:HG23	1:A:87:GLU:HB3	4	0.32
(2,1386)	1:A:84:THR:HG21	1:A:88:GLU:HB3	4	0.32
(2,1386)	1:A:84:THR:HG22	1:A:88:GLU:HB3	4	0.32
(2,1386)	1:A:84:THR:HG23	1:A:88:GLU:HB3	4	0.32
(2,1324)	1:A:107:PRO:HB3	1:A:108:LYS:HG3	10	0.32
(2,1324)	1:A:115:MET:HG3	1:A:108:LYS:HG3	10	0.32
(2,1304)	1:A:106:LEU:HD12	1:A:109:THR:H	2	0.32
(2,1304)	1:A:106:LEU:HD11	1:A:109:THR:H	2	0.32

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1304)	1:A:106:LEU:HD13	1:A:109:THR:H	2	0.32
(2,1304)	1:A:106:LEU:HD12	1:A:110:VAL:H	2	0.32
(2,1304)	1:A:106:LEU:HD11	1:A:110:VAL:H	2	0.32
(2,1304)	1:A:106:LEU:HD13	1:A:110:VAL:H	2	0.32
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD12	1:A:82:PHE:HE1	2	0.32
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD12	1:A:82:PHE:HE2	2	0.32
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD11	1:A:82:PHE:HE1	2	0.32
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD11	1:A:82:PHE:HE2	2	0.32
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD13	1:A:82:PHE:HE1	2	0.32
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD13	1:A:82:PHE:HE2	2	0.32
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD12	1:A:82:PHE:HZ	2	0.32
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD11	1:A:82:PHE:HZ	2	0.32
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD13	1:A:82:PHE:HZ	2	0.32
(2,1190)	1:A:59:MET:HG2	1:A:133:SER:HB2	3	0.32
(2,1190)	1:A:63:MET:HB2	1:A:130:GLY:HA2	3	0.32
(2,1190)	1:A:107:PRO:HB3	1:A:90:GLY:HA2	3	0.32
(2,1149)	1:A:58:GLU:H	1:A:58:GLU:HG2	7	0.32
(2,1149)	1:A:58:GLU:H	1:A:58:GLU:HG2	7	0.32
(2,1149)	1:A:58:GLU:H	1:A:58:GLU:HG2	7	0.32
(2,1043)	1:A:89:LEU:H	1:A:89:LEU:HB3	2	0.32
(2,1012)	1:A:119:LEU:H	1:A:119:LEU:HB3	7	0.32
(1,13)	1:A:120:HIS:HB2	1:A:122:ILE:HG13	8	0.32
(2,931)	1:A:60:THR:H	1:A:59:MET:HG3	4	0.31
(2,744)	1:A:105:GLU:H	1:A:105:GLU:HG2	5	0.31
(2,687)	1:A:108:LYS:HE3	1:A:60:THR:HA	9	0.31
(2,36)	1:A:66:GLU:HG3	1:A:66:GLU:HB2	7	0.31
(2,219)	1:A:75:LYS:HG3	1:A:75:LYS:HA	1	0.31
(2,200)	1:A:118:LEU:HD12	1:A:86:ILE:HA	8	0.31
(2,200)	1:A:118:LEU:HD11	1:A:86:ILE:HA	8	0.31
(2,200)	1:A:118:LEU:HD13	1:A:86:ILE:HA	8	0.31
(2,1846)	1:A:106:LEU:H	1:A:105:GLU:HB2	10	0.31
(2,1846)	1:A:106:LEU:H	1:A:105:GLU:HG3	10	0.31
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD12	1:A:87:GLU:HB3	8	0.31
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD11	1:A:87:GLU:HB3	8	0.31
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD13	1:A:87:GLU:HB3	8	0.31
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD12	1:A:88:GLU:HB3	8	0.31
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD11	1:A:88:GLU:HB3	8	0.31
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD13	1:A:88:GLU:HB3	8	0.31
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD12	1:A:115:MET:HB3	8	0.31
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD11	1:A:115:MET:HB3	8	0.31
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD13	1:A:115:MET:HB3	8	0.31
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD12	1:A:122:ILE:HG13	8	0.31

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD11	1:A:122:ILE:HG13	8	0.31
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD13	1:A:122:ILE:HG13	8	0.31
(2,1324)	1:A:107:PRO:HB3	1:A:108:LYS:HG3	9	0.31
(2,1324)	1:A:115:MET:HG3	1:A:108:LYS:HG3	9	0.31
(2,1304)	1:A:106:LEU:HD12	1:A:109:THR:H	10	0.31
(2,1304)	1:A:106:LEU:HD11	1:A:109:THR:H	10	0.31
(2,1304)	1:A:106:LEU:HD13	1:A:109:THR:H	10	0.31
(2,1304)	1:A:106:LEU:HD12	1:A:110:VAL:H	10	0.31
(2,1304)	1:A:106:LEU:HD11	1:A:110:VAL:H	10	0.31
(2,1304)	1:A:106:LEU:HD13	1:A:110:VAL:H	10	0.31
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD12	1:A:82:PHE:HE1	10	0.31
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD12	1:A:82:PHE:HE2	10	0.31
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD11	1:A:82:PHE:HE1	10	0.31
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD11	1:A:82:PHE:HE2	10	0.31
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD13	1:A:82:PHE:HE1	10	0.31
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD13	1:A:82:PHE:HE2	10	0.31
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD12	1:A:82:PHE:HZ	10	0.31
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD11	1:A:82:PHE:HZ	10	0.31
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD13	1:A:82:PHE:HZ	10	0.31
(2,1258)	1:A:108:LYS:HD3	1:A:59:MET:HA	10	0.31
(2,1258)	1:A:136:LYS:HD2	1:A:59:MET:HA	10	0.31
(2,1258)	1:A:136:LYS:HD3	1:A:59:MET:HA	10	0.31
(2,1043)	1:A:89:LEU:H	1:A:89:LEU:HB3	10	0.31
(2,1032)	1:A:84:THR:H	1:A:84:THR:HG21	8	0.31
(2,1032)	1:A:84:THR:H	1:A:84:THR:HG22	8	0.31
(2,1032)	1:A:84:THR:H	1:A:84:THR:HG23	8	0.31
(2,1032)	1:A:84:THR:H	1:A:84:THR:HG21	9	0.31
(2,1032)	1:A:84:THR:H	1:A:84:THR:HG22	9	0.31
(2,1032)	1:A:84:THR:H	1:A:84:THR:HG23	9	0.31
(1,3)	1:A:122:ILE:HB	1:A:62:LEU:HB2	7	0.31
(1,3)	1:A:122:ILE:HB	1:A:62:LEU:HB2	9	0.31
(1,13)	1:A:120:HIS:HB2	1:A:122:ILE:HG13	5	0.31
(1,13)	1:A:120:HIS:HB2	1:A:122:ILE:HG13	9	0.31
(2,962)	1:A:114:ASP:H	1:A:114:ASP:HB3	8	0.3
(2,744)	1:A:105:GLU:H	1:A:105:GLU:HG2	1	0.3
(2,1833)	1:A:137:LEU:H	1:A:134:GLU:HB2	8	0.3
(2,1833)	1:A:137:LEU:H	1:A:135:VAL:HB	8	0.3
(2,1833)	1:A:137:LEU:H	1:A:105:GLU:HG3	8	0.3
(2,1506)	1:A:128:VAL:HB	1:A:70:SER:HB2	10	0.3
(2,1506)	1:A:66:GLU:HB2	1:A:70:SER:HB2	10	0.3
(2,1506)	1:A:128:VAL:HB	1:A:70:SER:HB3	10	0.3
(2,1506)	1:A:66:GLU:HB2	1:A:70:SER:HB3	10	0.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1506)	1:A:70:SER:HB3	1:A:71:LYS:HB3	10	0.3
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD12	1:A:87:GLU:HB3	4	0.3
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD11	1:A:87:GLU:HB3	4	0.3
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD13	1:A:87:GLU:HB3	4	0.3
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD12	1:A:88:GLU:HB3	4	0.3
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD11	1:A:88:GLU:HB3	4	0.3
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD13	1:A:88:GLU:HB3	4	0.3
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD12	1:A:115:MET:HB3	4	0.3
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD11	1:A:115:MET:HB3	4	0.3
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD13	1:A:115:MET:HB3	4	0.3
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD12	1:A:122:ILE:HG13	4	0.3
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD11	1:A:122:ILE:HG13	4	0.3
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD13	1:A:122:ILE:HG13	4	0.3
(2,1302)	1:A:62:LEU:HG	1:A:103:MET:HG2	2	0.3
(2,1302)	1:A:62:LEU:HG	1:A:122:ILE:HG13	2	0.3
(2,1302)	1:A:106:LEU:HG	1:A:58:GLU:HG2	2	0.3
(2,1302)	1:A:106:LEU:HG	1:A:58:GLU:HG3	2	0.3
(2,1302)	1:A:118:LEU:HG	1:A:122:ILE:HG13	2	0.3
(2,1288)	1:A:137:LEU:HG	1:A:131:LEU:HA	8	0.3
(2,1288)	1:A:137:LEU:HG	1:A:132:ASP:HA	8	0.3
(2,121)	1:A:58:GLU:HB3	1:A:59:MET:HA	10	0.3
(2,1149)	1:A:58:GLU:H	1:A:58:GLU:HG2	4	0.3
(2,1149)	1:A:58:GLU:H	1:A:58:GLU:HG2	4	0.3
(2,1149)	1:A:58:GLU:H	1:A:58:GLU:HG2	4	0.3
(2,1043)	1:A:89:LEU:H	1:A:89:LEU:HB3	5	0.3
(2,1042)	1:A:89:LEU:H	1:A:88:GLU:HB3	2	0.3
(2,962)	1:A:114:ASP:H	1:A:114:ASP:HB3	1	0.29
(2,962)	1:A:114:ASP:H	1:A:114:ASP:HB3	3	0.29
(2,962)	1:A:114:ASP:H	1:A:114:ASP:HB3	4	0.29
(2,962)	1:A:114:ASP:H	1:A:114:ASP:HB3	7	0.29
(2,962)	1:A:114:ASP:H	1:A:114:ASP:HB3	9	0.29
(2,604)	1:A:131:LEU:HD22	1:A:131:LEU:HA	3	0.29
(2,604)	1:A:131:LEU:HD21	1:A:131:LEU:HA	3	0.29
(2,604)	1:A:131:LEU:HD23	1:A:131:LEU:HA	3	0.29
(2,560)	1:A:70:SER:HB2	1:A:70:SER:HA	9	0.29
(2,200)	1:A:118:LEU:HD12	1:A:86:ILE:HA	1	0.29
(2,200)	1:A:118:LEU:HD11	1:A:86:ILE:HA	1	0.29
(2,200)	1:A:118:LEU:HD13	1:A:86:ILE:HA	1	0.29
(2,200)	1:A:118:LEU:HD12	1:A:86:ILE:HA	4	0.29
(2,200)	1:A:118:LEU:HD11	1:A:86:ILE:HA	4	0.29
(2,200)	1:A:118:LEU:HD13	1:A:86:ILE:HA	4	0.29
(2,200)	1:A:118:LEU:HD12	1:A:86:ILE:HA	7	0.29

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,200)	1:A:118:LEU:HD11	1:A:86:ILE:HA	7	0.29
(2,200)	1:A:118:LEU:HD13	1:A:86:ILE:HA	7	0.29
(2,1861)	1:A:77:ALA:H	1:A:127:GLY:HA2	1	0.29
(2,1861)	1:A:121:ASP:H	1:A:116:ASP:HB2	1	0.29
(2,1861)	1:A:121:ASP:H	1:A:127:GLY:HA2	1	0.29
(2,1861)	1:A:77:ALA:H	1:A:78:LYS:HE3	1	0.29
(2,1726)	1:A:127:GLY:HA2	1:A:66:GLU:HB2	2	0.29
(2,1726)	1:A:127:GLY:HA2	1:A:76:MET:HB2	2	0.29
(2,1726)	1:A:127:GLY:HA2	1:A:128:VAL:HB	2	0.29
(2,1726)	1:A:127:GLY:HA2	1:A:66:GLU:HB2	3	0.29
(2,1726)	1:A:127:GLY:HA2	1:A:76:MET:HB2	3	0.29
(2,1726)	1:A:127:GLY:HA2	1:A:128:VAL:HB	3	0.29
(2,1645)	1:A:71:LYS:HA	1:A:69:GLU:HB2	6	0.29
(2,1645)	1:A:71:LYS:HA	1:A:69:GLU:HB3	6	0.29
(2,1645)	1:A:71:LYS:HA	1:A:69:GLU:HB2	10	0.29
(2,1645)	1:A:71:LYS:HA	1:A:69:GLU:HB3	10	0.29
(2,1544)	1:A:74:SER:HB3	1:A:71:LYS:HG2	7	0.29
(2,1544)	1:A:74:SER:HB3	1:A:75:LYS:HG2	7	0.29
(2,1544)	1:A:74:SER:HB3	1:A:78:LYS:HG3	7	0.29
(2,1544)	1:A:74:SER:HB3	1:A:97:THR:HG21	7	0.29
(2,1544)	1:A:74:SER:HB3	1:A:97:THR:HG22	7	0.29
(2,1544)	1:A:74:SER:HB3	1:A:97:THR:HG23	7	0.29
(2,1324)	1:A:107:PRO:HB3	1:A:108:LYS:HG3	7	0.29
(2,1324)	1:A:115:MET:HG3	1:A:108:LYS:HG3	7	0.29
(2,1304)	1:A:106:LEU:HD12	1:A:109:THR:H	1	0.29
(2,1304)	1:A:106:LEU:HD11	1:A:109:THR:H	1	0.29
(2,1304)	1:A:106:LEU:HD13	1:A:109:THR:H	1	0.29
(2,1304)	1:A:106:LEU:HD12	1:A:110:VAL:H	1	0.29
(2,1304)	1:A:106:LEU:HD11	1:A:110:VAL:H	1	0.29
(2,1304)	1:A:106:LEU:HD13	1:A:110:VAL:H	1	0.29
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD12	1:A:82:PHE:HE1	1	0.29
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD12	1:A:82:PHE:HE2	1	0.29
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD11	1:A:82:PHE:HE1	1	0.29
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD11	1:A:82:PHE:HE2	1	0.29
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD13	1:A:82:PHE:HE1	1	0.29
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD13	1:A:82:PHE:HE2	1	0.29
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD12	1:A:82:PHE:HZ	1	0.29
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD11	1:A:82:PHE:HZ	1	0.29
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD13	1:A:82:PHE:HZ	1	0.29
(2,1302)	1:A:62:LEU:HG	1:A:103:MET:HG2	10	0.29
(2,1302)	1:A:62:LEU:HG	1:A:122:ILE:HG13	10	0.29
(2,1302)	1:A:106:LEU:HG	1:A:58:GLU:HG2	10	0.29

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1302)	1:A:106:LEU:HG	1:A:58:GLU:HG3	10	0.29
(2,1302)	1:A:118:LEU:HG	1:A:122:ILE:HG13	10	0.29
(2,1258)	1:A:108:LYS:HD3	1:A:59:MET:HA	6	0.29
(2,1258)	1:A:136:LYS:HD2	1:A:59:MET:HA	6	0.29
(2,1258)	1:A:136:LYS:HD3	1:A:59:MET:HA	6	0.29
(2,1144)	1:A:126:GLY:H	1:A:127:GLY:HA2	5	0.29
(1,13)	1:A:120:HIS:HB2	1:A:122:ILE:HG13	6	0.29
(2,962)	1:A:114:ASP:H	1:A:114:ASP:HB3	6	0.28
(2,530)	1:A:88:GLU:HA	1:A:88:GLU:HB2	7	0.28
(2,219)	1:A:75:LYS:HG3	1:A:75:LYS:HA	2	0.28
(2,200)	1:A:118:LEU:HD12	1:A:86:ILE:HA	3	0.28
(2,200)	1:A:118:LEU:HD11	1:A:86:ILE:HA	3	0.28
(2,200)	1:A:118:LEU:HD13	1:A:86:ILE:HA	3	0.28
(2,200)	1:A:118:LEU:HD12	1:A:86:ILE:HA	6	0.28
(2,200)	1:A:118:LEU:HD11	1:A:86:ILE:HA	6	0.28
(2,200)	1:A:118:LEU:HD13	1:A:86:ILE:HA	6	0.28
(2,1741)	1:A:136:LYS:HE2	1:A:136:LYS:HA	4	0.28
(2,1741)	1:A:67:LYS:HE2	1:A:70:SER:HA	4	0.28
(2,1741)	1:A:71:LYS:HE2	1:A:72:ASN:HA	4	0.28
(2,1741)	1:A:75:LYS:HE2	1:A:79:SER:HA	4	0.28
(2,1726)	1:A:127:GLY:HA2	1:A:66:GLU:HB2	5	0.28
(2,1726)	1:A:127:GLY:HA2	1:A:76:MET:HB2	5	0.28
(2,1726)	1:A:127:GLY:HA2	1:A:128:VAL:HB	5	0.28
(2,1721)	1:A:85:ARG:HD2	1:A:84:THR:HA	10	0.28
(2,1721)	1:A:85:ARG:HA	1:A:85:ARG:HD2	10	0.28
(2,1532)	1:A:88:GLU:HB3	1:A:81:SER:HA	10	0.28
(2,1532)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:83:SER:HA	10	0.28
(2,1500)	1:A:133:SER:HB3	1:A:105:GLU:HG3	1	0.28
(2,1500)	1:A:128:VAL:HB	1:A:70:SER:HB2	1	0.28
(2,1500)	1:A:66:GLU:HB2	1:A:70:SER:HB2	1	0.28
(2,1500)	1:A:128:VAL:HB	1:A:70:SER:HB3	1	0.28
(2,1500)	1:A:66:GLU:HB2	1:A:70:SER:HB3	1	0.28
(2,1500)	1:A:70:SER:HB3	1:A:71:LYS:HB3	1	0.28
(2,1304)	1:A:106:LEU:HD12	1:A:109:THR:H	7	0.28
(2,1304)	1:A:106:LEU:HD11	1:A:109:THR:H	7	0.28
(2,1304)	1:A:106:LEU:HD13	1:A:109:THR:H	7	0.28
(2,1304)	1:A:106:LEU:HD12	1:A:110:VAL:H	7	0.28
(2,1304)	1:A:106:LEU:HD11	1:A:110:VAL:H	7	0.28
(2,1304)	1:A:106:LEU:HD13	1:A:110:VAL:H	7	0.28
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD12	1:A:82:PHE:HE1	7	0.28
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD12	1:A:82:PHE:HE2	7	0.28
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD11	1:A:82:PHE:HE1	7	0.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD11	1:A:82:PHE:HE2	7	0.28
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD13	1:A:82:PHE:HE1	7	0.28
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD13	1:A:82:PHE:HE2	7	0.28
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD12	1:A:82:PHE:HZ	7	0.28
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD11	1:A:82:PHE:HZ	7	0.28
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD13	1:A:82:PHE:HZ	7	0.28
(2,1208)	1:A:66:GLU:HB3	1:A:100:GLY:HA2	4	0.28
(2,1208)	1:A:66:GLU:HB3	1:A:74:SER:HA	4	0.28
(2,1062)	1:A:120:HIS:H	1:A:119:LEU:HB3	9	0.28
(1,46)	1:A:108:LYS:HE3	1:A:59:MET:HA	1	0.28
(1,3)	1:A:122:ILE:HB	1:A:62:LEU:HB2	5	0.28
(2,962)	1:A:114:ASP:H	1:A:114:ASP:HB3	5	0.27
(2,946)	1:A:58:GLU:H	1:A:58:GLU:HB2	4	0.27
(2,946)	1:A:58:GLU:H	1:A:58:GLU:HB2	4	0.27
(2,946)	1:A:58:GLU:H	1:A:58:GLU:HB2	4	0.27
(2,538)	1:A:120:HIS:HB2	1:A:117:GLN:HA	5	0.27
(2,311)	1:A:135:VAL:HG22	1:A:133:SER:HB2	7	0.27
(2,311)	1:A:135:VAL:HG21	1:A:133:SER:HB2	7	0.27
(2,311)	1:A:135:VAL:HG23	1:A:133:SER:HB2	7	0.27
(2,311)	1:A:135:VAL:HG12	1:A:133:SER:HB2	7	0.27
(2,311)	1:A:135:VAL:HG11	1:A:133:SER:HB2	7	0.27
(2,311)	1:A:135:VAL:HG13	1:A:133:SER:HB2	7	0.27
(2,219)	1:A:75:LYS:HG3	1:A:75:LYS:HA	8	0.27
(2,1726)	1:A:127:GLY:HA2	1:A:66:GLU:HB2	1	0.27
(2,1726)	1:A:127:GLY:HA2	1:A:76:MET:HB2	1	0.27
(2,1726)	1:A:127:GLY:HA2	1:A:128:VAL:HB	1	0.27
(2,1726)	1:A:127:GLY:HA2	1:A:66:GLU:HB2	7	0.27
(2,1726)	1:A:127:GLY:HA2	1:A:76:MET:HB2	7	0.27
(2,1726)	1:A:127:GLY:HA2	1:A:128:VAL:HB	7	0.27
(2,1721)	1:A:85:ARG:HD2	1:A:84:THR:HA	5	0.27
(2,1721)	1:A:85:ARG:HA	1:A:85:ARG:HD2	5	0.27
(2,1645)	1:A:71:LYS:HA	1:A:69:GLU:HB2	3	0.27
(2,1645)	1:A:71:LYS:HA	1:A:69:GLU:HB3	3	0.27
(2,1626)	1:A:118:LEU:HA	1:A:85:ARG:HG2	8	0.27
(2,1626)	1:A:69:GLU:HA	1:A:67:LYS:HG3	8	0.27
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD12	1:A:87:GLU:HB3	9	0.27
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD11	1:A:87:GLU:HB3	9	0.27
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD13	1:A:87:GLU:HB3	9	0.27
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD12	1:A:88:GLU:HB3	9	0.27
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD11	1:A:88:GLU:HB3	9	0.27
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD13	1:A:88:GLU:HB3	9	0.27
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD12	1:A:115:MET:HB3	9	0.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD11	1:A:115:MET:HB3	9	0.27
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD13	1:A:115:MET:HB3	9	0.27
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD12	1:A:122:ILE:HG13	9	0.27
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD11	1:A:122:ILE:HG13	9	0.27
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD13	1:A:122:ILE:HG13	9	0.27
(2,1325)	1:A:136:LYS:HG3	1:A:58:GLU:HG2	7	0.27
(2,1325)	1:A:71:LYS:HG3	1:A:68:GLN:HB3	7	0.27
(2,1325)	1:A:108:LYS:HG3	1:A:115:MET:HB3	7	0.27
(2,1304)	1:A:106:LEU:HD12	1:A:109:THR:H	3	0.27
(2,1304)	1:A:106:LEU:HD11	1:A:109:THR:H	3	0.27
(2,1304)	1:A:106:LEU:HD13	1:A:109:THR:H	3	0.27
(2,1304)	1:A:106:LEU:HD12	1:A:110:VAL:H	3	0.27
(2,1304)	1:A:106:LEU:HD11	1:A:110:VAL:H	3	0.27
(2,1304)	1:A:106:LEU:HD13	1:A:110:VAL:H	3	0.27
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD12	1:A:82:PHE:HE1	3	0.27
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD12	1:A:82:PHE:HE2	3	0.27
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD11	1:A:82:PHE:HE1	3	0.27
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD11	1:A:82:PHE:HE2	3	0.27
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD13	1:A:82:PHE:HE1	3	0.27
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD13	1:A:82:PHE:HE2	3	0.27
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD12	1:A:82:PHE:HZ	3	0.27
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD11	1:A:82:PHE:HZ	3	0.27
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD13	1:A:82:PHE:HZ	3	0.27
(2,1304)	1:A:106:LEU:HD12	1:A:109:THR:H	6	0.27
(2,1304)	1:A:106:LEU:HD11	1:A:109:THR:H	6	0.27
(2,1304)	1:A:106:LEU:HD13	1:A:109:THR:H	6	0.27
(2,1304)	1:A:106:LEU:HD12	1:A:110:VAL:H	6	0.27
(2,1304)	1:A:106:LEU:HD11	1:A:110:VAL:H	6	0.27
(2,1304)	1:A:106:LEU:HD13	1:A:110:VAL:H	6	0.27
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD12	1:A:82:PHE:HE1	6	0.27
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD12	1:A:82:PHE:HE2	6	0.27
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD11	1:A:82:PHE:HE1	6	0.27
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD11	1:A:82:PHE:HE2	6	0.27
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD13	1:A:82:PHE:HE1	6	0.27
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD13	1:A:82:PHE:HE2	6	0.27
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD12	1:A:82:PHE:HZ	6	0.27
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD11	1:A:82:PHE:HZ	6	0.27
(2,1304)	1:A:118:LEU:HD13	1:A:82:PHE:HZ	6	0.27
(2,1302)	1:A:62:LEU:HG	1:A:103:MET:HG2	9	0.27
(2,1302)	1:A:62:LEU:HG	1:A:122:ILE:HG13	9	0.27
(2,1302)	1:A:106:LEU:HG	1:A:58:GLU:HG2	9	0.27
(2,1302)	1:A:106:LEU:HG	1:A:58:GLU:HG3	9	0.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1302)	1:A:118:LEU:HG	1:A:122:ILE:HG13	9	0.27
(2,1258)	1:A:108:LYS:HD3	1:A:59:MET:HA	5	0.27
(2,1258)	1:A:136:LYS:HD2	1:A:59:MET:HA	5	0.27
(2,1258)	1:A:136:LYS:HD3	1:A:59:MET:HA	5	0.27
(2,1062)	1:A:120:HIS:H	1:A:119:LEU:HB3	1	0.27
(2,1062)	1:A:120:HIS:H	1:A:119:LEU:HB3	8	0.27
(2,106)	1:A:103:MET:HG2	1:A:94:SER:HB2	6	0.27
(1,41)	1:A:105:GLU:HA	1:A:132:ASP:HB2	1	0.27
(1,13)	1:A:120:HIS:HB2	1:A:122:ILE:HG13	7	0.27
(2,296)	1:A:101:VAL:HG22	1:A:94:SER:HB2	10	0.26
(2,296)	1:A:101:VAL:HG21	1:A:94:SER:HB2	10	0.26
(2,296)	1:A:101:VAL:HG23	1:A:94:SER:HB2	10	0.26
(2,296)	1:A:101:VAL:HG12	1:A:94:SER:HB2	10	0.26
(2,296)	1:A:101:VAL:HG11	1:A:94:SER:HB2	10	0.26
(2,296)	1:A:101:VAL:HG13	1:A:94:SER:HB2	10	0.26
(2,1933)	1:A:92:SER:H	1:A:93:ILE:HD12	6	0.26
(2,1933)	1:A:92:SER:H	1:A:93:ILE:HD11	6	0.26
(2,1933)	1:A:92:SER:H	1:A:93:ILE:HD13	6	0.26
(2,1933)	1:A:92:SER:H	1:A:104:ILE:HD12	6	0.26
(2,1933)	1:A:92:SER:H	1:A:104:ILE:HD11	6	0.26
(2,1933)	1:A:92:SER:H	1:A:104:ILE:HD13	6	0.26
(2,1933)	1:A:92:SER:H	1:A:104:ILE:HG12	6	0.26
(2,1904)	1:A:66:GLU:H	1:A:67:LYS:HB2	1	0.26
(2,1904)	1:A:66:GLU:H	1:A:71:LYS:HD3	1	0.26
(2,1833)	1:A:137:LEU:H	1:A:134:GLU:HB2	6	0.26
(2,1833)	1:A:137:LEU:H	1:A:135:VAL:HB	6	0.26
(2,1833)	1:A:137:LEU:H	1:A:105:GLU:HG3	6	0.26
(2,1759)	1:A:82:PHE:HB3	1:A:76:MET:HG2	9	0.26
(2,1759)	1:A:82:PHE:HB3	1:A:85:ARG:HG3	9	0.26
(2,1726)	1:A:127:GLY:HA2	1:A:66:GLU:HB2	9	0.26
(2,1726)	1:A:127:GLY:HA2	1:A:76:MET:HB2	9	0.26
(2,1726)	1:A:127:GLY:HA2	1:A:128:VAL:HB	9	0.26
(2,1721)	1:A:85:ARG:HD2	1:A:84:THR:HA	3	0.26
(2,1721)	1:A:85:ARG:HA	1:A:85:ARG:HD2	3	0.26
(2,1721)	1:A:85:ARG:HD2	1:A:84:THR:HA	4	0.26
(2,1721)	1:A:85:ARG:HA	1:A:85:ARG:HD2	4	0.26
(2,1649)	1:A:78:LYS:HD3	1:A:78:LYS:HA	4	0.26
(2,1649)	1:A:78:LYS:HG3	1:A:78:LYS:HA	4	0.26
(2,1649)	1:A:78:LYS:HD2	1:A:78:LYS:HA	4	0.26
(2,1506)	1:A:128:VAL:HB	1:A:70:SER:HB2	2	0.26
(2,1506)	1:A:66:GLU:HB2	1:A:70:SER:HB2	2	0.26
(2,1506)	1:A:128:VAL:HB	1:A:70:SER:HB3	2	0.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1506)	1:A:66:GLU:HB2	1:A:70:SER:HB3	2	0.26
(2,1506)	1:A:70:SER:HB3	1:A:71:LYS:HB3	2	0.26
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD12	1:A:87:GLU:HB3	3	0.26
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD11	1:A:87:GLU:HB3	3	0.26
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD13	1:A:87:GLU:HB3	3	0.26
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD12	1:A:88:GLU:HB3	3	0.26
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD11	1:A:88:GLU:HB3	3	0.26
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD13	1:A:88:GLU:HB3	3	0.26
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD12	1:A:115:MET:HB3	3	0.26
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD11	1:A:115:MET:HB3	3	0.26
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD13	1:A:115:MET:HB3	3	0.26
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD12	1:A:122:ILE:HG13	3	0.26
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD11	1:A:122:ILE:HG13	3	0.26
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD13	1:A:122:ILE:HG13	3	0.26
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD12	1:A:87:GLU:HB3	5	0.26
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD11	1:A:87:GLU:HB3	5	0.26
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD13	1:A:87:GLU:HB3	5	0.26
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD12	1:A:88:GLU:HB3	5	0.26
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD11	1:A:88:GLU:HB3	5	0.26
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD13	1:A:88:GLU:HB3	5	0.26
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD12	1:A:115:MET:HB3	5	0.26
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD11	1:A:115:MET:HB3	5	0.26
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD13	1:A:115:MET:HB3	5	0.26
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD12	1:A:122:ILE:HG13	5	0.26
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD11	1:A:122:ILE:HG13	5	0.26
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD13	1:A:122:ILE:HG13	5	0.26
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD12	1:A:87:GLU:HB3	7	0.26
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD11	1:A:87:GLU:HB3	7	0.26
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD13	1:A:87:GLU:HB3	7	0.26
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD12	1:A:88:GLU:HB3	7	0.26
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD11	1:A:88:GLU:HB3	7	0.26
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD13	1:A:88:GLU:HB3	7	0.26
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD12	1:A:115:MET:HB3	7	0.26
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD11	1:A:115:MET:HB3	7	0.26
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD13	1:A:115:MET:HB3	7	0.26
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD12	1:A:122:ILE:HG13	7	0.26
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD11	1:A:122:ILE:HG13	7	0.26
(2,1470)	1:A:86:ILE:HD13	1:A:122:ILE:HG13	7	0.26
(2,1302)	1:A:62:LEU:HG	1:A:103:MET:HG2	3	0.26
(2,1302)	1:A:62:LEU:HG	1:A:122:ILE:HG13	3	0.26
(2,1302)	1:A:106:LEU:HG	1:A:58:GLU:HG2	3	0.26
(2,1302)	1:A:106:LEU:HG	1:A:58:GLU:HG3	3	0.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1302)	1:A:118:LEU:HG	1:A:122:ILE:HG13	3	0.26
(2,1302)	1:A:62:LEU:HG	1:A:103:MET:HG2	7	0.26
(2,1302)	1:A:62:LEU:HG	1:A:122:ILE:HG13	7	0.26
(2,1302)	1:A:106:LEU:HG	1:A:58:GLU:HG2	7	0.26
(2,1302)	1:A:106:LEU:HG	1:A:58:GLU:HG3	7	0.26
(2,1302)	1:A:118:LEU:HG	1:A:122:ILE:HG13	7	0.26
(2,1258)	1:A:108:LYS:HD3	1:A:59:MET:HA	8	0.26
(2,1258)	1:A:136:LYS:HD2	1:A:59:MET:HA	8	0.26
(2,1258)	1:A:136:LYS:HD3	1:A:59:MET:HA	8	0.26
(2,1144)	1:A:126:GLY:H	1:A:127:GLY:HA2	3	0.26
(2,1062)	1:A:120:HIS:H	1:A:119:LEU:HB3	4	0.26
(2,1062)	1:A:120:HIS:H	1:A:119:LEU:HB3	6	0.26
(2,1032)	1:A:84:THR:H	1:A:84:THR:HG21	1	0.26
(2,1032)	1:A:84:THR:H	1:A:84:THR:HG22	1	0.26
(2,1032)	1:A:84:THR:H	1:A:84:THR:HG23	1	0.26
(2,1032)	1:A:84:THR:H	1:A:84:THR:HG21	7	0.26
(2,1032)	1:A:84:THR:H	1:A:84:THR:HG22	7	0.26
(2,1032)	1:A:84:THR:H	1:A:84:THR:HG23	7	0.26
(1,41)	1:A:105:GLU:HA	1:A:132:ASP:HB2	6	0.26
(2,688)	1:A:108:LYS:HD3	1:A:108:LYS:HE3	5	0.25
(2,688)	1:A:108:LYS:HD3	1:A:108:LYS:HE3	6	0.25
(2,664)	1:A:118:LEU:HD22	1:A:85:ARG:HD3	1	0.25
(2,664)	1:A:118:LEU:HD21	1:A:85:ARG:HD3	1	0.25
(2,664)	1:A:118:LEU:HD23	1:A:85:ARG:HD3	1	0.25
(2,664)	1:A:118:LEU:HD22	1:A:85:ARG:HD3	3	0.25
(2,664)	1:A:118:LEU:HD21	1:A:85:ARG:HD3	3	0.25
(2,664)	1:A:118:LEU:HD23	1:A:85:ARG:HD3	3	0.25
(2,664)	1:A:118:LEU:HD22	1:A:85:ARG:HD3	4	0.25
(2,664)	1:A:118:LEU:HD21	1:A:85:ARG:HD3	4	0.25
(2,664)	1:A:118:LEU:HD23	1:A:85:ARG:HD3	4	0.25
(2,664)	1:A:118:LEU:HD22	1:A:85:ARG:HD3	5	0.25
(2,664)	1:A:118:LEU:HD21	1:A:85:ARG:HD3	5	0.25
(2,664)	1:A:118:LEU:HD23	1:A:85:ARG:HD3	5	0.25
(2,664)	1:A:118:LEU:HD22	1:A:85:ARG:HD3	6	0.25
(2,664)	1:A:118:LEU:HD21	1:A:85:ARG:HD3	6	0.25
(2,664)	1:A:118:LEU:HD23	1:A:85:ARG:HD3	6	0.25
(2,664)	1:A:118:LEU:HD22	1:A:85:ARG:HD3	8	0.25
(2,664)	1:A:118:LEU:HD21	1:A:85:ARG:HD3	8	0.25
(2,664)	1:A:118:LEU:HD23	1:A:85:ARG:HD3	8	0.25
(2,664)	1:A:118:LEU:HD22	1:A:85:ARG:HD3	10	0.25
(2,664)	1:A:118:LEU:HD21	1:A:85:ARG:HD3	10	0.25
(2,664)	1:A:118:LEU:HD23	1:A:85:ARG:HD3	10	0.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,649)	1:A:70:SER:HB2	1:A:126:GLY:HA3	2	0.25
(2,560)	1:A:70:SER:HB2	1:A:70:SER:HA	7	0.25
(2,488)	1:A:74:SER:HB3	1:A:95:PHE:HE1	2	0.25
(2,488)	1:A:74:SER:HB3	1:A:95:PHE:HE2	2	0.25
(2,200)	1:A:118:LEU:HD12	1:A:86:ILE:HA	5	0.25
(2,200)	1:A:118:LEU:HD11	1:A:86:ILE:HA	5	0.25
(2,200)	1:A:118:LEU:HD13	1:A:86:ILE:HA	5	0.25
(2,1933)	1:A:92:SER:H	1:A:93:ILE:HD12	1	0.25
(2,1933)	1:A:92:SER:H	1:A:93:ILE:HD11	1	0.25
(2,1933)	1:A:92:SER:H	1:A:93:ILE:HD13	1	0.25
(2,1933)	1:A:92:SER:H	1:A:104:ILE:HD12	1	0.25
(2,1933)	1:A:92:SER:H	1:A:104:ILE:HD11	1	0.25
(2,1933)	1:A:92:SER:H	1:A:104:ILE:HD13	1	0.25
(2,1933)	1:A:92:SER:H	1:A:104:ILE:HG12	1	0.25
(2,1933)	1:A:92:SER:H	1:A:93:ILE:HD12	4	0.25
(2,1933)	1:A:92:SER:H	1:A:93:ILE:HD11	4	0.25
(2,1933)	1:A:92:SER:H	1:A:93:ILE:HD13	4	0.25
(2,1933)	1:A:92:SER:H	1:A:104:ILE:HD12	4	0.25
(2,1933)	1:A:92:SER:H	1:A:104:ILE:HD11	4	0.25
(2,1933)	1:A:92:SER:H	1:A:104:ILE:HD13	4	0.25
(2,1933)	1:A:92:SER:H	1:A:104:ILE:HG12	4	0.25
(2,1933)	1:A:92:SER:H	1:A:93:ILE:HD12	5	0.25
(2,1933)	1:A:92:SER:H	1:A:93:ILE:HD11	5	0.25
(2,1933)	1:A:92:SER:H	1:A:93:ILE:HD13	5	0.25
(2,1933)	1:A:92:SER:H	1:A:104:ILE:HD12	5	0.25
(2,1933)	1:A:92:SER:H	1:A:104:ILE:HD11	5	0.25
(2,1933)	1:A:92:SER:H	1:A:104:ILE:HD13	5	0.25
(2,1933)	1:A:92:SER:H	1:A:104:ILE:HG12	5	0.25
(2,1904)	1:A:66:GLU:H	1:A:67:LYS:HB2	9	0.25
(2,1904)	1:A:66:GLU:H	1:A:71:LYS:HD3	9	0.25
(2,1861)	1:A:77:ALA:H	1:A:127:GLY:HA2	10	0.25
(2,1861)	1:A:121:ASP:H	1:A:116:ASP:HB2	10	0.25
(2,1861)	1:A:121:ASP:H	1:A:127:GLY:HA2	10	0.25
(2,1861)	1:A:77:ALA:H	1:A:78:LYS:HE3	10	0.25
(2,1726)	1:A:127:GLY:HA2	1:A:66:GLU:HB2	8	0.25
(2,1726)	1:A:127:GLY:HA2	1:A:76:MET:HB2	8	0.25
(2,1726)	1:A:127:GLY:HA2	1:A:128:VAL:HB	8	0.25
(2,1645)	1:A:71:LYS:HA	1:A:69:GLU:HB2	9	0.25
(2,1645)	1:A:71:LYS:HA	1:A:69:GLU:HB3	9	0.25
(2,1524)	1:A:108:LYS:HD3	1:A:135:VAL:HA	5	0.25
(2,1524)	1:A:110:VAL:HA	1:A:89:LEU:HB2	5	0.25
(2,1524)	1:A:136:LYS:HD2	1:A:135:VAL:HA	5	0.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1425)	1:A:138:ALA:HB2	1:A:61:ARG:HG3	2	0.25
(2,1425)	1:A:138:ALA:HB1	1:A:61:ARG:HG3	2	0.25
(2,1425)	1:A:138:ALA:HB3	1:A:61:ARG:HG3	2	0.25
(2,1425)	1:A:138:ALA:HB2	1:A:106:LEU:HB2	2	0.25
(2,1425)	1:A:138:ALA:HB2	1:A:106:LEU:HB3	2	0.25
(2,1425)	1:A:138:ALA:HB1	1:A:106:LEU:HB2	2	0.25
(2,1425)	1:A:138:ALA:HB1	1:A:106:LEU:HB3	2	0.25
(2,1425)	1:A:138:ALA:HB3	1:A:106:LEU:HB2	2	0.25
(2,1425)	1:A:138:ALA:HB3	1:A:106:LEU:HB3	2	0.25
(2,1425)	1:A:138:ALA:HB2	1:A:108:LYS:HG3	2	0.25
(2,1425)	1:A:138:ALA:HB1	1:A:108:LYS:HG3	2	0.25
(2,1425)	1:A:138:ALA:HB3	1:A:108:LYS:HG3	2	0.25
(2,1332)	1:A:137:LEU:HD12	1:A:133:SER:HB3	3	0.25
(2,1332)	1:A:137:LEU:HD11	1:A:133:SER:HB3	3	0.25
(2,1332)	1:A:137:LEU:HD13	1:A:133:SER:HB3	3	0.25
(2,1332)	1:A:119:LEU:HD12	1:A:119:LEU:HA	3	0.25
(2,1332)	1:A:119:LEU:HD11	1:A:119:LEU:HA	3	0.25
(2,1332)	1:A:119:LEU:HD13	1:A:119:LEU:HA	3	0.25
(2,1324)	1:A:107:PRO:HB3	1:A:108:LYS:HG3	2	0.25
(2,1324)	1:A:115:MET:HG3	1:A:108:LYS:HG3	2	0.25
(2,1314)	1:A:108:LYS:HG3	1:A:106:LEU:HD22	8	0.25
(2,1314)	1:A:108:LYS:HG3	1:A:106:LEU:HD21	8	0.25
(2,1314)	1:A:108:LYS:HG3	1:A:106:LEU:HD23	8	0.25
(2,1314)	1:A:108:LYS:HG3	1:A:106:LEU:HD12	8	0.25
(2,1314)	1:A:108:LYS:HG3	1:A:106:LEU:HD11	8	0.25
(2,1314)	1:A:108:LYS:HG3	1:A:106:LEU:HD13	8	0.25
(1,3)	1:A:122:ILE:HB	1:A:62:LEU:HB2	10	0.25
(2,946)	1:A:58:GLU:H	1:A:58:GLU:HB2	9	0.24
(2,946)	1:A:58:GLU:H	1:A:58:GLU:HB2	9	0.24
(2,946)	1:A:58:GLU:H	1:A:58:GLU:HB2	9	0.24
(2,943)	1:A:58:GLU:H	1:A:59:MET:H	6	0.24
(2,943)	1:A:58:GLU:H	1:A:59:MET:H	6	0.24
(2,943)	1:A:58:GLU:H	1:A:59:MET:H	6	0.24
(2,688)	1:A:108:LYS:HD3	1:A:108:LYS:HE3	1	0.24
(2,688)	1:A:108:LYS:HD3	1:A:108:LYS:HE3	4	0.24
(2,664)	1:A:118:LEU:HD22	1:A:85:ARG:HD3	2	0.24
(2,664)	1:A:118:LEU:HD21	1:A:85:ARG:HD3	2	0.24
(2,664)	1:A:118:LEU:HD23	1:A:85:ARG:HD3	2	0.24
(2,664)	1:A:118:LEU:HD22	1:A:85:ARG:HD3	7	0.24
(2,664)	1:A:118:LEU:HD21	1:A:85:ARG:HD3	7	0.24
(2,664)	1:A:118:LEU:HD23	1:A:85:ARG:HD3	7	0.24
(2,664)	1:A:118:LEU:HD22	1:A:85:ARG:HD3	9	0.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,664)	1:A:118:LEU:HD21	1:A:85:ARG:HD3	9	0.24
(2,664)	1:A:118:LEU:HD23	1:A:85:ARG:HD3	9	0.24
(2,219)	1:A:75:LYS:HG3	1:A:75:LYS:HA	10	0.24
(2,200)	1:A:118:LEU:HD12	1:A:86:ILE:HA	9	0.24
(2,200)	1:A:118:LEU:HD11	1:A:86:ILE:HA	9	0.24
(2,200)	1:A:118:LEU:HD13	1:A:86:ILE:HA	9	0.24
(2,1935)	1:A:78:LYS:H	1:A:75:LYS:HB2	3	0.24
(2,1935)	1:A:78:LYS:H	1:A:78:LYS:HB3	3	0.24
(2,1933)	1:A:92:SER:H	1:A:93:ILE:HD12	7	0.24
(2,1933)	1:A:92:SER:H	1:A:93:ILE:HD11	7	0.24
(2,1933)	1:A:92:SER:H	1:A:93:ILE:HD13	7	0.24
(2,1933)	1:A:92:SER:H	1:A:104:ILE:HD12	7	0.24
(2,1933)	1:A:92:SER:H	1:A:104:ILE:HD11	7	0.24
(2,1933)	1:A:92:SER:H	1:A:104:ILE:HD13	7	0.24
(2,1933)	1:A:92:SER:H	1:A:104:ILE:HG12	7	0.24
(2,1861)	1:A:77:ALA:H	1:A:127:GLY:HA2	2	0.24
(2,1861)	1:A:121:ASP:H	1:A:116:ASP:HB2	2	0.24
(2,1861)	1:A:121:ASP:H	1:A:127:GLY:HA2	2	0.24
(2,1861)	1:A:77:ALA:H	1:A:78:LYS:HE3	2	0.24
(2,1846)	1:A:106:LEU:H	1:A:105:GLU:HB2	2	0.24
(2,1846)	1:A:106:LEU:H	1:A:105:GLU:HG3	2	0.24
(2,1759)	1:A:82:PHE:HB3	1:A:76:MET:HG2	5	0.24
(2,1759)	1:A:82:PHE:HB3	1:A:85:ARG:HG3	5	0.24
(2,1721)	1:A:85:ARG:HD2	1:A:84:THR:HA	9	0.24
(2,1721)	1:A:85:ARG:HA	1:A:85:ARG:HD2	9	0.24
(2,1645)	1:A:71:LYS:HA	1:A:69:GLU:HB2	1	0.24
(2,1645)	1:A:71:LYS:HA	1:A:69:GLU:HB3	1	0.24
(2,1645)	1:A:71:LYS:HA	1:A:69:GLU:HB2	7	0.24
(2,1645)	1:A:71:LYS:HA	1:A:69:GLU:HB3	7	0.24
(2,1634)	1:A:123:LEU:HA	1:A:73:PHE:HD1	5	0.24
(2,1634)	1:A:123:LEU:HA	1:A:73:PHE:HD2	5	0.24
(2,1634)	1:A:123:LEU:HA	1:A:73:PHE:HE1	5	0.24
(2,1634)	1:A:123:LEU:HA	1:A:73:PHE:HE2	5	0.24
(2,1626)	1:A:118:LEU:HA	1:A:85:ARG:HG2	1	0.24
(2,1626)	1:A:69:GLU:HA	1:A:67:LYS:HG3	1	0.24
(2,1540)	1:A:135:VAL:HA	1:A:109:THR:H	5	0.24
(2,1540)	1:A:135:VAL:HA	1:A:110:VAL:H	5	0.24
(2,1523)	1:A:135:VAL:HA	1:A:58:GLU:HG2	3	0.24
(2,1523)	1:A:135:VAL:HA	1:A:107:PRO:HG3	3	0.24
(2,1523)	1:A:110:VAL:HA	1:A:107:PRO:HG3	3	0.24
(2,1500)	1:A:133:SER:HB3	1:A:105:GLU:HG3	8	0.24
(2,1500)	1:A:128:VAL:HB	1:A:70:SER:HB2	8	0.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1500)	1:A:66:GLU:HB2	1:A:70:SER:HB2	8	0.24
(2,1500)	1:A:128:VAL:HB	1:A:70:SER:HB3	8	0.24
(2,1500)	1:A:66:GLU:HB2	1:A:70:SER:HB3	8	0.24
(2,1500)	1:A:70:SER:HB3	1:A:71:LYS:HB3	8	0.24
(2,1450)	1:A:122:ILE:HG22	1:A:70:SER:HB2	2	0.24
(2,1450)	1:A:122:ILE:HG21	1:A:70:SER:HB2	2	0.24
(2,1450)	1:A:122:ILE:HG23	1:A:70:SER:HB2	2	0.24
(2,1450)	1:A:122:ILE:HG22	1:A:119:LEU:HA	2	0.24
(2,1450)	1:A:122:ILE:HG21	1:A:119:LEU:HA	2	0.24
(2,1450)	1:A:122:ILE:HG23	1:A:119:LEU:HA	2	0.24
(2,1425)	1:A:138:ALA:HB2	1:A:61:ARG:HG3	8	0.24
(2,1425)	1:A:138:ALA:HB1	1:A:61:ARG:HG3	8	0.24
(2,1425)	1:A:138:ALA:HB3	1:A:61:ARG:HG3	8	0.24
(2,1425)	1:A:138:ALA:HB2	1:A:106:LEU:HB2	8	0.24
(2,1425)	1:A:138:ALA:HB2	1:A:106:LEU:HB3	8	0.24
(2,1425)	1:A:138:ALA:HB1	1:A:106:LEU:HB2	8	0.24
(2,1425)	1:A:138:ALA:HB1	1:A:106:LEU:HB3	8	0.24
(2,1425)	1:A:138:ALA:HB3	1:A:106:LEU:HB2	8	0.24
(2,1425)	1:A:138:ALA:HB3	1:A:106:LEU:HB3	8	0.24
(2,1425)	1:A:138:ALA:HB2	1:A:108:LYS:HG3	8	0.24
(2,1425)	1:A:138:ALA:HB1	1:A:108:LYS:HG3	8	0.24
(2,1425)	1:A:138:ALA:HB3	1:A:108:LYS:HG3	8	0.24
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:130:GLY:HA2	7	0.24
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:130:GLY:HA2	7	0.24
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:130:GLY:HA2	7	0.24
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:130:GLY:HA2	7	0.24
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:130:GLY:HA2	7	0.24
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:130:GLY:HA2	7	0.24
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:126:GLY:HA2	7	0.24
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:126:GLY:HA2	7	0.24
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:126:GLY:HA2	7	0.24
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:126:GLY:HA2	7	0.24
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:126:GLY:HA2	7	0.24
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:126:GLY:HA2	7	0.24
(2,1388)	1:A:109:THR:HG21	1:A:108:LYS:HE3	1	0.24
(2,1388)	1:A:109:THR:HG22	1:A:108:LYS:HE3	1	0.24
(2,1388)	1:A:109:THR:HG23	1:A:108:LYS:HE3	1	0.24
(2,1388)	1:A:84:THR:HG21	1:A:85:ARG:HD2	1	0.24
(2,1388)	1:A:84:THR:HG22	1:A:85:ARG:HD2	1	0.24
(2,1388)	1:A:84:THR:HG23	1:A:85:ARG:HD2	1	0.24
(2,1332)	1:A:137:LEU:HD12	1:A:133:SER:HB3	4	0.24
(2,1332)	1:A:137:LEU:HD11	1:A:133:SER:HB3	4	0.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1332)	1:A:137:LEU:HD13	1:A:133:SER:HB3	4	0.24
(2,1332)	1:A:119:LEU:HD12	1:A:119:LEU:HA	4	0.24
(2,1332)	1:A:119:LEU:HD11	1:A:119:LEU:HA	4	0.24
(2,1332)	1:A:119:LEU:HD13	1:A:119:LEU:HA	4	0.24
(2,1302)	1:A:62:LEU:HG	1:A:103:MET:HG2	1	0.24
(2,1302)	1:A:62:LEU:HG	1:A:122:ILE:HG13	1	0.24
(2,1302)	1:A:106:LEU:HG	1:A:58:GLU:HG2	1	0.24
(2,1302)	1:A:106:LEU:HG	1:A:58:GLU:HG3	1	0.24
(2,1302)	1:A:118:LEU:HG	1:A:122:ILE:HG13	1	0.24
(2,1144)	1:A:126:GLY:H	1:A:127:GLY:HA2	2	0.24
(2,1062)	1:A:120:HIS:H	1:A:119:LEU:HB3	3	0.24
(2,106)	1:A:103:MET:HG2	1:A:94:SER:HB2	8	0.24
(2,946)	1:A:58:GLU:H	1:A:58:GLU:HB2	1	0.23
(2,946)	1:A:58:GLU:H	1:A:58:GLU:HB2	1	0.23
(2,946)	1:A:58:GLU:H	1:A:58:GLU:HB2	1	0.23
(2,946)	1:A:58:GLU:H	1:A:58:GLU:HB2	6	0.23
(2,946)	1:A:58:GLU:H	1:A:58:GLU:HB2	6	0.23
(2,946)	1:A:58:GLU:H	1:A:58:GLU:HB2	6	0.23
(2,946)	1:A:58:GLU:H	1:A:58:GLU:HB2	7	0.23
(2,946)	1:A:58:GLU:H	1:A:58:GLU:HB2	7	0.23
(2,946)	1:A:58:GLU:H	1:A:58:GLU:HB2	7	0.23
(2,946)	1:A:58:GLU:H	1:A:58:GLU:HB2	10	0.23
(2,946)	1:A:58:GLU:H	1:A:58:GLU:HB2	10	0.23
(2,946)	1:A:58:GLU:H	1:A:58:GLU:HB2	10	0.23
(2,940)	1:A:108:LYS:H	1:A:108:LYS:HD3	1	0.23
(2,871)	1:A:87:GLU:H	1:A:92:SER:HB2	3	0.23
(2,871)	1:A:87:GLU:H	1:A:92:SER:HB3	3	0.23
(2,72)	1:A:59:MET:HG3	1:A:136:LYS:HB3	5	0.23
(2,72)	1:A:59:MET:HG3	1:A:136:LYS:HB3	7	0.23
(2,649)	1:A:70:SER:HB2	1:A:126:GLY:HA3	8	0.23
(2,219)	1:A:75:LYS:HG3	1:A:75:LYS:HA	6	0.23
(2,211)	1:A:78:LYS:HG3	1:A:78:LYS:HE2	9	0.23
(2,200)	1:A:118:LEU:HD12	1:A:86:ILE:HA	10	0.23
(2,200)	1:A:118:LEU:HD11	1:A:86:ILE:HA	10	0.23
(2,200)	1:A:118:LEU:HD13	1:A:86:ILE:HA	10	0.23
(2,1846)	1:A:106:LEU:H	1:A:105:GLU:HB2	3	0.23
(2,1846)	1:A:106:LEU:H	1:A:105:GLU:HG3	3	0.23
(2,1759)	1:A:82:PHE:HB3	1:A:76:MET:HG2	4	0.23
(2,1759)	1:A:82:PHE:HB3	1:A:85:ARG:HG3	4	0.23
(2,1721)	1:A:85:ARG:HD2	1:A:84:THR:HA	2	0.23
(2,1721)	1:A:85:ARG:HA	1:A:85:ARG:HD2	2	0.23
(2,1540)	1:A:135:VAL:HA	1:A:109:THR:H	4	0.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1540)	1:A:135:VAL:HA	1:A:110:VAL:H	4	0.23
(2,1504)	1:A:133:SER:HB3	1:A:62:LEU:HD22	1	0.23
(2,1504)	1:A:133:SER:HB3	1:A:62:LEU:HD21	1	0.23
(2,1504)	1:A:133:SER:HB3	1:A:62:LEU:HD23	1	0.23
(2,1504)	1:A:70:SER:HB2	1:A:64:VAL:HG22	1	0.23
(2,1504)	1:A:70:SER:HB2	1:A:64:VAL:HG21	1	0.23
(2,1504)	1:A:70:SER:HB2	1:A:64:VAL:HG23	1	0.23
(2,1504)	1:A:70:SER:HB3	1:A:64:VAL:HG22	1	0.23
(2,1504)	1:A:70:SER:HB3	1:A:64:VAL:HG21	1	0.23
(2,1504)	1:A:70:SER:HB3	1:A:64:VAL:HG23	1	0.23
(2,1504)	1:A:133:SER:HB3	1:A:62:LEU:HD22	5	0.23
(2,1504)	1:A:133:SER:HB3	1:A:62:LEU:HD21	5	0.23
(2,1504)	1:A:133:SER:HB3	1:A:62:LEU:HD23	5	0.23
(2,1504)	1:A:70:SER:HB2	1:A:64:VAL:HG22	5	0.23
(2,1504)	1:A:70:SER:HB2	1:A:64:VAL:HG21	5	0.23
(2,1504)	1:A:70:SER:HB2	1:A:64:VAL:HG23	5	0.23
(2,1504)	1:A:70:SER:HB3	1:A:64:VAL:HG22	5	0.23
(2,1504)	1:A:70:SER:HB3	1:A:64:VAL:HG21	5	0.23
(2,1504)	1:A:70:SER:HB3	1:A:64:VAL:HG23	5	0.23
(2,1504)	1:A:133:SER:HB3	1:A:62:LEU:HD22	9	0.23
(2,1504)	1:A:133:SER:HB3	1:A:62:LEU:HD21	9	0.23
(2,1504)	1:A:133:SER:HB3	1:A:62:LEU:HD23	9	0.23
(2,1504)	1:A:70:SER:HB2	1:A:64:VAL:HG22	9	0.23
(2,1504)	1:A:70:SER:HB2	1:A:64:VAL:HG21	9	0.23
(2,1504)	1:A:70:SER:HB2	1:A:64:VAL:HG23	9	0.23
(2,1504)	1:A:70:SER:HB3	1:A:64:VAL:HG22	9	0.23
(2,1504)	1:A:70:SER:HB3	1:A:64:VAL:HG21	9	0.23
(2,1504)	1:A:70:SER:HB3	1:A:64:VAL:HG23	9	0.23
(2,1426)	1:A:124:ALA:HB2	1:A:117:GLN:HB2	10	0.23
(2,1426)	1:A:124:ALA:HB2	1:A:117:GLN:HB3	10	0.23
(2,1426)	1:A:124:ALA:HB1	1:A:117:GLN:HB2	10	0.23
(2,1426)	1:A:124:ALA:HB1	1:A:117:GLN:HB3	10	0.23
(2,1426)	1:A:124:ALA:HB3	1:A:117:GLN:HB2	10	0.23
(2,1426)	1:A:124:ALA:HB3	1:A:117:GLN:HB3	10	0.23
(2,1426)	1:A:124:ALA:HB2	1:A:118:LEU:HB3	10	0.23
(2,1426)	1:A:124:ALA:HB1	1:A:118:LEU:HB3	10	0.23
(2,1426)	1:A:124:ALA:HB3	1:A:118:LEU:HB3	10	0.23
(2,1302)	1:A:62:LEU:HG	1:A:103:MET:HG2	4	0.23
(2,1302)	1:A:62:LEU:HG	1:A:122:ILE:HG13	4	0.23
(2,1302)	1:A:106:LEU:HG	1:A:58:GLU:HG2	4	0.23
(2,1302)	1:A:106:LEU:HG	1:A:58:GLU:HG3	4	0.23
(2,1302)	1:A:118:LEU:HG	1:A:122:ILE:HG13	4	0.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1149)	1:A:58:GLU:H	1:A:58:GLU:HG2	3	0.23
(2,1149)	1:A:58:GLU:H	1:A:58:GLU:HG2	3	0.23
(2,1149)	1:A:58:GLU:H	1:A:58:GLU:HG2	3	0.23
(1,46)	1:A:108:LYS:HE3	1:A:59:MET:HA	4	0.23
(1,46)	1:A:108:LYS:HE3	1:A:59:MET:HA	5	0.23
(1,41)	1:A:105:GLU:HA	1:A:132:ASP:HB2	4	0.23
(2,946)	1:A:58:GLU:H	1:A:58:GLU:HB2	5	0.22
(2,946)	1:A:58:GLU:H	1:A:58:GLU:HB2	5	0.22
(2,946)	1:A:58:GLU:H	1:A:58:GLU:HB2	5	0.22
(2,943)	1:A:58:GLU:H	1:A:59:MET:H	5	0.22
(2,943)	1:A:58:GLU:H	1:A:59:MET:H	5	0.22
(2,943)	1:A:58:GLU:H	1:A:59:MET:H	5	0.22
(2,871)	1:A:87:GLU:H	1:A:92:SER:HB2	5	0.22
(2,871)	1:A:87:GLU:H	1:A:92:SER:HB3	5	0.22
(2,604)	1:A:131:LEU:HD22	1:A:131:LEU:HA	6	0.22
(2,604)	1:A:131:LEU:HD21	1:A:131:LEU:HA	6	0.22
(2,604)	1:A:131:LEU:HD23	1:A:131:LEU:HA	6	0.22
(2,538)	1:A:120:HIS:HB2	1:A:117:GLN:HA	7	0.22
(2,240)	1:A:110:VAL:HG12	1:A:89:LEU:HB2	1	0.22
(2,240)	1:A:110:VAL:HG11	1:A:89:LEU:HB2	1	0.22
(2,240)	1:A:110:VAL:HG13	1:A:89:LEU:HB2	1	0.22
(2,240)	1:A:110:VAL:HG12	1:A:89:LEU:HB2	3	0.22
(2,240)	1:A:110:VAL:HG11	1:A:89:LEU:HB2	3	0.22
(2,240)	1:A:110:VAL:HG13	1:A:89:LEU:HB2	3	0.22
(2,240)	1:A:110:VAL:HG12	1:A:89:LEU:HB2	8	0.22
(2,240)	1:A:110:VAL:HG11	1:A:89:LEU:HB2	8	0.22
(2,240)	1:A:110:VAL:HG13	1:A:89:LEU:HB2	8	0.22
(2,186)	1:A:96:LEU:HG	1:A:103:MET:HG2	9	0.22
(2,1759)	1:A:82:PHE:HB3	1:A:76:MET:HG2	1	0.22
(2,1759)	1:A:82:PHE:HB3	1:A:85:ARG:HG3	1	0.22
(2,1721)	1:A:85:ARG:HD2	1:A:84:THR:HA	6	0.22
(2,1721)	1:A:85:ARG:HA	1:A:85:ARG:HD2	6	0.22
(2,1540)	1:A:135:VAL:HA	1:A:109:THR:H	7	0.22
(2,1540)	1:A:135:VAL:HA	1:A:110:VAL:H	7	0.22
(2,1500)	1:A:133:SER:HB3	1:A:105:GLU:HG3	10	0.22
(2,1500)	1:A:128:VAL:HB	1:A:70:SER:HB2	10	0.22
(2,1500)	1:A:66:GLU:HB2	1:A:70:SER:HB2	10	0.22
(2,1500)	1:A:128:VAL:HB	1:A:70:SER:HB3	10	0.22
(2,1500)	1:A:66:GLU:HB2	1:A:70:SER:HB3	10	0.22
(2,1500)	1:A:70:SER:HB3	1:A:71:LYS:HB3	10	0.22
(2,1462)	1:A:122:ILE:HD12	1:A:118:LEU:HB3	2	0.22
(2,1462)	1:A:122:ILE:HD11	1:A:118:LEU:HB3	2	0.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1462)	1:A:122:ILE:HD13	1:A:118:LEU:HB3	2	0.22
(2,1462)	1:A:122:ILE:HD12	1:A:103:MET:HB3	2	0.22
(2,1462)	1:A:122:ILE:HD11	1:A:103:MET:HB3	2	0.22
(2,1462)	1:A:122:ILE:HD13	1:A:103:MET:HB3	2	0.22
(2,1462)	1:A:122:ILE:HD12	1:A:118:LEU:HB3	6	0.22
(2,1462)	1:A:122:ILE:HD11	1:A:118:LEU:HB3	6	0.22
(2,1462)	1:A:122:ILE:HD13	1:A:118:LEU:HB3	6	0.22
(2,1462)	1:A:122:ILE:HD12	1:A:103:MET:HB3	6	0.22
(2,1462)	1:A:122:ILE:HD11	1:A:103:MET:HB3	6	0.22
(2,1462)	1:A:122:ILE:HD13	1:A:103:MET:HB3	6	0.22
(2,1420)	1:A:64:VAL:HG22	1:A:62:LEU:HG	1	0.22
(2,1420)	1:A:64:VAL:HG21	1:A:62:LEU:HG	1	0.22
(2,1420)	1:A:64:VAL:HG23	1:A:62:LEU:HG	1	0.22
(2,1420)	1:A:93:ILE:HG13	1:A:64:VAL:HG22	1	0.22
(2,1420)	1:A:93:ILE:HG13	1:A:64:VAL:HG21	1	0.22
(2,1420)	1:A:93:ILE:HG13	1:A:64:VAL:HG23	1	0.22
(2,1420)	1:A:64:VAL:HG22	1:A:119:LEU:HB2	1	0.22
(2,1420)	1:A:64:VAL:HG21	1:A:119:LEU:HB2	1	0.22
(2,1420)	1:A:64:VAL:HG23	1:A:119:LEU:HB2	1	0.22
(2,1386)	1:A:109:THR:HG21	1:A:58:GLU:HG2	1	0.22
(2,1386)	1:A:109:THR:HG22	1:A:58:GLU:HG2	1	0.22
(2,1386)	1:A:109:THR:HG23	1:A:58:GLU:HG2	1	0.22
(2,1386)	1:A:84:THR:HG21	1:A:87:GLU:HB3	1	0.22
(2,1386)	1:A:84:THR:HG22	1:A:87:GLU:HB3	1	0.22
(2,1386)	1:A:84:THR:HG23	1:A:87:GLU:HB3	1	0.22
(2,1386)	1:A:84:THR:HG21	1:A:88:GLU:HB3	1	0.22
(2,1386)	1:A:84:THR:HG22	1:A:88:GLU:HB3	1	0.22
(2,1386)	1:A:84:THR:HG23	1:A:88:GLU:HB3	1	0.22
(2,1324)	1:A:107:PRO:HB3	1:A:108:LYS:HG3	6	0.22
(2,1324)	1:A:115:MET:HG3	1:A:108:LYS:HG3	6	0.22
(2,1256)	1:A:75:LYS:HD3	1:A:78:LYS:HE3	4	0.22
(2,1256)	1:A:136:LYS:HD2	1:A:59:MET:HG3	4	0.22
(2,1157)	1:A:96:LEU:HB2	1:A:96:LEU:HD22	7	0.22
(2,1157)	1:A:96:LEU:HB2	1:A:96:LEU:HD21	7	0.22
(2,1157)	1:A:96:LEU:HB2	1:A:96:LEU:HD23	7	0.22
(2,1157)	1:A:96:LEU:HB2	1:A:101:VAL:HG22	7	0.22
(2,1157)	1:A:96:LEU:HB2	1:A:101:VAL:HG21	7	0.22
(2,1157)	1:A:96:LEU:HB2	1:A:101:VAL:HG23	7	0.22
(2,1157)	1:A:96:LEU:HB2	1:A:101:VAL:HG12	7	0.22
(2,1157)	1:A:96:LEU:HB2	1:A:101:VAL:HG11	7	0.22
(2,1157)	1:A:96:LEU:HB2	1:A:101:VAL:HG13	7	0.22
(2,1144)	1:A:126:GLY:H	1:A:127:GLY:HA2	1	0.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1144)	1:A:126:GLY:H	1:A:127:GLY:HA2	9	0.22
(2,1042)	1:A:89:LEU:H	1:A:88:GLU:HB3	10	0.22
(1,3)	1:A:122:ILE:HB	1:A:62:LEU:HB2	8	0.22
(2,946)	1:A:58:GLU:H	1:A:58:GLU:HB2	2	0.21
(2,946)	1:A:58:GLU:H	1:A:58:GLU:HB2	2	0.21
(2,946)	1:A:58:GLU:H	1:A:58:GLU:HB2	2	0.21
(2,871)	1:A:87:GLU:H	1:A:92:SER:HB2	6	0.21
(2,871)	1:A:87:GLU:H	1:A:92:SER:HB3	6	0.21
(2,871)	1:A:87:GLU:H	1:A:92:SER:HB2	8	0.21
(2,871)	1:A:87:GLU:H	1:A:92:SER:HB3	8	0.21
(2,871)	1:A:87:GLU:H	1:A:92:SER:HB2	9	0.21
(2,871)	1:A:87:GLU:H	1:A:92:SER:HB3	9	0.21
(2,807)	1:A:67:LYS:H	1:A:71:LYS:HG3	5	0.21
(2,688)	1:A:108:LYS:HD3	1:A:108:LYS:HE3	7	0.21
(2,649)	1:A:70:SER:HB2	1:A:126:GLY:HA3	6	0.21
(2,64)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:135:VAL:HG22	8	0.21
(2,64)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:135:VAL:HG21	8	0.21
(2,64)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:135:VAL:HG23	8	0.21
(2,64)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:135:VAL:HG12	8	0.21
(2,64)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:135:VAL:HG11	8	0.21
(2,64)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:135:VAL:HG13	8	0.21
(2,64)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:135:VAL:HG22	9	0.21
(2,64)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:135:VAL:HG21	9	0.21
(2,64)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:135:VAL:HG23	9	0.21
(2,64)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:135:VAL:HG12	9	0.21
(2,64)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:135:VAL:HG11	9	0.21
(2,64)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:135:VAL:HG13	9	0.21
(2,387)	1:A:86:ILE:HD12	1:A:85:ARG:HD2	9	0.21
(2,387)	1:A:86:ILE:HD11	1:A:85:ARG:HD2	9	0.21
(2,387)	1:A:86:ILE:HD13	1:A:85:ARG:HD2	9	0.21
(2,296)	1:A:101:VAL:HG22	1:A:94:SER:HB2	1	0.21
(2,296)	1:A:101:VAL:HG21	1:A:94:SER:HB2	1	0.21
(2,296)	1:A:101:VAL:HG23	1:A:94:SER:HB2	1	0.21
(2,296)	1:A:101:VAL:HG12	1:A:94:SER:HB2	1	0.21
(2,296)	1:A:101:VAL:HG11	1:A:94:SER:HB2	1	0.21
(2,296)	1:A:101:VAL:HG13	1:A:94:SER:HB2	1	0.21
(2,296)	1:A:101:VAL:HG22	1:A:94:SER:HB2	2	0.21
(2,296)	1:A:101:VAL:HG21	1:A:94:SER:HB2	2	0.21
(2,296)	1:A:101:VAL:HG23	1:A:94:SER:HB2	2	0.21
(2,296)	1:A:101:VAL:HG12	1:A:94:SER:HB2	2	0.21
(2,296)	1:A:101:VAL:HG11	1:A:94:SER:HB2	2	0.21
(2,296)	1:A:101:VAL:HG13	1:A:94:SER:HB2	2	0.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,296)	1:A:101:VAL:HG22	1:A:94:SER:HB2	4	0.21
(2,296)	1:A:101:VAL:HG21	1:A:94:SER:HB2	4	0.21
(2,296)	1:A:101:VAL:HG23	1:A:94:SER:HB2	4	0.21
(2,296)	1:A:101:VAL:HG12	1:A:94:SER:HB2	4	0.21
(2,296)	1:A:101:VAL:HG11	1:A:94:SER:HB2	4	0.21
(2,296)	1:A:101:VAL:HG13	1:A:94:SER:HB2	4	0.21
(2,288)	1:A:110:VAL:HG22	1:A:113:HIS:HB2	3	0.21
(2,288)	1:A:110:VAL:HG21	1:A:113:HIS:HB2	3	0.21
(2,288)	1:A:110:VAL:HG23	1:A:113:HIS:HB2	3	0.21
(2,28)	1:A:87:GLU:HG2	1:A:87:GLU:HB3	1	0.21
(2,275)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:102:THR:HB	4	0.21
(2,275)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:102:THR:HB	4	0.21
(2,275)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:102:THR:HB	4	0.21
(2,275)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:102:THR:HB	10	0.21
(2,275)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:102:THR:HB	10	0.21
(2,275)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:102:THR:HB	10	0.21
(2,1935)	1:A:78:LYS:H	1:A:75:LYS:HB2	6	0.21
(2,1935)	1:A:78:LYS:H	1:A:78:LYS:HB3	6	0.21
(2,1933)	1:A:92:SER:H	1:A:93:ILE:HD12	10	0.21
(2,1933)	1:A:92:SER:H	1:A:93:ILE:HD11	10	0.21
(2,1933)	1:A:92:SER:H	1:A:93:ILE:HD13	10	0.21
(2,1933)	1:A:92:SER:H	1:A:104:ILE:HD12	10	0.21
(2,1933)	1:A:92:SER:H	1:A:104:ILE:HD11	10	0.21
(2,1933)	1:A:92:SER:H	1:A:104:ILE:HD13	10	0.21
(2,1933)	1:A:92:SER:H	1:A:104:ILE:HG12	10	0.21
(2,1810)	1:A:136:LYS:H	1:A:136:LYS:HD2	10	0.21
(2,1810)	1:A:136:LYS:H	1:A:136:LYS:HD3	10	0.21
(2,1759)	1:A:82:PHE:HB3	1:A:76:MET:HG2	7	0.21
(2,1759)	1:A:82:PHE:HB3	1:A:85:ARG:HG3	7	0.21
(2,1741)	1:A:136:LYS:HE2	1:A:136:LYS:HA	1	0.21
(2,1741)	1:A:67:LYS:HE2	1:A:70:SER:HA	1	0.21
(2,1741)	1:A:71:LYS:HE2	1:A:72:ASN:HA	1	0.21
(2,1741)	1:A:75:LYS:HE2	1:A:79:SER:HA	1	0.21
(2,1741)	1:A:136:LYS:HE2	1:A:136:LYS:HA	2	0.21
(2,1741)	1:A:67:LYS:HE2	1:A:70:SER:HA	2	0.21
(2,1741)	1:A:71:LYS:HE2	1:A:72:ASN:HA	2	0.21
(2,1741)	1:A:75:LYS:HE2	1:A:79:SER:HA	2	0.21
(2,1617)	1:A:79:SER:HA	1:A:75:LYS:HB2	4	0.21
(2,1617)	1:A:79:SER:HA	1:A:75:LYS:HB3	4	0.21
(2,1617)	1:A:79:SER:HA	1:A:78:LYS:HB3	4	0.21
(2,1617)	1:A:121:ASP:HA	1:A:123:LEU:HB3	4	0.21
(2,1617)	1:A:70:SER:HA	1:A:71:LYS:HD3	4	0.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1572)	1:A:82:PHE:HE1	1:A:77:ALA:HA	6	0.21
(2,1572)	1:A:82:PHE:HE2	1:A:77:ALA:HA	6	0.21
(2,1572)	1:A:82:PHE:HE1	1:A:122:ILE:HA	6	0.21
(2,1572)	1:A:82:PHE:HE2	1:A:122:ILE:HA	6	0.21
(2,1540)	1:A:135:VAL:HA	1:A:109:THR:H	3	0.21
(2,1540)	1:A:135:VAL:HA	1:A:110:VAL:H	3	0.21
(2,1532)	1:A:88:GLU:HB3	1:A:81:SER:HA	9	0.21
(2,1532)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:83:SER:HA	9	0.21
(2,1455)	1:A:93:ILE:HD12	1:A:78:LYS:HD3	9	0.21
(2,1455)	1:A:93:ILE:HD11	1:A:78:LYS:HD3	9	0.21
(2,1455)	1:A:93:ILE:HD13	1:A:78:LYS:HD3	9	0.21
(2,1455)	1:A:93:ILE:HD12	1:A:85:ARG:HG2	9	0.21
(2,1455)	1:A:93:ILE:HD11	1:A:85:ARG:HG2	9	0.21
(2,1455)	1:A:93:ILE:HD13	1:A:85:ARG:HG2	9	0.21
(2,1388)	1:A:109:THR:HG21	1:A:108:LYS:HE3	7	0.21
(2,1388)	1:A:109:THR:HG22	1:A:108:LYS:HE3	7	0.21
(2,1388)	1:A:109:THR:HG23	1:A:108:LYS:HE3	7	0.21
(2,1388)	1:A:84:THR:HG21	1:A:85:ARG:HD2	7	0.21
(2,1388)	1:A:84:THR:HG22	1:A:85:ARG:HD2	7	0.21
(2,1388)	1:A:84:THR:HG23	1:A:85:ARG:HD2	7	0.21
(2,1388)	1:A:109:THR:HG21	1:A:108:LYS:HE3	9	0.21
(2,1388)	1:A:109:THR:HG22	1:A:108:LYS:HE3	9	0.21
(2,1388)	1:A:109:THR:HG23	1:A:108:LYS:HE3	9	0.21
(2,1388)	1:A:84:THR:HG21	1:A:85:ARG:HD2	9	0.21
(2,1388)	1:A:84:THR:HG22	1:A:85:ARG:HD2	9	0.21
(2,1388)	1:A:84:THR:HG23	1:A:85:ARG:HD2	9	0.21
(2,1380)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:128:VAL:HG22	4	0.21
(2,1380)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:128:VAL:HG21	4	0.21
(2,1380)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:128:VAL:HG23	4	0.21
(2,1380)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:128:VAL:HG12	4	0.21
(2,1380)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:128:VAL:HG11	4	0.21
(2,1380)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:128:VAL:HG13	4	0.21
(2,1380)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:128:VAL:HG22	4	0.21
(2,1380)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:128:VAL:HG21	4	0.21
(2,1380)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:128:VAL:HG23	4	0.21
(2,1380)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:128:VAL:HG12	4	0.21
(2,1380)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:128:VAL:HG11	4	0.21
(2,1380)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:128:VAL:HG13	4	0.21
(2,1380)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:128:VAL:HG22	4	0.21
(2,1380)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:128:VAL:HG21	4	0.21
(2,1380)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:128:VAL:HG23	4	0.21
(2,1380)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:128:VAL:HG12	4	0.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1380)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:128:VAL:HG11	4	0.21
(2,1380)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:128:VAL:HG13	4	0.21
(2,1380)	1:A:129:VAL:HG12	1:A:64:VAL:HG12	4	0.21
(2,1380)	1:A:129:VAL:HG12	1:A:64:VAL:HG11	4	0.21
(2,1380)	1:A:129:VAL:HG12	1:A:64:VAL:HG13	4	0.21
(2,1380)	1:A:129:VAL:HG11	1:A:64:VAL:HG12	4	0.21
(2,1380)	1:A:129:VAL:HG11	1:A:64:VAL:HG11	4	0.21
(2,1380)	1:A:129:VAL:HG11	1:A:64:VAL:HG13	4	0.21
(2,1380)	1:A:129:VAL:HG13	1:A:64:VAL:HG12	4	0.21
(2,1380)	1:A:129:VAL:HG13	1:A:64:VAL:HG11	4	0.21
(2,1380)	1:A:129:VAL:HG13	1:A:64:VAL:HG13	4	0.21
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:123:LEU:HA	6	0.21
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:123:LEU:HA	6	0.21
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:123:LEU:HA	6	0.21
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:129:VAL:HA	6	0.21
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:129:VAL:HA	6	0.21
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:129:VAL:HA	6	0.21
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:101:VAL:HA	6	0.21
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:101:VAL:HA	6	0.21
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:101:VAL:HA	6	0.21
(2,1345)	1:A:107:PRO:HB3	1:A:110:VAL:HG12	10	0.21
(2,1345)	1:A:107:PRO:HB3	1:A:110:VAL:HG11	10	0.21
(2,1345)	1:A:107:PRO:HB3	1:A:110:VAL:HG13	10	0.21
(2,1345)	1:A:110:VAL:HG12	1:A:114:ASP:HB2	10	0.21
(2,1345)	1:A:110:VAL:HG11	1:A:114:ASP:HB2	10	0.21
(2,1345)	1:A:110:VAL:HG13	1:A:114:ASP:HB2	10	0.21
(2,1288)	1:A:137:LEU:HG	1:A:131:LEU:HA	9	0.21
(2,1288)	1:A:137:LEU:HG	1:A:132:ASP:HA	9	0.21
(2,1269)	1:A:78:LYS:HD2	1:A:75:LYS:HE2	5	0.21
(2,1269)	1:A:78:LYS:HD2	1:A:75:LYS:HE3	5	0.21
(2,1269)	1:A:78:LYS:HD2	1:A:75:LYS:H	5	0.21
(2,1269)	1:A:78:LYS:HD3	1:A:75:LYS:HE3	5	0.21
(2,1238)	1:A:134:GLU:HB3	1:A:131:LEU:HA	9	0.21
(2,1238)	1:A:134:GLU:HB3	1:A:132:ASP:HA	9	0.21
(2,1190)	1:A:59:MET:HG2	1:A:133:SER:HB2	1	0.21
(2,1190)	1:A:63:MET:HB2	1:A:130:GLY:HA2	1	0.21
(2,1190)	1:A:107:PRO:HB3	1:A:90:GLY:HA2	1	0.21
(2,1144)	1:A:126:GLY:H	1:A:127:GLY:HA2	8	0.21
(2,1062)	1:A:120:HIS:H	1:A:119:LEU:HB3	5	0.21
(1,47)	1:A:103:MET:H	1:A:95:PHE:HB3	3	0.21
(1,43)	1:A:132:ASP:HA	1:A:103:MET:HG2	9	0.21
(1,3)	1:A:122:ILE:HB	1:A:62:LEU:HB2	3	0.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,3)	1:A:122:ILE:HB	1:A:62:LEU:HB2	4	0.21
(2,871)	1:A:87:GLU:H	1:A:92:SER:HB2	7	0.2
(2,871)	1:A:87:GLU:H	1:A:92:SER:HB3	7	0.2
(2,871)	1:A:87:GLU:H	1:A:92:SER:HB2	10	0.2
(2,871)	1:A:87:GLU:H	1:A:92:SER:HB3	10	0.2
(2,72)	1:A:59:MET:HG3	1:A:136:LYS:HB3	9	0.2
(2,659)	1:A:90:GLY:HA2	1:A:89:LEU:HA	5	0.2
(2,649)	1:A:70:SER:HB2	1:A:126:GLY:HA3	4	0.2
(2,604)	1:A:131:LEU:HD22	1:A:131:LEU:HA	8	0.2
(2,604)	1:A:131:LEU:HD21	1:A:131:LEU:HA	8	0.2
(2,604)	1:A:131:LEU:HD23	1:A:131:LEU:HA	8	0.2
(2,288)	1:A:110:VAL:HG22	1:A:113:HIS:HB2	6	0.2
(2,288)	1:A:110:VAL:HG21	1:A:113:HIS:HB2	6	0.2
(2,288)	1:A:110:VAL:HG23	1:A:113:HIS:HB2	6	0.2
(2,275)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:102:THR:HB	1	0.2
(2,275)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:102:THR:HB	1	0.2
(2,275)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:102:THR:HB	1	0.2
(2,219)	1:A:75:LYS:HG3	1:A:75:LYS:HA	3	0.2
(2,1810)	1:A:136:LYS:H	1:A:136:LYS:HD2	4	0.2
(2,1810)	1:A:136:LYS:H	1:A:136:LYS:HD3	4	0.2
(2,1634)	1:A:123:LEU:HA	1:A:73:PHE:HD1	2	0.2
(2,1634)	1:A:123:LEU:HA	1:A:73:PHE:HD2	2	0.2
(2,1634)	1:A:123:LEU:HA	1:A:73:PHE:HE1	2	0.2
(2,1634)	1:A:123:LEU:HA	1:A:73:PHE:HE2	2	0.2
(2,1504)	1:A:133:SER:HB3	1:A:62:LEU:HD22	8	0.2
(2,1504)	1:A:133:SER:HB3	1:A:62:LEU:HD21	8	0.2
(2,1504)	1:A:133:SER:HB3	1:A:62:LEU:HD23	8	0.2
(2,1504)	1:A:70:SER:HB2	1:A:64:VAL:HG22	8	0.2
(2,1504)	1:A:70:SER:HB2	1:A:64:VAL:HG21	8	0.2
(2,1504)	1:A:70:SER:HB2	1:A:64:VAL:HG23	8	0.2
(2,1504)	1:A:70:SER:HB3	1:A:64:VAL:HG22	8	0.2
(2,1504)	1:A:70:SER:HB3	1:A:64:VAL:HG21	8	0.2
(2,1504)	1:A:70:SER:HB3	1:A:64:VAL:HG23	8	0.2
(2,1462)	1:A:122:ILE:HD12	1:A:118:LEU:HB3	8	0.2
(2,1462)	1:A:122:ILE:HD11	1:A:118:LEU:HB3	8	0.2
(2,1462)	1:A:122:ILE:HD13	1:A:118:LEU:HB3	8	0.2
(2,1462)	1:A:122:ILE:HD12	1:A:103:MET:HB3	8	0.2
(2,1462)	1:A:122:ILE:HD11	1:A:103:MET:HB3	8	0.2
(2,1462)	1:A:122:ILE:HD13	1:A:103:MET:HB3	8	0.2
(2,1450)	1:A:122:ILE:HG22	1:A:70:SER:HB2	10	0.2
(2,1450)	1:A:122:ILE:HG21	1:A:70:SER:HB2	10	0.2
(2,1450)	1:A:122:ILE:HG23	1:A:70:SER:HB2	10	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1450)	1:A:122:ILE:HG22	1:A:119:LEU:HA	10	0.2
(2,1450)	1:A:122:ILE:HG21	1:A:119:LEU:HA	10	0.2
(2,1450)	1:A:122:ILE:HG23	1:A:119:LEU:HA	10	0.2
(2,1288)	1:A:137:LEU:HG	1:A:131:LEU:HA	1	0.2
(2,1288)	1:A:137:LEU:HG	1:A:132:ASP:HA	1	0.2
(2,1186)	1:A:129:VAL:HB	1:A:63:MET:HG2	4	0.2
(2,1186)	1:A:105:GLU:HB3	1:A:59:MET:HG3	4	0.2
(2,1149)	1:A:58:GLU:H	1:A:58:GLU:HG2	2	0.2
(2,1149)	1:A:58:GLU:H	1:A:58:GLU:HG2	2	0.2
(2,1149)	1:A:58:GLU:H	1:A:58:GLU:HG2	2	0.2
(1,3)	1:A:122:ILE:HB	1:A:62:LEU:HB2	6	0.2
(2,946)	1:A:58:GLU:H	1:A:58:GLU:HB2	3	0.19
(2,946)	1:A:58:GLU:H	1:A:58:GLU:HB2	3	0.19
(2,946)	1:A:58:GLU:H	1:A:58:GLU:HB2	3	0.19
(2,918)	1:A:71:LYS:H	1:A:67:LYS:HA	3	0.19
(2,871)	1:A:87:GLU:H	1:A:92:SER:HB2	1	0.19
(2,871)	1:A:87:GLU:H	1:A:92:SER:HB3	1	0.19
(2,642)	1:A:113:HIS:HB2	1:A:113:HIS:HD2	3	0.19
(2,62)	1:A:107:PRO:HB3	1:A:109:THR:HG21	8	0.19
(2,62)	1:A:107:PRO:HB3	1:A:109:THR:HG22	8	0.19
(2,62)	1:A:107:PRO:HB3	1:A:109:THR:HG23	8	0.19
(2,604)	1:A:131:LEU:HD22	1:A:131:LEU:HA	5	0.19
(2,604)	1:A:131:LEU:HD21	1:A:131:LEU:HA	5	0.19
(2,604)	1:A:131:LEU:HD23	1:A:131:LEU:HA	5	0.19
(2,296)	1:A:101:VAL:HG22	1:A:94:SER:HB2	9	0.19
(2,296)	1:A:101:VAL:HG21	1:A:94:SER:HB2	9	0.19
(2,296)	1:A:101:VAL:HG23	1:A:94:SER:HB2	9	0.19
(2,296)	1:A:101:VAL:HG12	1:A:94:SER:HB2	9	0.19
(2,296)	1:A:101:VAL:HG11	1:A:94:SER:HB2	9	0.19
(2,296)	1:A:101:VAL:HG13	1:A:94:SER:HB2	9	0.19
(2,28)	1:A:87:GLU:HG2	1:A:87:GLU:HB3	2	0.19
(2,241)	1:A:106:LEU:HD22	1:A:110:VAL:HG12	8	0.19
(2,241)	1:A:106:LEU:HD22	1:A:110:VAL:HG11	8	0.19
(2,241)	1:A:106:LEU:HD22	1:A:110:VAL:HG13	8	0.19
(2,241)	1:A:106:LEU:HD21	1:A:110:VAL:HG12	8	0.19
(2,241)	1:A:106:LEU:HD21	1:A:110:VAL:HG11	8	0.19
(2,241)	1:A:106:LEU:HD21	1:A:110:VAL:HG13	8	0.19
(2,241)	1:A:106:LEU:HD23	1:A:110:VAL:HG12	8	0.19
(2,241)	1:A:106:LEU:HD23	1:A:110:VAL:HG11	8	0.19
(2,241)	1:A:106:LEU:HD23	1:A:110:VAL:HG13	8	0.19
(2,200)	1:A:118:LEU:HD12	1:A:86:ILE:HA	2	0.19
(2,200)	1:A:118:LEU:HD11	1:A:86:ILE:HA	2	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,200)	1:A:118:LEU:HD13	1:A:86:ILE:HA	2	0.19
(2,1935)	1:A:78:LYS:H	1:A:75:LYS:HB2	4	0.19
(2,1935)	1:A:78:LYS:H	1:A:78:LYS:HB3	4	0.19
(2,1861)	1:A:77:ALA:H	1:A:127:GLY:HA2	3	0.19
(2,1861)	1:A:121:ASP:H	1:A:116:ASP:HB2	3	0.19
(2,1861)	1:A:121:ASP:H	1:A:127:GLY:HA2	3	0.19
(2,1861)	1:A:77:ALA:H	1:A:78:LYS:HE3	3	0.19
(2,1763)	1:A:82:PHE:HB2	1:A:76:MET:HB2	1	0.19
(2,1763)	1:A:82:PHE:HB2	1:A:85:ARG:HB3	1	0.19
(2,1763)	1:A:121:ASP:HB3	1:A:76:MET:HB2	1	0.19
(2,1763)	1:A:121:ASP:HB3	1:A:85:ARG:HB2	1	0.19
(2,1763)	1:A:121:ASP:HB3	1:A:85:ARG:HB3	1	0.19
(2,1759)	1:A:82:PHE:HB3	1:A:76:MET:HG2	10	0.19
(2,1759)	1:A:82:PHE:HB3	1:A:85:ARG:HG3	10	0.19
(2,1741)	1:A:136:LYS:HE2	1:A:136:LYS:HA	8	0.19
(2,1741)	1:A:67:LYS:HE2	1:A:70:SER:HA	8	0.19
(2,1741)	1:A:71:LYS:HE2	1:A:72:ASN:HA	8	0.19
(2,1741)	1:A:75:LYS:HE2	1:A:79:SER:HA	8	0.19
(2,1721)	1:A:85:ARG:HD2	1:A:84:THR:HA	7	0.19
(2,1721)	1:A:85:ARG:HA	1:A:85:ARG:HD2	7	0.19
(2,1702)	1:A:106:LEU:HB2	1:A:86:ILE:HB	1	0.19
(2,1702)	1:A:106:LEU:HB3	1:A:86:ILE:HB	1	0.19
(2,1702)	1:A:105:GLU:HG3	1:A:106:LEU:HB2	1	0.19
(2,1702)	1:A:105:GLU:HG3	1:A:106:LEU:HB3	1	0.19
(2,1702)	1:A:115:MET:HB2	1:A:106:LEU:HB2	1	0.19
(2,1702)	1:A:115:MET:HB2	1:A:106:LEU:HB3	1	0.19
(2,1702)	1:A:106:LEU:HB2	1:A:118:LEU:HB3	1	0.19
(2,1702)	1:A:106:LEU:HB3	1:A:118:LEU:HB3	1	0.19
(2,1657)	1:A:61:ARG:HG2	1:A:105:GLU:HA	5	0.19
(2,1657)	1:A:105:GLU:HA	1:A:106:LEU:HB2	5	0.19
(2,1657)	1:A:105:GLU:HA	1:A:106:LEU:HB3	5	0.19
(2,1634)	1:A:123:LEU:HA	1:A:73:PHE:HD1	8	0.19
(2,1634)	1:A:123:LEU:HA	1:A:73:PHE:HD2	8	0.19
(2,1634)	1:A:123:LEU:HA	1:A:73:PHE:HE1	8	0.19
(2,1634)	1:A:123:LEU:HA	1:A:73:PHE:HE2	8	0.19
(2,1626)	1:A:118:LEU:HA	1:A:85:ARG:HG2	4	0.19
(2,1626)	1:A:69:GLU:HA	1:A:67:LYS:HG3	4	0.19
(2,1617)	1:A:79:SER:HA	1:A:75:LYS:HB2	5	0.19
(2,1617)	1:A:79:SER:HA	1:A:75:LYS:HB3	5	0.19
(2,1617)	1:A:79:SER:HA	1:A:78:LYS:HB3	5	0.19
(2,1617)	1:A:121:ASP:HA	1:A:123:LEU:HB3	5	0.19
(2,1617)	1:A:70:SER:HA	1:A:71:LYS:HD3	5	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1617)	1:A:79:SER:HA	1:A:75:LYS:HB2	9	0.19
(2,1617)	1:A:79:SER:HA	1:A:75:LYS:HB3	9	0.19
(2,1617)	1:A:79:SER:HA	1:A:78:LYS:HB3	9	0.19
(2,1617)	1:A:121:ASP:HA	1:A:123:LEU:HB3	9	0.19
(2,1617)	1:A:70:SER:HA	1:A:71:LYS:HD3	9	0.19
(2,1540)	1:A:135:VAL:HA	1:A:109:THR:H	9	0.19
(2,1540)	1:A:135:VAL:HA	1:A:110:VAL:H	9	0.19
(2,1506)	1:A:128:VAL:HB	1:A:70:SER:HB2	1	0.19
(2,1506)	1:A:66:GLU:HB2	1:A:70:SER:HB2	1	0.19
(2,1506)	1:A:128:VAL:HB	1:A:70:SER:HB3	1	0.19
(2,1506)	1:A:66:GLU:HB2	1:A:70:SER:HB3	1	0.19
(2,1506)	1:A:70:SER:HB3	1:A:71:LYS:HB3	1	0.19
(2,1504)	1:A:133:SER:HB3	1:A:62:LEU:HD22	3	0.19
(2,1504)	1:A:133:SER:HB3	1:A:62:LEU:HD21	3	0.19
(2,1504)	1:A:133:SER:HB3	1:A:62:LEU:HD23	3	0.19
(2,1504)	1:A:70:SER:HB2	1:A:64:VAL:HG22	3	0.19
(2,1504)	1:A:70:SER:HB2	1:A:64:VAL:HG21	3	0.19
(2,1504)	1:A:70:SER:HB2	1:A:64:VAL:HG23	3	0.19
(2,1504)	1:A:70:SER:HB3	1:A:64:VAL:HG22	3	0.19
(2,1504)	1:A:70:SER:HB3	1:A:64:VAL:HG21	3	0.19
(2,1504)	1:A:70:SER:HB3	1:A:64:VAL:HG23	3	0.19
(2,1504)	1:A:133:SER:HB3	1:A:62:LEU:HD22	6	0.19
(2,1504)	1:A:133:SER:HB3	1:A:62:LEU:HD21	6	0.19
(2,1504)	1:A:133:SER:HB3	1:A:62:LEU:HD23	6	0.19
(2,1504)	1:A:70:SER:HB2	1:A:64:VAL:HG22	6	0.19
(2,1504)	1:A:70:SER:HB2	1:A:64:VAL:HG21	6	0.19
(2,1504)	1:A:70:SER:HB2	1:A:64:VAL:HG23	6	0.19
(2,1504)	1:A:70:SER:HB3	1:A:64:VAL:HG22	6	0.19
(2,1504)	1:A:70:SER:HB3	1:A:64:VAL:HG21	6	0.19
(2,1504)	1:A:70:SER:HB3	1:A:64:VAL:HG23	6	0.19
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:130:GLY:HA2	5	0.19
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:130:GLY:HA2	5	0.19
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:130:GLY:HA2	5	0.19
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:130:GLY:HA2	5	0.19
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:130:GLY:HA2	5	0.19
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:130:GLY:HA2	5	0.19
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:126:GLY:HA2	5	0.19
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:126:GLY:HA2	5	0.19
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:126:GLY:HA2	5	0.19
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:126:GLY:HA2	5	0.19
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:126:GLY:HA2	5	0.19
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:126:GLY:HA2	5	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:123:LEU:HA	4	0.19
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:123:LEU:HA	4	0.19
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:123:LEU:HA	4	0.19
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:129:VAL:HA	4	0.19
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:129:VAL:HA	4	0.19
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:129:VAL:HA	4	0.19
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:101:VAL:HA	4	0.19
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:101:VAL:HA	4	0.19
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:101:VAL:HA	4	0.19
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:123:LEU:HA	10	0.19
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:123:LEU:HA	10	0.19
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:123:LEU:HA	10	0.19
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:129:VAL:HA	10	0.19
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:129:VAL:HA	10	0.19
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:129:VAL:HA	10	0.19
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:101:VAL:HA	10	0.19
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:101:VAL:HA	10	0.19
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:101:VAL:HA	10	0.19
(2,1324)	1:A:107:PRO:HB3	1:A:108:LYS:HG3	4	0.19
(2,1324)	1:A:115:MET:HG3	1:A:108:LYS:HG3	4	0.19
(2,1324)	1:A:107:PRO:HB3	1:A:108:LYS:HG3	5	0.19
(2,1324)	1:A:115:MET:HG3	1:A:108:LYS:HG3	5	0.19
(2,1288)	1:A:137:LEU:HG	1:A:131:LEU:HA	6	0.19
(2,1288)	1:A:137:LEU:HG	1:A:132:ASP:HA	6	0.19
(2,1253)	1:A:67:LYS:HD3	1:A:67:LYS:HG3	10	0.19
(2,1253)	1:A:136:LYS:HD3	1:A:136:LYS:HG3	10	0.19
(2,1062)	1:A:120:HIS:H	1:A:119:LEU:HB3	7	0.19
(1,47)	1:A:103:MET:H	1:A:95:PHE:HB3	9	0.19
(2,918)	1:A:71:LYS:H	1:A:67:LYS:HA	4	0.18
(2,918)	1:A:71:LYS:H	1:A:67:LYS:HA	5	0.18
(2,918)	1:A:71:LYS:H	1:A:67:LYS:HA	6	0.18
(2,893)	1:A:115:MET:H	1:A:114:ASP:HB3	9	0.18
(2,871)	1:A:87:GLU:H	1:A:92:SER:HB2	2	0.18
(2,871)	1:A:87:GLU:H	1:A:92:SER:HB3	2	0.18
(2,72)	1:A:59:MET:HG3	1:A:136:LYS:HB3	8	0.18
(2,659)	1:A:90:GLY:HA2	1:A:89:LEU:HA	8	0.18
(2,654)	1:A:72:ASN:HB2	1:A:126:GLY:HA3	2	0.18
(2,387)	1:A:86:ILE:HD12	1:A:85:ARG:HD2	3	0.18
(2,387)	1:A:86:ILE:HD11	1:A:85:ARG:HD2	3	0.18
(2,387)	1:A:86:ILE:HD13	1:A:85:ARG:HD2	3	0.18
(2,387)	1:A:86:ILE:HD12	1:A:85:ARG:HD2	5	0.18
(2,387)	1:A:86:ILE:HD11	1:A:85:ARG:HD2	5	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,387)	1:A:86:ILE:HD13	1:A:85:ARG:HD2	5	0.18
(2,387)	1:A:86:ILE:HD12	1:A:85:ARG:HD2	8	0.18
(2,387)	1:A:86:ILE:HD11	1:A:85:ARG:HD2	8	0.18
(2,387)	1:A:86:ILE:HD13	1:A:85:ARG:HD2	8	0.18
(2,288)	1:A:110:VAL:HG22	1:A:113:HIS:HB2	7	0.18
(2,288)	1:A:110:VAL:HG21	1:A:113:HIS:HB2	7	0.18
(2,288)	1:A:110:VAL:HG23	1:A:113:HIS:HB2	7	0.18
(2,282)	1:A:97:THR:HG21	1:A:78:LYS:HE2	5	0.18
(2,282)	1:A:97:THR:HG22	1:A:78:LYS:HE2	5	0.18
(2,282)	1:A:97:THR:HG23	1:A:78:LYS:HE2	5	0.18
(2,282)	1:A:97:THR:HG21	1:A:78:LYS:HE2	9	0.18
(2,282)	1:A:97:THR:HG22	1:A:78:LYS:HE2	9	0.18
(2,282)	1:A:97:THR:HG23	1:A:78:LYS:HE2	9	0.18
(2,28)	1:A:87:GLU:HG2	1:A:87:GLU:HB3	3	0.18
(2,28)	1:A:87:GLU:HG2	1:A:87:GLU:HB3	7	0.18
(2,195)	1:A:89:LEU:HG	1:A:89:LEU:HA	5	0.18
(2,1935)	1:A:78:LYS:H	1:A:75:LYS:HB2	10	0.18
(2,1935)	1:A:78:LYS:H	1:A:78:LYS:HB3	10	0.18
(2,1933)	1:A:92:SER:H	1:A:93:ILE:HD12	3	0.18
(2,1933)	1:A:92:SER:H	1:A:93:ILE:HD11	3	0.18
(2,1933)	1:A:92:SER:H	1:A:93:ILE:HD13	3	0.18
(2,1933)	1:A:92:SER:H	1:A:104:ILE:HD12	3	0.18
(2,1933)	1:A:92:SER:H	1:A:104:ILE:HD11	3	0.18
(2,1933)	1:A:92:SER:H	1:A:104:ILE:HD13	3	0.18
(2,1933)	1:A:92:SER:H	1:A:104:ILE:HG12	3	0.18
(2,1930)	1:A:92:SER:H	1:A:87:GLU:HB2	2	0.18
(2,1930)	1:A:92:SER:H	1:A:105:GLU:HG2	2	0.18
(2,1763)	1:A:82:PHE:HB2	1:A:76:MET:HB2	8	0.18
(2,1763)	1:A:82:PHE:HB2	1:A:85:ARG:HB3	8	0.18
(2,1763)	1:A:121:ASP:HB3	1:A:76:MET:HB2	8	0.18
(2,1763)	1:A:121:ASP:HB3	1:A:85:ARG:HB2	8	0.18
(2,1763)	1:A:121:ASP:HB3	1:A:85:ARG:HB3	8	0.18
(2,1759)	1:A:82:PHE:HB3	1:A:76:MET:HG2	3	0.18
(2,1759)	1:A:82:PHE:HB3	1:A:85:ARG:HG3	3	0.18
(2,1721)	1:A:85:ARG:HD2	1:A:84:THR:HA	8	0.18
(2,1721)	1:A:85:ARG:HA	1:A:85:ARG:HD2	8	0.18
(2,1702)	1:A:106:LEU:HB2	1:A:86:ILE:HB	10	0.18
(2,1702)	1:A:106:LEU:HB3	1:A:86:ILE:HB	10	0.18
(2,1702)	1:A:105:GLU:HG3	1:A:106:LEU:HB2	10	0.18
(2,1702)	1:A:105:GLU:HG3	1:A:106:LEU:HB3	10	0.18
(2,1702)	1:A:115:MET:HB2	1:A:106:LEU:HB2	10	0.18
(2,1702)	1:A:115:MET:HB2	1:A:106:LEU:HB3	10	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1702)	1:A:106:LEU:HB2	1:A:118:LEU:HB3	10	0.18
(2,1702)	1:A:106:LEU:HB3	1:A:118:LEU:HB3	10	0.18
(2,1657)	1:A:61:ARG:HG2	1:A:105:GLU:HA	1	0.18
(2,1657)	1:A:105:GLU:HA	1:A:106:LEU:HB2	1	0.18
(2,1657)	1:A:105:GLU:HA	1:A:106:LEU:HB3	1	0.18
(2,1657)	1:A:61:ARG:HG2	1:A:105:GLU:HA	6	0.18
(2,1657)	1:A:105:GLU:HA	1:A:106:LEU:HB2	6	0.18
(2,1657)	1:A:105:GLU:HA	1:A:106:LEU:HB3	6	0.18
(2,1657)	1:A:61:ARG:HG2	1:A:105:GLU:HA	9	0.18
(2,1657)	1:A:105:GLU:HA	1:A:106:LEU:HB2	9	0.18
(2,1657)	1:A:105:GLU:HA	1:A:106:LEU:HB3	9	0.18
(2,1634)	1:A:123:LEU:HA	1:A:73:PHE:HD1	1	0.18
(2,1634)	1:A:123:LEU:HA	1:A:73:PHE:HD2	1	0.18
(2,1634)	1:A:123:LEU:HA	1:A:73:PHE:HE1	1	0.18
(2,1634)	1:A:123:LEU:HA	1:A:73:PHE:HE2	1	0.18
(2,1634)	1:A:123:LEU:HA	1:A:73:PHE:HD1	6	0.18
(2,1634)	1:A:123:LEU:HA	1:A:73:PHE:HD2	6	0.18
(2,1634)	1:A:123:LEU:HA	1:A:73:PHE:HE1	6	0.18
(2,1634)	1:A:123:LEU:HA	1:A:73:PHE:HE2	6	0.18
(2,1626)	1:A:118:LEU:HA	1:A:85:ARG:HG2	7	0.18
(2,1626)	1:A:69:GLU:HA	1:A:67:LYS:HG3	7	0.18
(2,1572)	1:A:82:PHE:HE1	1:A:77:ALA:HA	1	0.18
(2,1572)	1:A:82:PHE:HE2	1:A:77:ALA:HA	1	0.18
(2,1572)	1:A:82:PHE:HE1	1:A:122:ILE:HA	1	0.18
(2,1572)	1:A:82:PHE:HE2	1:A:122:ILE:HA	1	0.18
(2,1572)	1:A:82:PHE:HE1	1:A:77:ALA:HA	3	0.18
(2,1572)	1:A:82:PHE:HE2	1:A:77:ALA:HA	3	0.18
(2,1572)	1:A:82:PHE:HE1	1:A:122:ILE:HA	3	0.18
(2,1572)	1:A:82:PHE:HE2	1:A:122:ILE:HA	3	0.18
(2,1572)	1:A:82:PHE:HE1	1:A:77:ALA:HA	8	0.18
(2,1572)	1:A:82:PHE:HE2	1:A:77:ALA:HA	8	0.18
(2,1572)	1:A:82:PHE:HE1	1:A:122:ILE:HA	8	0.18
(2,1572)	1:A:82:PHE:HE2	1:A:122:ILE:HA	8	0.18
(2,1510)	1:A:110:VAL:HA	1:A:89:LEU:HD22	2	0.18
(2,1510)	1:A:110:VAL:HA	1:A:89:LEU:HD21	2	0.18
(2,1510)	1:A:110:VAL:HA	1:A:89:LEU:HD23	2	0.18
(2,1510)	1:A:110:VAL:HA	1:A:106:LEU:HD22	2	0.18
(2,1510)	1:A:110:VAL:HA	1:A:106:LEU:HD21	2	0.18
(2,1510)	1:A:110:VAL:HA	1:A:106:LEU:HD23	2	0.18
(2,1507)	1:A:133:SER:HB3	1:A:138:ALA:HB2	1	0.18
(2,1507)	1:A:133:SER:HB3	1:A:138:ALA:HB1	1	0.18
(2,1507)	1:A:133:SER:HB3	1:A:138:ALA:HB3	1	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1507)	1:A:133:SER:HB3	1:A:61:ARG:HB3	1	0.18
(2,1500)	1:A:133:SER:HB3	1:A:105:GLU:HG3	5	0.18
(2,1500)	1:A:128:VAL:HB	1:A:70:SER:HB2	5	0.18
(2,1500)	1:A:66:GLU:HB2	1:A:70:SER:HB2	5	0.18
(2,1500)	1:A:128:VAL:HB	1:A:70:SER:HB3	5	0.18
(2,1500)	1:A:66:GLU:HB2	1:A:70:SER:HB3	5	0.18
(2,1500)	1:A:70:SER:HB3	1:A:71:LYS:HB3	5	0.18
(2,1450)	1:A:122:ILE:HG22	1:A:70:SER:HB2	4	0.18
(2,1450)	1:A:122:ILE:HG21	1:A:70:SER:HB2	4	0.18
(2,1450)	1:A:122:ILE:HG23	1:A:70:SER:HB2	4	0.18
(2,1450)	1:A:122:ILE:HG22	1:A:119:LEU:HA	4	0.18
(2,1450)	1:A:122:ILE:HG21	1:A:119:LEU:HA	4	0.18
(2,1450)	1:A:122:ILE:HG23	1:A:119:LEU:HA	4	0.18
(2,1450)	1:A:122:ILE:HG22	1:A:70:SER:HB2	8	0.18
(2,1450)	1:A:122:ILE:HG21	1:A:70:SER:HB2	8	0.18
(2,1450)	1:A:122:ILE:HG23	1:A:70:SER:HB2	8	0.18
(2,1450)	1:A:122:ILE:HG22	1:A:119:LEU:HA	8	0.18
(2,1450)	1:A:122:ILE:HG21	1:A:119:LEU:HA	8	0.18
(2,1450)	1:A:122:ILE:HG23	1:A:119:LEU:HA	8	0.18
(2,1446)	1:A:86:ILE:HG22	1:A:107:PRO:HG3	3	0.18
(2,1446)	1:A:86:ILE:HG21	1:A:107:PRO:HG3	3	0.18
(2,1446)	1:A:86:ILE:HG23	1:A:107:PRO:HG3	3	0.18
(2,1446)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG22	3	0.18
(2,1446)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG21	3	0.18
(2,1446)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG23	3	0.18
(2,1446)	1:A:88:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG22	3	0.18
(2,1446)	1:A:88:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG21	3	0.18
(2,1446)	1:A:88:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG23	3	0.18
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:130:GLY:HA2	3	0.18
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:130:GLY:HA2	3	0.18
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:130:GLY:HA2	3	0.18
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:130:GLY:HA2	3	0.18
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:130:GLY:HA2	3	0.18
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:130:GLY:HA2	3	0.18
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:126:GLY:HA2	3	0.18
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:126:GLY:HA2	3	0.18
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:126:GLY:HA2	3	0.18
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:126:GLY:HA2	3	0.18
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:126:GLY:HA2	3	0.18
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:126:GLY:HA2	3	0.18
(2,1348)	1:A:62:LEU:HD22	1:A:63:MET:HB2	1	0.18
(2,1348)	1:A:62:LEU:HD21	1:A:63:MET:HB2	1	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1348)	1:A:62:LEU:HD23	1:A:63:MET:HB2	1	0.18
(2,1348)	1:A:62:LEU:HD22	1:A:63:MET:HB3	1	0.18
(2,1348)	1:A:62:LEU:HD21	1:A:63:MET:HB3	1	0.18
(2,1348)	1:A:62:LEU:HD23	1:A:63:MET:HB3	1	0.18
(2,1348)	1:A:62:LEU:HD22	1:A:115:MET:HG3	1	0.18
(2,1348)	1:A:62:LEU:HD21	1:A:115:MET:HG3	1	0.18
(2,1348)	1:A:62:LEU:HD23	1:A:115:MET:HG3	1	0.18
(2,1332)	1:A:137:LEU:HD12	1:A:133:SER:HB3	5	0.18
(2,1332)	1:A:137:LEU:HD11	1:A:133:SER:HB3	5	0.18
(2,1332)	1:A:137:LEU:HD13	1:A:133:SER:HB3	5	0.18
(2,1332)	1:A:119:LEU:HD12	1:A:119:LEU:HA	5	0.18
(2,1332)	1:A:119:LEU:HD11	1:A:119:LEU:HA	5	0.18
(2,1332)	1:A:119:LEU:HD13	1:A:119:LEU:HA	5	0.18
(2,1265)	1:A:78:LYS:HD3	1:A:78:LYS:HA	7	0.18
(2,1265)	1:A:78:LYS:HD2	1:A:78:LYS:HA	7	0.18
(2,1238)	1:A:134:GLU:HB3	1:A:131:LEU:HA	5	0.18
(2,1238)	1:A:134:GLU:HB3	1:A:132:ASP:HA	5	0.18
(2,106)	1:A:103:MET:HG2	1:A:94:SER:HB2	5	0.18
(1,6)	1:A:101:VAL:HB	1:A:103:MET:HG2	8	0.18
(1,46)	1:A:108:LYS:HE3	1:A:59:MET:HA	6	0.18
(2,918)	1:A:71:LYS:H	1:A:67:LYS:HA	1	0.17
(2,918)	1:A:71:LYS:H	1:A:67:LYS:HA	2	0.17
(2,918)	1:A:71:LYS:H	1:A:67:LYS:HA	10	0.17
(2,659)	1:A:90:GLY:HA2	1:A:89:LEU:HA	1	0.17
(2,659)	1:A:90:GLY:HA2	1:A:89:LEU:HA	4	0.17
(2,659)	1:A:90:GLY:HA2	1:A:89:LEU:HA	6	0.17
(2,659)	1:A:90:GLY:HA2	1:A:89:LEU:HA	7	0.17
(2,387)	1:A:86:ILE:HD12	1:A:85:ARG:HD2	4	0.17
(2,387)	1:A:86:ILE:HD11	1:A:85:ARG:HD2	4	0.17
(2,387)	1:A:86:ILE:HD13	1:A:85:ARG:HD2	4	0.17
(2,387)	1:A:86:ILE:HD12	1:A:85:ARG:HD2	6	0.17
(2,387)	1:A:86:ILE:HD11	1:A:85:ARG:HD2	6	0.17
(2,387)	1:A:86:ILE:HD13	1:A:85:ARG:HD2	6	0.17
(2,353)	1:A:86:ILE:HG22	1:A:104:ILE:HG22	8	0.17
(2,353)	1:A:86:ILE:HG22	1:A:104:ILE:HG21	8	0.17
(2,353)	1:A:86:ILE:HG22	1:A:104:ILE:HG23	8	0.17
(2,353)	1:A:86:ILE:HG21	1:A:104:ILE:HG22	8	0.17
(2,353)	1:A:86:ILE:HG21	1:A:104:ILE:HG21	8	0.17
(2,353)	1:A:86:ILE:HG21	1:A:104:ILE:HG23	8	0.17
(2,353)	1:A:86:ILE:HG23	1:A:104:ILE:HG22	8	0.17
(2,353)	1:A:86:ILE:HG23	1:A:104:ILE:HG21	8	0.17
(2,353)	1:A:86:ILE:HG23	1:A:104:ILE:HG23	8	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,353)	1:A:86:ILE:HG22	1:A:104:ILE:HG22	9	0.17
(2,353)	1:A:86:ILE:HG22	1:A:104:ILE:HG21	9	0.17
(2,353)	1:A:86:ILE:HG22	1:A:104:ILE:HG23	9	0.17
(2,353)	1:A:86:ILE:HG21	1:A:104:ILE:HG22	9	0.17
(2,353)	1:A:86:ILE:HG21	1:A:104:ILE:HG21	9	0.17
(2,353)	1:A:86:ILE:HG21	1:A:104:ILE:HG23	9	0.17
(2,353)	1:A:86:ILE:HG23	1:A:104:ILE:HG22	9	0.17
(2,353)	1:A:86:ILE:HG23	1:A:104:ILE:HG21	9	0.17
(2,353)	1:A:86:ILE:HG23	1:A:104:ILE:HG23	9	0.17
(2,288)	1:A:110:VAL:HG22	1:A:113:HIS:HB2	1	0.17
(2,288)	1:A:110:VAL:HG21	1:A:113:HIS:HB2	1	0.17
(2,288)	1:A:110:VAL:HG23	1:A:113:HIS:HB2	1	0.17
(2,267)	1:A:110:VAL:HG22	1:A:114:ASP:HB3	8	0.17
(2,267)	1:A:110:VAL:HG21	1:A:114:ASP:HB3	8	0.17
(2,267)	1:A:110:VAL:HG23	1:A:114:ASP:HB3	8	0.17
(2,241)	1:A:106:LEU:HD22	1:A:110:VAL:HG12	4	0.17
(2,241)	1:A:106:LEU:HD22	1:A:110:VAL:HG11	4	0.17
(2,241)	1:A:106:LEU:HD22	1:A:110:VAL:HG13	4	0.17
(2,241)	1:A:106:LEU:HD21	1:A:110:VAL:HG12	4	0.17
(2,241)	1:A:106:LEU:HD21	1:A:110:VAL:HG11	4	0.17
(2,241)	1:A:106:LEU:HD21	1:A:110:VAL:HG13	4	0.17
(2,241)	1:A:106:LEU:HD23	1:A:110:VAL:HG12	4	0.17
(2,241)	1:A:106:LEU:HD23	1:A:110:VAL:HG11	4	0.17
(2,241)	1:A:106:LEU:HD23	1:A:110:VAL:HG13	4	0.17
(2,241)	1:A:106:LEU:HD22	1:A:110:VAL:HG12	7	0.17
(2,241)	1:A:106:LEU:HD22	1:A:110:VAL:HG11	7	0.17
(2,241)	1:A:106:LEU:HD22	1:A:110:VAL:HG13	7	0.17
(2,241)	1:A:106:LEU:HD21	1:A:110:VAL:HG12	7	0.17
(2,241)	1:A:106:LEU:HD21	1:A:110:VAL:HG11	7	0.17
(2,241)	1:A:106:LEU:HD21	1:A:110:VAL:HG13	7	0.17
(2,241)	1:A:106:LEU:HD23	1:A:110:VAL:HG12	7	0.17
(2,241)	1:A:106:LEU:HD23	1:A:110:VAL:HG11	7	0.17
(2,241)	1:A:106:LEU:HD23	1:A:110:VAL:HG13	7	0.17
(2,241)	1:A:106:LEU:HD22	1:A:110:VAL:HG12	9	0.17
(2,241)	1:A:106:LEU:HD22	1:A:110:VAL:HG11	9	0.17
(2,241)	1:A:106:LEU:HD22	1:A:110:VAL:HG13	9	0.17
(2,241)	1:A:106:LEU:HD21	1:A:110:VAL:HG12	9	0.17
(2,241)	1:A:106:LEU:HD21	1:A:110:VAL:HG11	9	0.17
(2,241)	1:A:106:LEU:HD21	1:A:110:VAL:HG13	9	0.17
(2,241)	1:A:106:LEU:HD23	1:A:110:VAL:HG12	9	0.17
(2,241)	1:A:106:LEU:HD23	1:A:110:VAL:HG11	9	0.17
(2,241)	1:A:106:LEU:HD23	1:A:110:VAL:HG13	9	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1935)	1:A:78:LYS:H	1:A:75:LYS:HB2	2	0.17
(2,1935)	1:A:78:LYS:H	1:A:78:LYS:HB3	2	0.17
(2,1930)	1:A:92:SER:H	1:A:87:GLU:HB2	4	0.17
(2,1930)	1:A:92:SER:H	1:A:105:GLU:HG2	4	0.17
(2,1769)	1:A:121:ASP:HB2	1:A:82:PHE:HA	5	0.17
(2,1769)	1:A:121:ASP:HB2	1:A:115:MET:HA	5	0.17
(2,1769)	1:A:121:ASP:HB2	1:A:116:ASP:HA	5	0.17
(2,1769)	1:A:121:ASP:HB2	1:A:82:PHE:HA	9	0.17
(2,1769)	1:A:121:ASP:HB2	1:A:115:MET:HA	9	0.17
(2,1769)	1:A:121:ASP:HB2	1:A:116:ASP:HA	9	0.17
(2,1752)	1:A:74:SER:HA	1:A:78:LYS:HE2	9	0.17
(2,1752)	1:A:78:LYS:HE2	1:A:75:LYS:HA	9	0.17
(2,1702)	1:A:106:LEU:HB2	1:A:86:ILE:HB	5	0.17
(2,1702)	1:A:106:LEU:HB3	1:A:86:ILE:HB	5	0.17
(2,1702)	1:A:105:GLU:HG3	1:A:106:LEU:HB2	5	0.17
(2,1702)	1:A:105:GLU:HG3	1:A:106:LEU:HB3	5	0.17
(2,1702)	1:A:115:MET:HB2	1:A:106:LEU:HB2	5	0.17
(2,1702)	1:A:115:MET:HB2	1:A:106:LEU:HB3	5	0.17
(2,1702)	1:A:106:LEU:HB2	1:A:118:LEU:HB3	5	0.17
(2,1702)	1:A:106:LEU:HB3	1:A:118:LEU:HB3	5	0.17
(2,1682)	1:A:62:LEU:HA	1:A:63:MET:HB2	1	0.17
(2,1682)	1:A:62:LEU:HA	1:A:103:MET:HG3	1	0.17
(2,1682)	1:A:62:LEU:HA	1:A:63:MET:HB2	9	0.17
(2,1682)	1:A:62:LEU:HA	1:A:103:MET:HG3	9	0.17
(2,1657)	1:A:61:ARG:HG2	1:A:105:GLU:HA	4	0.17
(2,1657)	1:A:105:GLU:HA	1:A:106:LEU:HB2	4	0.17
(2,1657)	1:A:105:GLU:HA	1:A:106:LEU:HB3	4	0.17
(2,1648)	1:A:136:LYS:HG2	1:A:136:LYS:HA	10	0.17
(2,1648)	1:A:136:LYS:HG3	1:A:136:LYS:HA	10	0.17
(2,1645)	1:A:71:LYS:HA	1:A:69:GLU:HB2	8	0.17
(2,1645)	1:A:71:LYS:HA	1:A:69:GLU:HB3	8	0.17
(2,1635)	1:A:114:ASP:HA	1:A:115:MET:HA	7	0.17
(2,1635)	1:A:114:ASP:HA	1:A:118:LEU:HA	7	0.17
(2,1572)	1:A:82:PHE:HE1	1:A:77:ALA:HA	2	0.17
(2,1572)	1:A:82:PHE:HE2	1:A:77:ALA:HA	2	0.17
(2,1572)	1:A:82:PHE:HE1	1:A:122:ILE:HA	2	0.17
(2,1572)	1:A:82:PHE:HE2	1:A:122:ILE:HA	2	0.17
(2,1524)	1:A:108:LYS:HD3	1:A:135:VAL:HA	6	0.17
(2,1524)	1:A:110:VAL:HA	1:A:89:LEU:HB2	6	0.17
(2,1524)	1:A:136:LYS:HD2	1:A:135:VAL:HA	6	0.17
(2,1510)	1:A:110:VAL:HA	1:A:89:LEU:HD22	5	0.17
(2,1510)	1:A:110:VAL:HA	1:A:89:LEU:HD21	5	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1510)	1:A:110:VAL:HA	1:A:89:LEU:HD23	5	0.17
(2,1510)	1:A:110:VAL:HA	1:A:106:LEU:HD22	5	0.17
(2,1510)	1:A:110:VAL:HA	1:A:106:LEU:HD21	5	0.17
(2,1510)	1:A:110:VAL:HA	1:A:106:LEU:HD23	5	0.17
(2,1462)	1:A:122:ILE:HD12	1:A:118:LEU:HB3	3	0.17
(2,1462)	1:A:122:ILE:HD11	1:A:118:LEU:HB3	3	0.17
(2,1462)	1:A:122:ILE:HD13	1:A:118:LEU:HB3	3	0.17
(2,1462)	1:A:122:ILE:HD12	1:A:103:MET:HB3	3	0.17
(2,1462)	1:A:122:ILE:HD11	1:A:103:MET:HB3	3	0.17
(2,1462)	1:A:122:ILE:HD13	1:A:103:MET:HB3	3	0.17
(2,1462)	1:A:122:ILE:HD12	1:A:118:LEU:HB3	4	0.17
(2,1462)	1:A:122:ILE:HD11	1:A:118:LEU:HB3	4	0.17
(2,1462)	1:A:122:ILE:HD13	1:A:118:LEU:HB3	4	0.17
(2,1462)	1:A:122:ILE:HD12	1:A:103:MET:HB3	4	0.17
(2,1462)	1:A:122:ILE:HD11	1:A:103:MET:HB3	4	0.17
(2,1462)	1:A:122:ILE:HD13	1:A:103:MET:HB3	4	0.17
(2,1446)	1:A:86:ILE:HG22	1:A:107:PRO:HG3	2	0.17
(2,1446)	1:A:86:ILE:HG21	1:A:107:PRO:HG3	2	0.17
(2,1446)	1:A:86:ILE:HG23	1:A:107:PRO:HG3	2	0.17
(2,1446)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG22	2	0.17
(2,1446)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG21	2	0.17
(2,1446)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG23	2	0.17
(2,1446)	1:A:88:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG22	2	0.17
(2,1446)	1:A:88:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG21	2	0.17
(2,1446)	1:A:88:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG23	2	0.17
(2,140)	1:A:66:GLU:HB2	1:A:71:LYS:HD3	2	0.17
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:123:LEU:HA	5	0.17
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:123:LEU:HA	5	0.17
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:123:LEU:HA	5	0.17
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:129:VAL:HA	5	0.17
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:129:VAL:HA	5	0.17
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:129:VAL:HA	5	0.17
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:101:VAL:HA	5	0.17
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:101:VAL:HA	5	0.17
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:101:VAL:HA	5	0.17
(2,1265)	1:A:78:LYS:HD3	1:A:78:LYS:HA	5	0.17
(2,1265)	1:A:78:LYS:HD2	1:A:78:LYS:HA	5	0.17
(2,1238)	1:A:134:GLU:HB3	1:A:131:LEU:HA	2	0.17
(2,1238)	1:A:134:GLU:HB3	1:A:132:ASP:HA	2	0.17
(2,1062)	1:A:120:HIS:H	1:A:119:LEU:HB3	10	0.17
(1,8)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:90:GLY:HA2	1	0.17
(1,41)	1:A:105:GLU:HA	1:A:132:ASP:HB2	10	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,989)	1:A:59:MET:H	1:A:58:GLU:HG2	3	0.16
(2,918)	1:A:71:LYS:H	1:A:67:LYS:HA	9	0.16
(2,871)	1:A:87:GLU:H	1:A:92:SER:HB2	4	0.16
(2,871)	1:A:87:GLU:H	1:A:92:SER:HB3	4	0.16
(2,659)	1:A:90:GLY:HA2	1:A:89:LEU:HA	2	0.16
(2,659)	1:A:90:GLY:HA2	1:A:89:LEU:HA	9	0.16
(2,659)	1:A:90:GLY:HA2	1:A:89:LEU:HA	10	0.16
(2,649)	1:A:70:SER:HB2	1:A:126:GLY:HA3	3	0.16
(2,617)	1:A:103:MET:HG2	1:A:103:MET:HA	1	0.16
(2,583)	1:A:136:LYS:HA	1:A:133:SER:HB2	10	0.16
(2,514)	1:A:115:MET:HG3	1:A:112:GLU:HA	10	0.16
(2,387)	1:A:86:ILE:HD12	1:A:85:ARG:HD2	1	0.16
(2,387)	1:A:86:ILE:HD11	1:A:85:ARG:HD2	1	0.16
(2,387)	1:A:86:ILE:HD13	1:A:85:ARG:HD2	1	0.16
(2,387)	1:A:86:ILE:HD12	1:A:85:ARG:HD2	7	0.16
(2,387)	1:A:86:ILE:HD11	1:A:85:ARG:HD2	7	0.16
(2,387)	1:A:86:ILE:HD13	1:A:85:ARG:HD2	7	0.16
(2,353)	1:A:86:ILE:HG22	1:A:104:ILE:HG22	2	0.16
(2,353)	1:A:86:ILE:HG22	1:A:104:ILE:HG21	2	0.16
(2,353)	1:A:86:ILE:HG22	1:A:104:ILE:HG23	2	0.16
(2,353)	1:A:86:ILE:HG21	1:A:104:ILE:HG22	2	0.16
(2,353)	1:A:86:ILE:HG21	1:A:104:ILE:HG21	2	0.16
(2,353)	1:A:86:ILE:HG21	1:A:104:ILE:HG23	2	0.16
(2,353)	1:A:86:ILE:HG23	1:A:104:ILE:HG22	2	0.16
(2,353)	1:A:86:ILE:HG23	1:A:104:ILE:HG21	2	0.16
(2,353)	1:A:86:ILE:HG23	1:A:104:ILE:HG23	2	0.16
(2,353)	1:A:86:ILE:HG22	1:A:104:ILE:HG22	4	0.16
(2,353)	1:A:86:ILE:HG22	1:A:104:ILE:HG21	4	0.16
(2,353)	1:A:86:ILE:HG22	1:A:104:ILE:HG23	4	0.16
(2,353)	1:A:86:ILE:HG21	1:A:104:ILE:HG22	4	0.16
(2,353)	1:A:86:ILE:HG21	1:A:104:ILE:HG21	4	0.16
(2,353)	1:A:86:ILE:HG21	1:A:104:ILE:HG23	4	0.16
(2,353)	1:A:86:ILE:HG23	1:A:104:ILE:HG22	4	0.16
(2,353)	1:A:86:ILE:HG23	1:A:104:ILE:HG21	4	0.16
(2,353)	1:A:86:ILE:HG23	1:A:104:ILE:HG23	4	0.16
(2,343)	1:A:86:ILE:HG22	1:A:91:GLY:HA2	3	0.16
(2,343)	1:A:86:ILE:HG21	1:A:91:GLY:HA2	3	0.16
(2,343)	1:A:86:ILE:HG23	1:A:91:GLY:HA2	3	0.16
(2,311)	1:A:135:VAL:HG22	1:A:133:SER:HB2	8	0.16
(2,311)	1:A:135:VAL:HG21	1:A:133:SER:HB2	8	0.16
(2,311)	1:A:135:VAL:HG23	1:A:133:SER:HB2	8	0.16
(2,311)	1:A:135:VAL:HG12	1:A:133:SER:HB2	8	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,311)	1:A:135:VAL:HG11	1:A:133:SER:HB2	8	0.16
(2,311)	1:A:135:VAL:HG13	1:A:133:SER:HB2	8	0.16
(2,275)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:102:THR:HB	2	0.16
(2,275)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:102:THR:HB	2	0.16
(2,275)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:102:THR:HB	2	0.16
(2,275)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:102:THR:HB	5	0.16
(2,275)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:102:THR:HB	5	0.16
(2,275)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:102:THR:HB	5	0.16
(2,275)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:102:THR:HB	6	0.16
(2,275)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:102:THR:HB	6	0.16
(2,275)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:102:THR:HB	6	0.16
(2,275)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:102:THR:HB	9	0.16
(2,275)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:102:THR:HB	9	0.16
(2,275)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:102:THR:HB	9	0.16
(2,257)	1:A:89:LEU:HD22	1:A:114:ASP:HB3	2	0.16
(2,257)	1:A:89:LEU:HD21	1:A:114:ASP:HB3	2	0.16
(2,257)	1:A:89:LEU:HD23	1:A:114:ASP:HB3	2	0.16
(2,241)	1:A:106:LEU:HD22	1:A:110:VAL:HG12	1	0.16
(2,241)	1:A:106:LEU:HD22	1:A:110:VAL:HG11	1	0.16
(2,241)	1:A:106:LEU:HD22	1:A:110:VAL:HG13	1	0.16
(2,241)	1:A:106:LEU:HD21	1:A:110:VAL:HG12	1	0.16
(2,241)	1:A:106:LEU:HD21	1:A:110:VAL:HG11	1	0.16
(2,241)	1:A:106:LEU:HD21	1:A:110:VAL:HG13	1	0.16
(2,241)	1:A:106:LEU:HD23	1:A:110:VAL:HG12	1	0.16
(2,241)	1:A:106:LEU:HD23	1:A:110:VAL:HG11	1	0.16
(2,241)	1:A:106:LEU:HD23	1:A:110:VAL:HG13	1	0.16
(2,241)	1:A:106:LEU:HD22	1:A:110:VAL:HG12	6	0.16
(2,241)	1:A:106:LEU:HD22	1:A:110:VAL:HG11	6	0.16
(2,241)	1:A:106:LEU:HD22	1:A:110:VAL:HG13	6	0.16
(2,241)	1:A:106:LEU:HD21	1:A:110:VAL:HG12	6	0.16
(2,241)	1:A:106:LEU:HD21	1:A:110:VAL:HG11	6	0.16
(2,241)	1:A:106:LEU:HD21	1:A:110:VAL:HG13	6	0.16
(2,241)	1:A:106:LEU:HD23	1:A:110:VAL:HG12	6	0.16
(2,241)	1:A:106:LEU:HD23	1:A:110:VAL:HG11	6	0.16
(2,241)	1:A:106:LEU:HD23	1:A:110:VAL:HG13	6	0.16
(2,195)	1:A:89:LEU:HG	1:A:89:LEU:HA	6	0.16
(2,195)	1:A:89:LEU:HG	1:A:89:LEU:HA	10	0.16
(2,1935)	1:A:78:LYS:H	1:A:75:LYS:HB2	7	0.16
(2,1935)	1:A:78:LYS:H	1:A:78:LYS:HB3	7	0.16
(2,1922)	1:A:86:ILE:H	1:A:87:GLU:HB2	9	0.16
(2,1922)	1:A:86:ILE:H	1:A:87:GLU:HB3	9	0.16
(2,1922)	1:A:86:ILE:H	1:A:88:GLU:HB3	9	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,186)	1:A:96:LEU:HG	1:A:103:MET:HG2	7	0.16
(2,1752)	1:A:74:SER:HA	1:A:78:LYS:HE2	4	0.16
(2,1752)	1:A:78:LYS:HE2	1:A:75:LYS:HA	4	0.16
(2,1721)	1:A:85:ARG:HD2	1:A:84:THR:HA	1	0.16
(2,1721)	1:A:85:ARG:HA	1:A:85:ARG:HD2	1	0.16
(2,1708)	1:A:91:GLY:HA3	1:A:58:GLU:HA	2	0.16
(2,1708)	1:A:91:GLY:HA3	1:A:60:THR:HB	2	0.16
(2,1708)	1:A:91:GLY:HA3	1:A:89:LEU:HA	2	0.16
(2,1657)	1:A:61:ARG:HG2	1:A:105:GLU:HA	8	0.16
(2,1657)	1:A:105:GLU:HA	1:A:106:LEU:HB2	8	0.16
(2,1657)	1:A:105:GLU:HA	1:A:106:LEU:HB3	8	0.16
(2,1648)	1:A:136:LYS:HG2	1:A:136:LYS:HA	8	0.16
(2,1648)	1:A:136:LYS:HG3	1:A:136:LYS:HA	8	0.16
(2,1645)	1:A:71:LYS:HA	1:A:69:GLU:HB2	5	0.16
(2,1645)	1:A:71:LYS:HA	1:A:69:GLU:HB3	5	0.16
(2,1635)	1:A:114:ASP:HA	1:A:115:MET:HA	5	0.16
(2,1635)	1:A:114:ASP:HA	1:A:118:LEU:HA	5	0.16
(2,1635)	1:A:114:ASP:HA	1:A:115:MET:HA	6	0.16
(2,1635)	1:A:114:ASP:HA	1:A:118:LEU:HA	6	0.16
(2,1635)	1:A:114:ASP:HA	1:A:115:MET:HA	8	0.16
(2,1635)	1:A:114:ASP:HA	1:A:118:LEU:HA	8	0.16
(2,1634)	1:A:123:LEU:HA	1:A:73:PHE:HD1	9	0.16
(2,1634)	1:A:123:LEU:HA	1:A:73:PHE:HD2	9	0.16
(2,1634)	1:A:123:LEU:HA	1:A:73:PHE:HE1	9	0.16
(2,1634)	1:A:123:LEU:HA	1:A:73:PHE:HE2	9	0.16
(2,1617)	1:A:79:SER:HA	1:A:75:LYS:HB2	3	0.16
(2,1617)	1:A:79:SER:HA	1:A:75:LYS:HB3	3	0.16
(2,1617)	1:A:79:SER:HA	1:A:78:LYS:HB3	3	0.16
(2,1617)	1:A:121:ASP:HA	1:A:123:LEU:HB3	3	0.16
(2,1617)	1:A:70:SER:HA	1:A:71:LYS:HD3	3	0.16
(2,1572)	1:A:82:PHE:HE1	1:A:77:ALA:HA	5	0.16
(2,1572)	1:A:82:PHE:HE2	1:A:77:ALA:HA	5	0.16
(2,1572)	1:A:82:PHE:HE1	1:A:122:ILE:HA	5	0.16
(2,1572)	1:A:82:PHE:HE2	1:A:122:ILE:HA	5	0.16
(2,1541)	1:A:81:SER:HB2	1:A:81:SER:HA	9	0.16
(2,1541)	1:A:81:SER:HB3	1:A:81:SER:HA	9	0.16
(2,1540)	1:A:135:VAL:HA	1:A:109:THR:H	1	0.16
(2,1540)	1:A:135:VAL:HA	1:A:110:VAL:H	1	0.16
(2,1510)	1:A:110:VAL:HA	1:A:89:LEU:HD22	10	0.16
(2,1510)	1:A:110:VAL:HA	1:A:89:LEU:HD21	10	0.16
(2,1510)	1:A:110:VAL:HA	1:A:89:LEU:HD23	10	0.16
(2,1510)	1:A:110:VAL:HA	1:A:106:LEU:HD22	10	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1510)	1:A:110:VAL:HA	1:A:106:LEU:HD21	10	0.16
(2,1510)	1:A:110:VAL:HA	1:A:106:LEU:HD23	10	0.16
(2,1462)	1:A:122:ILE:HD12	1:A:118:LEU:HB3	1	0.16
(2,1462)	1:A:122:ILE:HD11	1:A:118:LEU:HB3	1	0.16
(2,1462)	1:A:122:ILE:HD13	1:A:118:LEU:HB3	1	0.16
(2,1462)	1:A:122:ILE:HD12	1:A:103:MET:HB3	1	0.16
(2,1462)	1:A:122:ILE:HD11	1:A:103:MET:HB3	1	0.16
(2,1462)	1:A:122:ILE:HD13	1:A:103:MET:HB3	1	0.16
(2,1450)	1:A:122:ILE:HG22	1:A:70:SER:HB2	6	0.16
(2,1450)	1:A:122:ILE:HG21	1:A:70:SER:HB2	6	0.16
(2,1450)	1:A:122:ILE:HG23	1:A:70:SER:HB2	6	0.16
(2,1450)	1:A:122:ILE:HG22	1:A:119:LEU:HA	6	0.16
(2,1450)	1:A:122:ILE:HG21	1:A:119:LEU:HA	6	0.16
(2,1450)	1:A:122:ILE:HG23	1:A:119:LEU:HA	6	0.16
(2,1446)	1:A:86:ILE:HG22	1:A:107:PRO:HG3	10	0.16
(2,1446)	1:A:86:ILE:HG21	1:A:107:PRO:HG3	10	0.16
(2,1446)	1:A:86:ILE:HG23	1:A:107:PRO:HG3	10	0.16
(2,1446)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG22	10	0.16
(2,1446)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG21	10	0.16
(2,1446)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG23	10	0.16
(2,1446)	1:A:88:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG22	10	0.16
(2,1446)	1:A:88:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG21	10	0.16
(2,1446)	1:A:88:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG23	10	0.16
(2,1426)	1:A:124:ALA:HB2	1:A:117:GLN:HB2	2	0.16
(2,1426)	1:A:124:ALA:HB2	1:A:117:GLN:HB3	2	0.16
(2,1426)	1:A:124:ALA:HB1	1:A:117:GLN:HB2	2	0.16
(2,1426)	1:A:124:ALA:HB1	1:A:117:GLN:HB3	2	0.16
(2,1426)	1:A:124:ALA:HB3	1:A:117:GLN:HB2	2	0.16
(2,1426)	1:A:124:ALA:HB3	1:A:117:GLN:HB3	2	0.16
(2,1426)	1:A:124:ALA:HB2	1:A:118:LEU:HB3	2	0.16
(2,1426)	1:A:124:ALA:HB1	1:A:118:LEU:HB3	2	0.16
(2,1426)	1:A:124:ALA:HB3	1:A:118:LEU:HB3	2	0.16
(2,1420)	1:A:64:VAL:HG22	1:A:62:LEU:HG	7	0.16
(2,1420)	1:A:64:VAL:HG21	1:A:62:LEU:HG	7	0.16
(2,1420)	1:A:64:VAL:HG23	1:A:62:LEU:HG	7	0.16
(2,1420)	1:A:93:ILE:HG13	1:A:64:VAL:HG22	7	0.16
(2,1420)	1:A:93:ILE:HG13	1:A:64:VAL:HG21	7	0.16
(2,1420)	1:A:93:ILE:HG13	1:A:64:VAL:HG23	7	0.16
(2,1420)	1:A:64:VAL:HG22	1:A:119:LEU:HB2	7	0.16
(2,1420)	1:A:64:VAL:HG21	1:A:119:LEU:HB2	7	0.16
(2,1420)	1:A:64:VAL:HG23	1:A:119:LEU:HB2	7	0.16
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:123:LEU:HA	3	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:123:LEU:HA	3	0.16
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:123:LEU:HA	3	0.16
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:129:VAL:HA	3	0.16
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:129:VAL:HA	3	0.16
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:129:VAL:HA	3	0.16
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:101:VAL:HA	3	0.16
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:101:VAL:HA	3	0.16
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:101:VAL:HA	3	0.16
(2,1367)	1:A:65:THR:HG21	1:A:70:SER:HB3	10	0.16
(2,1367)	1:A:65:THR:HG22	1:A:70:SER:HB3	10	0.16
(2,1367)	1:A:65:THR:HG23	1:A:70:SER:HB3	10	0.16
(2,1367)	1:A:65:THR:HG21	1:A:100:GLY:HA2	10	0.16
(2,1367)	1:A:65:THR:HG22	1:A:100:GLY:HA2	10	0.16
(2,1367)	1:A:65:THR:HG23	1:A:100:GLY:HA2	10	0.16
(2,132)	1:A:75:LYS:HD3	1:A:75:LYS:HA	10	0.16
(2,1317)	1:A:78:LYS:HG3	1:A:78:LYS:HA	8	0.16
(2,1317)	1:A:85:ARG:HG2	1:A:82:PHE:HA	8	0.16
(2,1292)	1:A:96:LEU:HB3	1:A:96:LEU:HG	7	0.16
(2,1292)	1:A:118:LEU:HG	1:A:118:LEU:HB3	7	0.16
(2,1288)	1:A:137:LEU:HG	1:A:131:LEU:HA	7	0.16
(2,1288)	1:A:137:LEU:HG	1:A:132:ASP:HA	7	0.16
(2,1257)	1:A:136:LYS:HD2	1:A:59:MET:HG2	6	0.16
(2,1257)	1:A:136:LYS:HD3	1:A:58:GLU:HG3	6	0.16
(2,1257)	1:A:136:LYS:HD3	1:A:59:MET:HG2	6	0.16
(2,1257)	1:A:75:LYS:HD3	1:A:78:LYS:HE2	6	0.16
(2,1238)	1:A:134:GLU:HB3	1:A:131:LEU:HA	6	0.16
(2,1238)	1:A:134:GLU:HB3	1:A:132:ASP:HA	6	0.16
(1,47)	1:A:103:MET:H	1:A:95:PHE:HB3	4	0.16
(1,43)	1:A:132:ASP:HA	1:A:103:MET:HG2	2	0.16
(1,36)	1:A:85:ARG:HA	1:A:88:GLU:HB3	3	0.16
(1,3)	1:A:122:ILE:HB	1:A:62:LEU:HB2	2	0.16
(2,943)	1:A:58:GLU:H	1:A:59:MET:H	1	0.15
(2,943)	1:A:58:GLU:H	1:A:59:MET:H	1	0.15
(2,943)	1:A:58:GLU:H	1:A:59:MET:H	1	0.15
(2,745)	1:A:105:GLU:H	1:A:105:GLU:HB3	3	0.15
(2,72)	1:A:59:MET:HG3	1:A:136:LYS:HB3	6	0.15
(2,659)	1:A:90:GLY:HA2	1:A:89:LEU:HA	3	0.15
(2,617)	1:A:103:MET:HG2	1:A:103:MET:HA	4	0.15
(2,514)	1:A:115:MET:HG3	1:A:112:GLU:HA	2	0.15
(2,420)	1:A:79:SER:HB2	1:A:82:PHE:HB3	9	0.15
(2,375)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:122:ILE:HD12	6	0.15
(2,375)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:122:ILE:HD11	6	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,375)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:122:ILE:HD13	6	0.15
(2,375)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:122:ILE:HD12	6	0.15
(2,375)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:122:ILE:HD11	6	0.15
(2,375)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:122:ILE:HD13	6	0.15
(2,375)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:122:ILE:HD12	6	0.15
(2,375)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:122:ILE:HD11	6	0.15
(2,375)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:122:ILE:HD13	6	0.15
(2,375)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:122:ILE:HD12	9	0.15
(2,375)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:122:ILE:HD11	9	0.15
(2,375)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:122:ILE:HD13	9	0.15
(2,375)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:122:ILE:HD12	9	0.15
(2,375)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:122:ILE:HD11	9	0.15
(2,375)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:122:ILE:HD13	9	0.15
(2,375)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:122:ILE:HD12	9	0.15
(2,375)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:122:ILE:HD11	9	0.15
(2,375)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:122:ILE:HD13	9	0.15
(2,353)	1:A:86:ILE:HG22	1:A:104:ILE:HG22	1	0.15
(2,353)	1:A:86:ILE:HG22	1:A:104:ILE:HG21	1	0.15
(2,353)	1:A:86:ILE:HG22	1:A:104:ILE:HG23	1	0.15
(2,353)	1:A:86:ILE:HG21	1:A:104:ILE:HG22	1	0.15
(2,353)	1:A:86:ILE:HG21	1:A:104:ILE:HG21	1	0.15
(2,353)	1:A:86:ILE:HG21	1:A:104:ILE:HG23	1	0.15
(2,353)	1:A:86:ILE:HG23	1:A:104:ILE:HG22	1	0.15
(2,353)	1:A:86:ILE:HG23	1:A:104:ILE:HG21	1	0.15
(2,353)	1:A:86:ILE:HG23	1:A:104:ILE:HG23	1	0.15
(2,333)	1:A:124:ALA:HB2	1:A:76:MET:HG3	2	0.15
(2,333)	1:A:124:ALA:HB1	1:A:76:MET:HG3	2	0.15
(2,333)	1:A:124:ALA:HB3	1:A:76:MET:HG3	2	0.15
(2,296)	1:A:101:VAL:HG22	1:A:94:SER:HB2	7	0.15
(2,296)	1:A:101:VAL:HG21	1:A:94:SER:HB2	7	0.15
(2,296)	1:A:101:VAL:HG23	1:A:94:SER:HB2	7	0.15
(2,296)	1:A:101:VAL:HG12	1:A:94:SER:HB2	7	0.15
(2,296)	1:A:101:VAL:HG11	1:A:94:SER:HB2	7	0.15
(2,296)	1:A:101:VAL:HG13	1:A:94:SER:HB2	7	0.15
(2,288)	1:A:110:VAL:HG22	1:A:113:HIS:HB2	4	0.15
(2,288)	1:A:110:VAL:HG21	1:A:113:HIS:HB2	4	0.15
(2,288)	1:A:110:VAL:HG23	1:A:113:HIS:HB2	4	0.15
(2,275)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:102:THR:HB	7	0.15
(2,275)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:102:THR:HB	7	0.15
(2,275)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:102:THR:HB	7	0.15
(2,263)	1:A:65:THR:HG21	1:A:67:LYS:HE2	1	0.15
(2,263)	1:A:65:THR:HG22	1:A:67:LYS:HE2	1	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,263)	1:A:65:THR:HG23	1:A:67:LYS:HE2	1	0.15
(2,257)	1:A:89:LEU:HD22	1:A:114:ASP:HB3	10	0.15
(2,257)	1:A:89:LEU:HD21	1:A:114:ASP:HB3	10	0.15
(2,257)	1:A:89:LEU:HD23	1:A:114:ASP:HB3	10	0.15
(2,241)	1:A:106:LEU:HD22	1:A:110:VAL:HG12	5	0.15
(2,241)	1:A:106:LEU:HD22	1:A:110:VAL:HG11	5	0.15
(2,241)	1:A:106:LEU:HD22	1:A:110:VAL:HG13	5	0.15
(2,241)	1:A:106:LEU:HD21	1:A:110:VAL:HG12	5	0.15
(2,241)	1:A:106:LEU:HD21	1:A:110:VAL:HG11	5	0.15
(2,241)	1:A:106:LEU:HD21	1:A:110:VAL:HG13	5	0.15
(2,241)	1:A:106:LEU:HD23	1:A:110:VAL:HG12	5	0.15
(2,241)	1:A:106:LEU:HD23	1:A:110:VAL:HG11	5	0.15
(2,241)	1:A:106:LEU:HD23	1:A:110:VAL:HG13	5	0.15
(2,240)	1:A:110:VAL:HG12	1:A:89:LEU:HB2	9	0.15
(2,240)	1:A:110:VAL:HG11	1:A:89:LEU:HB2	9	0.15
(2,240)	1:A:110:VAL:HG13	1:A:89:LEU:HB2	9	0.15
(2,195)	1:A:89:LEU:HG	1:A:89:LEU:HA	1	0.15
(2,195)	1:A:89:LEU:HG	1:A:89:LEU:HA	2	0.15
(2,195)	1:A:89:LEU:HG	1:A:89:LEU:HA	4	0.15
(2,195)	1:A:89:LEU:HG	1:A:89:LEU:HA	7	0.15
(2,1935)	1:A:78:LYS:H	1:A:75:LYS:HB2	1	0.15
(2,1935)	1:A:78:LYS:H	1:A:78:LYS:HB3	1	0.15
(2,1935)	1:A:78:LYS:H	1:A:75:LYS:HB2	5	0.15
(2,1935)	1:A:78:LYS:H	1:A:78:LYS:HB3	5	0.15
(2,1935)	1:A:78:LYS:H	1:A:75:LYS:HB2	8	0.15
(2,1935)	1:A:78:LYS:H	1:A:78:LYS:HB3	8	0.15
(2,1933)	1:A:92:SER:H	1:A:93:ILE:HD12	2	0.15
(2,1933)	1:A:92:SER:H	1:A:93:ILE:HD11	2	0.15
(2,1933)	1:A:92:SER:H	1:A:93:ILE:HD13	2	0.15
(2,1933)	1:A:92:SER:H	1:A:104:ILE:HD12	2	0.15
(2,1933)	1:A:92:SER:H	1:A:104:ILE:HD11	2	0.15
(2,1933)	1:A:92:SER:H	1:A:104:ILE:HD13	2	0.15
(2,1933)	1:A:92:SER:H	1:A:104:ILE:HG12	2	0.15
(2,1930)	1:A:92:SER:H	1:A:87:GLU:HB2	10	0.15
(2,1930)	1:A:92:SER:H	1:A:105:GLU:HG2	10	0.15
(2,1769)	1:A:121:ASP:HB2	1:A:82:PHE:HA	2	0.15
(2,1769)	1:A:121:ASP:HB2	1:A:115:MET:HA	2	0.15
(2,1769)	1:A:121:ASP:HB2	1:A:116:ASP:HA	2	0.15
(2,1769)	1:A:121:ASP:HB2	1:A:82:PHE:HA	7	0.15
(2,1769)	1:A:121:ASP:HB2	1:A:115:MET:HA	7	0.15
(2,1769)	1:A:121:ASP:HB2	1:A:116:ASP:HA	7	0.15
(2,1769)	1:A:121:ASP:HB2	1:A:82:PHE:HA	10	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1769)	1:A:121:ASP:HB2	1:A:115:MET:HA	10	0.15
(2,1769)	1:A:121:ASP:HB2	1:A:116:ASP:HA	10	0.15
(2,1714)	1:A:106:LEU:HB2	1:A:91:GLY:HA2	8	0.15
(2,1714)	1:A:106:LEU:HB3	1:A:91:GLY:HA2	8	0.15
(2,1714)	1:A:106:LEU:HG	1:A:91:GLY:HA2	8	0.15
(2,1702)	1:A:106:LEU:HB2	1:A:86:ILE:HB	6	0.15
(2,1702)	1:A:106:LEU:HB3	1:A:86:ILE:HB	6	0.15
(2,1702)	1:A:105:GLU:HG3	1:A:106:LEU:HB2	6	0.15
(2,1702)	1:A:105:GLU:HG3	1:A:106:LEU:HB3	6	0.15
(2,1702)	1:A:115:MET:HB2	1:A:106:LEU:HB2	6	0.15
(2,1702)	1:A:115:MET:HB2	1:A:106:LEU:HB3	6	0.15
(2,1702)	1:A:106:LEU:HB2	1:A:118:LEU:HB3	6	0.15
(2,1702)	1:A:106:LEU:HB3	1:A:118:LEU:HB3	6	0.15
(2,1702)	1:A:106:LEU:HB2	1:A:86:ILE:HB	8	0.15
(2,1702)	1:A:106:LEU:HB3	1:A:86:ILE:HB	8	0.15
(2,1702)	1:A:105:GLU:HG3	1:A:106:LEU:HB2	8	0.15
(2,1702)	1:A:105:GLU:HG3	1:A:106:LEU:HB3	8	0.15
(2,1702)	1:A:115:MET:HB2	1:A:106:LEU:HB2	8	0.15
(2,1702)	1:A:115:MET:HB2	1:A:106:LEU:HB3	8	0.15
(2,1702)	1:A:106:LEU:HB2	1:A:118:LEU:HB3	8	0.15
(2,1702)	1:A:106:LEU:HB3	1:A:118:LEU:HB3	8	0.15
(2,1657)	1:A:61:ARG:HG2	1:A:105:GLU:HA	3	0.15
(2,1657)	1:A:105:GLU:HA	1:A:106:LEU:HB2	3	0.15
(2,1657)	1:A:105:GLU:HA	1:A:106:LEU:HB3	3	0.15
(2,1648)	1:A:136:LYS:HG2	1:A:136:LYS:HA	2	0.15
(2,1648)	1:A:136:LYS:HG3	1:A:136:LYS:HA	2	0.15
(2,1635)	1:A:114:ASP:HA	1:A:115:MET:HA	1	0.15
(2,1635)	1:A:114:ASP:HA	1:A:118:LEU:HA	1	0.15
(2,1634)	1:A:123:LEU:HA	1:A:73:PHE:HD1	3	0.15
(2,1634)	1:A:123:LEU:HA	1:A:73:PHE:HD2	3	0.15
(2,1634)	1:A:123:LEU:HA	1:A:73:PHE:HE1	3	0.15
(2,1634)	1:A:123:LEU:HA	1:A:73:PHE:HE2	3	0.15
(2,1634)	1:A:123:LEU:HA	1:A:73:PHE:HD1	7	0.15
(2,1634)	1:A:123:LEU:HA	1:A:73:PHE:HD2	7	0.15
(2,1634)	1:A:123:LEU:HA	1:A:73:PHE:HE1	7	0.15
(2,1634)	1:A:123:LEU:HA	1:A:73:PHE:HE2	7	0.15
(2,1634)	1:A:123:LEU:HA	1:A:73:PHE:HD1	10	0.15
(2,1634)	1:A:123:LEU:HA	1:A:73:PHE:HD2	10	0.15
(2,1634)	1:A:123:LEU:HA	1:A:73:PHE:HE1	10	0.15
(2,1634)	1:A:123:LEU:HA	1:A:73:PHE:HE2	10	0.15
(2,1617)	1:A:79:SER:HA	1:A:75:LYS:HB2	6	0.15
(2,1617)	1:A:79:SER:HA	1:A:75:LYS:HB3	6	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1617)	1:A:79:SER:HA	1:A:78:LYS:HB3	6	0.15
(2,1617)	1:A:121:ASP:HA	1:A:123:LEU:HB3	6	0.15
(2,1617)	1:A:70:SER:HA	1:A:71:LYS:HD3	6	0.15
(2,1589)	1:A:112:GLU:HA	1:A:89:LEU:HD22	9	0.15
(2,1589)	1:A:112:GLU:HA	1:A:89:LEU:HD21	9	0.15
(2,1589)	1:A:112:GLU:HA	1:A:89:LEU:HD23	9	0.15
(2,1589)	1:A:112:GLU:HA	1:A:106:LEU:HD22	9	0.15
(2,1589)	1:A:112:GLU:HA	1:A:106:LEU:HD21	9	0.15
(2,1589)	1:A:112:GLU:HA	1:A:106:LEU:HD23	9	0.15
(2,1589)	1:A:112:GLU:HA	1:A:119:LEU:HD12	9	0.15
(2,1589)	1:A:112:GLU:HA	1:A:119:LEU:HD11	9	0.15
(2,1589)	1:A:112:GLU:HA	1:A:119:LEU:HD13	9	0.15
(2,1532)	1:A:88:GLU:HB3	1:A:81:SER:HA	5	0.15
(2,1532)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:83:SER:HA	5	0.15
(2,1510)	1:A:110:VAL:HA	1:A:89:LEU:HD22	1	0.15
(2,1510)	1:A:110:VAL:HA	1:A:89:LEU:HD21	1	0.15
(2,1510)	1:A:110:VAL:HA	1:A:89:LEU:HD23	1	0.15
(2,1510)	1:A:110:VAL:HA	1:A:106:LEU:HD22	1	0.15
(2,1510)	1:A:110:VAL:HA	1:A:106:LEU:HD21	1	0.15
(2,1510)	1:A:110:VAL:HA	1:A:106:LEU:HD23	1	0.15
(2,1506)	1:A:128:VAL:HB	1:A:70:SER:HB2	8	0.15
(2,1506)	1:A:66:GLU:HB2	1:A:70:SER:HB2	8	0.15
(2,1506)	1:A:128:VAL:HB	1:A:70:SER:HB3	8	0.15
(2,1506)	1:A:66:GLU:HB2	1:A:70:SER:HB3	8	0.15
(2,1506)	1:A:70:SER:HB3	1:A:71:LYS:HB3	8	0.15
(2,1462)	1:A:122:ILE:HD12	1:A:118:LEU:HB3	9	0.15
(2,1462)	1:A:122:ILE:HD11	1:A:118:LEU:HB3	9	0.15
(2,1462)	1:A:122:ILE:HD13	1:A:118:LEU:HB3	9	0.15
(2,1462)	1:A:122:ILE:HD12	1:A:103:MET:HB3	9	0.15
(2,1462)	1:A:122:ILE:HD11	1:A:103:MET:HB3	9	0.15
(2,1462)	1:A:122:ILE:HD13	1:A:103:MET:HB3	9	0.15
(2,1455)	1:A:93:ILE:HD12	1:A:78:LYS:HD3	5	0.15
(2,1455)	1:A:93:ILE:HD11	1:A:78:LYS:HD3	5	0.15
(2,1455)	1:A:93:ILE:HD13	1:A:78:LYS:HD3	5	0.15
(2,1455)	1:A:93:ILE:HD12	1:A:85:ARG:HG2	5	0.15
(2,1455)	1:A:93:ILE:HD11	1:A:85:ARG:HG2	5	0.15
(2,1455)	1:A:93:ILE:HD13	1:A:85:ARG:HG2	5	0.15
(2,1450)	1:A:122:ILE:HG22	1:A:70:SER:HB2	3	0.15
(2,1450)	1:A:122:ILE:HG21	1:A:70:SER:HB2	3	0.15
(2,1450)	1:A:122:ILE:HG23	1:A:70:SER:HB2	3	0.15
(2,1450)	1:A:122:ILE:HG22	1:A:119:LEU:HA	3	0.15
(2,1450)	1:A:122:ILE:HG21	1:A:119:LEU:HA	3	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1450)	1:A:122:ILE:HG23	1:A:119:LEU:HA	3	0.15
(2,1450)	1:A:122:ILE:HG22	1:A:70:SER:HB2	5	0.15
(2,1450)	1:A:122:ILE:HG21	1:A:70:SER:HB2	5	0.15
(2,1450)	1:A:122:ILE:HG23	1:A:70:SER:HB2	5	0.15
(2,1450)	1:A:122:ILE:HG22	1:A:119:LEU:HA	5	0.15
(2,1450)	1:A:122:ILE:HG21	1:A:119:LEU:HA	5	0.15
(2,1450)	1:A:122:ILE:HG23	1:A:119:LEU:HA	5	0.15
(2,1420)	1:A:64:VAL:HG22	1:A:62:LEU:HG	2	0.15
(2,1420)	1:A:64:VAL:HG21	1:A:62:LEU:HG	2	0.15
(2,1420)	1:A:64:VAL:HG23	1:A:62:LEU:HG	2	0.15
(2,1420)	1:A:93:ILE:HG13	1:A:64:VAL:HG22	2	0.15
(2,1420)	1:A:93:ILE:HG13	1:A:64:VAL:HG21	2	0.15
(2,1420)	1:A:93:ILE:HG13	1:A:64:VAL:HG23	2	0.15
(2,1420)	1:A:64:VAL:HG22	1:A:119:LEU:HB2	2	0.15
(2,1420)	1:A:64:VAL:HG21	1:A:119:LEU:HB2	2	0.15
(2,1420)	1:A:64:VAL:HG23	1:A:119:LEU:HB2	2	0.15
(2,1386)	1:A:109:THR:HG21	1:A:58:GLU:HG2	5	0.15
(2,1386)	1:A:109:THR:HG22	1:A:58:GLU:HG2	5	0.15
(2,1386)	1:A:109:THR:HG23	1:A:58:GLU:HG2	5	0.15
(2,1386)	1:A:84:THR:HG21	1:A:87:GLU:HB3	5	0.15
(2,1386)	1:A:84:THR:HG22	1:A:87:GLU:HB3	5	0.15
(2,1386)	1:A:84:THR:HG23	1:A:87:GLU:HB3	5	0.15
(2,1386)	1:A:84:THR:HG21	1:A:88:GLU:HB3	5	0.15
(2,1386)	1:A:84:THR:HG22	1:A:88:GLU:HB3	5	0.15
(2,1386)	1:A:84:THR:HG23	1:A:88:GLU:HB3	5	0.15
(2,1386)	1:A:109:THR:HG21	1:A:58:GLU:HG2	7	0.15
(2,1386)	1:A:109:THR:HG22	1:A:58:GLU:HG2	7	0.15
(2,1386)	1:A:109:THR:HG23	1:A:58:GLU:HG2	7	0.15
(2,1386)	1:A:84:THR:HG21	1:A:87:GLU:HB3	7	0.15
(2,1386)	1:A:84:THR:HG22	1:A:87:GLU:HB3	7	0.15
(2,1386)	1:A:84:THR:HG23	1:A:87:GLU:HB3	7	0.15
(2,1386)	1:A:84:THR:HG21	1:A:88:GLU:HB3	7	0.15
(2,1386)	1:A:84:THR:HG22	1:A:88:GLU:HB3	7	0.15
(2,1386)	1:A:84:THR:HG23	1:A:88:GLU:HB3	7	0.15
(2,1367)	1:A:65:THR:HG21	1:A:70:SER:HB3	2	0.15
(2,1367)	1:A:65:THR:HG22	1:A:70:SER:HB3	2	0.15
(2,1367)	1:A:65:THR:HG23	1:A:70:SER:HB3	2	0.15
(2,1367)	1:A:65:THR:HG21	1:A:100:GLY:HA2	2	0.15
(2,1367)	1:A:65:THR:HG22	1:A:100:GLY:HA2	2	0.15
(2,1367)	1:A:65:THR:HG23	1:A:100:GLY:HA2	2	0.15
(2,1345)	1:A:107:PRO:HB3	1:A:110:VAL:HG12	2	0.15
(2,1345)	1:A:107:PRO:HB3	1:A:110:VAL:HG11	2	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1345)	1:A:107:PRO:HB3	1:A:110:VAL:HG13	2	0.15
(2,1345)	1:A:110:VAL:HG12	1:A:114:ASP:HB2	2	0.15
(2,1345)	1:A:110:VAL:HG11	1:A:114:ASP:HB2	2	0.15
(2,1345)	1:A:110:VAL:HG13	1:A:114:ASP:HB2	2	0.15
(2,1325)	1:A:136:LYS:HG3	1:A:58:GLU:HG2	3	0.15
(2,1325)	1:A:71:LYS:HG3	1:A:68:GLN:HB3	3	0.15
(2,1325)	1:A:108:LYS:HG3	1:A:115:MET:HB3	3	0.15
(2,1314)	1:A:108:LYS:HG3	1:A:106:LEU:HD22	1	0.15
(2,1314)	1:A:108:LYS:HG3	1:A:106:LEU:HD21	1	0.15
(2,1314)	1:A:108:LYS:HG3	1:A:106:LEU:HD23	1	0.15
(2,1314)	1:A:108:LYS:HG3	1:A:106:LEU:HD12	1	0.15
(2,1314)	1:A:108:LYS:HG3	1:A:106:LEU:HD11	1	0.15
(2,1314)	1:A:108:LYS:HG3	1:A:106:LEU:HD13	1	0.15
(2,1273)	1:A:122:ILE:HG12	1:A:62:LEU:HG	2	0.15
(2,1273)	1:A:122:ILE:HG12	1:A:93:ILE:HG13	2	0.15
(2,1273)	1:A:122:ILE:HG12	1:A:125:ALA:HB2	2	0.15
(2,1273)	1:A:122:ILE:HG12	1:A:125:ALA:HB1	2	0.15
(2,1273)	1:A:122:ILE:HG12	1:A:125:ALA:HB3	2	0.15
(2,1256)	1:A:75:LYS:HD3	1:A:78:LYS:HE3	9	0.15
(2,1256)	1:A:136:LYS:HD2	1:A:59:MET:HG3	9	0.15
(2,1045)	1:A:89:LEU:H	1:A:89:LEU:HD22	5	0.15
(2,1045)	1:A:89:LEU:H	1:A:89:LEU:HD21	5	0.15
(2,1045)	1:A:89:LEU:H	1:A:89:LEU:HD23	5	0.15
(2,1042)	1:A:89:LEU:H	1:A:88:GLU:HB3	7	0.15
(1,47)	1:A:103:MET:H	1:A:95:PHE:HB3	2	0.15
(1,43)	1:A:132:ASP:HA	1:A:103:MET:HG2	3	0.15
(1,43)	1:A:132:ASP:HA	1:A:103:MET:HG2	4	0.15
(1,36)	1:A:85:ARG:HA	1:A:88:GLU:HB3	1	0.15
(2,64)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:135:VAL:HG22	2	0.14
(2,64)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:135:VAL:HG21	2	0.14
(2,64)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:135:VAL:HG23	2	0.14
(2,64)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:135:VAL:HG12	2	0.14
(2,64)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:135:VAL:HG11	2	0.14
(2,64)	1:A:107:PRO:HB2	1:A:135:VAL:HG13	2	0.14
(2,617)	1:A:103:MET:HG2	1:A:103:MET:HA	10	0.14
(2,523)	1:A:87:GLU:HG3	1:A:87:GLU:HA	1	0.14
(2,523)	1:A:87:GLU:HG3	1:A:87:GLU:HA	7	0.14
(2,488)	1:A:74:SER:HB3	1:A:95:PHE:HE1	4	0.14
(2,488)	1:A:74:SER:HB3	1:A:95:PHE:HE2	4	0.14
(2,451)	1:A:76:MET:HG3	1:A:73:PHE:HA	6	0.14
(2,353)	1:A:86:ILE:HG22	1:A:104:ILE:HG22	3	0.14
(2,353)	1:A:86:ILE:HG22	1:A:104:ILE:HG21	3	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,353)	1:A:86:ILE:HG22	1:A:104:ILE:HG23	3	0.14
(2,353)	1:A:86:ILE:HG21	1:A:104:ILE:HG22	3	0.14
(2,353)	1:A:86:ILE:HG21	1:A:104:ILE:HG21	3	0.14
(2,353)	1:A:86:ILE:HG21	1:A:104:ILE:HG23	3	0.14
(2,353)	1:A:86:ILE:HG23	1:A:104:ILE:HG22	3	0.14
(2,353)	1:A:86:ILE:HG23	1:A:104:ILE:HG21	3	0.14
(2,353)	1:A:86:ILE:HG23	1:A:104:ILE:HG23	3	0.14
(2,296)	1:A:101:VAL:HG22	1:A:94:SER:HB2	3	0.14
(2,296)	1:A:101:VAL:HG21	1:A:94:SER:HB2	3	0.14
(2,296)	1:A:101:VAL:HG23	1:A:94:SER:HB2	3	0.14
(2,296)	1:A:101:VAL:HG12	1:A:94:SER:HB2	3	0.14
(2,296)	1:A:101:VAL:HG11	1:A:94:SER:HB2	3	0.14
(2,296)	1:A:101:VAL:HG13	1:A:94:SER:HB2	3	0.14
(2,282)	1:A:97:THR:HG21	1:A:78:LYS:HE2	6	0.14
(2,282)	1:A:97:THR:HG22	1:A:78:LYS:HE2	6	0.14
(2,282)	1:A:97:THR:HG23	1:A:78:LYS:HE2	6	0.14
(2,28)	1:A:87:GLU:HG2	1:A:87:GLU:HB3	6	0.14
(2,275)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:102:THR:HB	3	0.14
(2,275)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:102:THR:HB	3	0.14
(2,275)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:102:THR:HB	3	0.14
(2,275)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:102:THR:HB	8	0.14
(2,275)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:102:THR:HB	8	0.14
(2,275)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:102:THR:HB	8	0.14
(2,195)	1:A:89:LEU:HG	1:A:89:LEU:HA	3	0.14
(2,195)	1:A:89:LEU:HG	1:A:89:LEU:HA	8	0.14
(2,195)	1:A:89:LEU:HG	1:A:89:LEU:HA	9	0.14
(2,1930)	1:A:92:SER:H	1:A:87:GLU:HB2	7	0.14
(2,1930)	1:A:92:SER:H	1:A:105:GLU:HG2	7	0.14
(2,1891)	1:A:116:ASP:H	1:A:115:MET:HB2	5	0.14
(2,1891)	1:A:116:ASP:H	1:A:117:GLN:HB2	5	0.14
(2,1891)	1:A:116:ASP:H	1:A:117:GLN:HB3	5	0.14
(2,1891)	1:A:116:ASP:H	1:A:115:MET:HB2	7	0.14
(2,1891)	1:A:116:ASP:H	1:A:117:GLN:HB2	7	0.14
(2,1891)	1:A:116:ASP:H	1:A:117:GLN:HB3	7	0.14
(2,1769)	1:A:121:ASP:HB2	1:A:82:PHE:HA	1	0.14
(2,1769)	1:A:121:ASP:HB2	1:A:115:MET:HA	1	0.14
(2,1769)	1:A:121:ASP:HB2	1:A:116:ASP:HA	1	0.14
(2,1765)	1:A:113:HIS:HA	1:A:116:ASP:HB3	3	0.14
(2,1765)	1:A:116:ASP:HA	1:A:116:ASP:HB3	3	0.14
(2,1714)	1:A:106:LEU:HB2	1:A:91:GLY:HA2	7	0.14
(2,1714)	1:A:106:LEU:HB3	1:A:91:GLY:HA2	7	0.14
(2,1714)	1:A:106:LEU:HG	1:A:91:GLY:HA2	7	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1702)	1:A:106:LEU:HB2	1:A:86:ILE:HB	2	0.14
(2,1702)	1:A:106:LEU:HB3	1:A:86:ILE:HB	2	0.14
(2,1702)	1:A:105:GLU:HG3	1:A:106:LEU:HB2	2	0.14
(2,1702)	1:A:105:GLU:HG3	1:A:106:LEU:HB3	2	0.14
(2,1702)	1:A:115:MET:HB2	1:A:106:LEU:HB2	2	0.14
(2,1702)	1:A:115:MET:HB2	1:A:106:LEU:HB3	2	0.14
(2,1702)	1:A:106:LEU:HB2	1:A:118:LEU:HB3	2	0.14
(2,1702)	1:A:106:LEU:HB3	1:A:118:LEU:HB3	2	0.14
(2,1702)	1:A:106:LEU:HB2	1:A:86:ILE:HB	7	0.14
(2,1702)	1:A:106:LEU:HB3	1:A:86:ILE:HB	7	0.14
(2,1702)	1:A:105:GLU:HG3	1:A:106:LEU:HB2	7	0.14
(2,1702)	1:A:105:GLU:HG3	1:A:106:LEU:HB3	7	0.14
(2,1702)	1:A:115:MET:HB2	1:A:106:LEU:HB2	7	0.14
(2,1702)	1:A:115:MET:HB2	1:A:106:LEU:HB3	7	0.14
(2,1702)	1:A:106:LEU:HB2	1:A:118:LEU:HB3	7	0.14
(2,1702)	1:A:106:LEU:HB3	1:A:118:LEU:HB3	7	0.14
(2,1702)	1:A:106:LEU:HB2	1:A:86:ILE:HB	9	0.14
(2,1702)	1:A:106:LEU:HB3	1:A:86:ILE:HB	9	0.14
(2,1702)	1:A:105:GLU:HG3	1:A:106:LEU:HB2	9	0.14
(2,1702)	1:A:105:GLU:HG3	1:A:106:LEU:HB3	9	0.14
(2,1702)	1:A:115:MET:HB2	1:A:106:LEU:HB2	9	0.14
(2,1702)	1:A:115:MET:HB2	1:A:106:LEU:HB3	9	0.14
(2,1702)	1:A:106:LEU:HB2	1:A:118:LEU:HB3	9	0.14
(2,1702)	1:A:106:LEU:HB3	1:A:118:LEU:HB3	9	0.14
(2,1675)	1:A:103:MET:HA	1:A:96:LEU:HD22	7	0.14
(2,1675)	1:A:103:MET:HA	1:A:96:LEU:HD21	7	0.14
(2,1675)	1:A:103:MET:HA	1:A:96:LEU:HD23	7	0.14
(2,1675)	1:A:101:VAL:HG22	1:A:103:MET:HA	7	0.14
(2,1675)	1:A:101:VAL:HG21	1:A:103:MET:HA	7	0.14
(2,1675)	1:A:101:VAL:HG23	1:A:103:MET:HA	7	0.14
(2,1675)	1:A:101:VAL:HG12	1:A:103:MET:HA	7	0.14
(2,1675)	1:A:101:VAL:HG11	1:A:103:MET:HA	7	0.14
(2,1675)	1:A:101:VAL:HG13	1:A:103:MET:HA	7	0.14
(2,1635)	1:A:114:ASP:HA	1:A:115:MET:HA	3	0.14
(2,1635)	1:A:114:ASP:HA	1:A:118:LEU:HA	3	0.14
(2,1635)	1:A:114:ASP:HA	1:A:115:MET:HA	4	0.14
(2,1635)	1:A:114:ASP:HA	1:A:118:LEU:HA	4	0.14
(2,1634)	1:A:123:LEU:HA	1:A:73:PHE:HD1	4	0.14
(2,1634)	1:A:123:LEU:HA	1:A:73:PHE:HD2	4	0.14
(2,1634)	1:A:123:LEU:HA	1:A:73:PHE:HE1	4	0.14
(2,1634)	1:A:123:LEU:HA	1:A:73:PHE:HE2	4	0.14
(2,1626)	1:A:118:LEU:HA	1:A:85:ARG:HG2	3	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1626)	1:A:69:GLU:HA	1:A:67:LYS:HG3	3	0.14
(2,1615)	1:A:64:VAL:HB	1:A:73:PHE:HZ	8	0.14
(2,1615)	1:A:73:PHE:HZ	1:A:76:MET:HB2	8	0.14
(2,1572)	1:A:82:PHE:HE1	1:A:77:ALA:HA	7	0.14
(2,1572)	1:A:82:PHE:HE2	1:A:77:ALA:HA	7	0.14
(2,1572)	1:A:82:PHE:HE1	1:A:122:ILE:HA	7	0.14
(2,1572)	1:A:82:PHE:HE2	1:A:122:ILE:HA	7	0.14
(2,1510)	1:A:110:VAL:HA	1:A:89:LEU:HD22	3	0.14
(2,1510)	1:A:110:VAL:HA	1:A:89:LEU:HD21	3	0.14
(2,1510)	1:A:110:VAL:HA	1:A:89:LEU:HD23	3	0.14
(2,1510)	1:A:110:VAL:HA	1:A:106:LEU:HD22	3	0.14
(2,1510)	1:A:110:VAL:HA	1:A:106:LEU:HD21	3	0.14
(2,1510)	1:A:110:VAL:HA	1:A:106:LEU:HD23	3	0.14
(2,1462)	1:A:122:ILE:HD12	1:A:118:LEU:HB3	5	0.14
(2,1462)	1:A:122:ILE:HD11	1:A:118:LEU:HB3	5	0.14
(2,1462)	1:A:122:ILE:HD13	1:A:118:LEU:HB3	5	0.14
(2,1462)	1:A:122:ILE:HD12	1:A:103:MET:HB3	5	0.14
(2,1462)	1:A:122:ILE:HD11	1:A:103:MET:HB3	5	0.14
(2,1462)	1:A:122:ILE:HD13	1:A:103:MET:HB3	5	0.14
(2,1462)	1:A:122:ILE:HD12	1:A:118:LEU:HB3	10	0.14
(2,1462)	1:A:122:ILE:HD11	1:A:118:LEU:HB3	10	0.14
(2,1462)	1:A:122:ILE:HD13	1:A:118:LEU:HB3	10	0.14
(2,1462)	1:A:122:ILE:HD12	1:A:103:MET:HB3	10	0.14
(2,1462)	1:A:122:ILE:HD11	1:A:103:MET:HB3	10	0.14
(2,1462)	1:A:122:ILE:HD13	1:A:103:MET:HB3	10	0.14
(2,1450)	1:A:122:ILE:HG22	1:A:70:SER:HB2	1	0.14
(2,1450)	1:A:122:ILE:HG21	1:A:70:SER:HB2	1	0.14
(2,1450)	1:A:122:ILE:HG23	1:A:70:SER:HB2	1	0.14
(2,1450)	1:A:122:ILE:HG22	1:A:119:LEU:HA	1	0.14
(2,1450)	1:A:122:ILE:HG21	1:A:119:LEU:HA	1	0.14
(2,1450)	1:A:122:ILE:HG23	1:A:119:LEU:HA	1	0.14
(2,1420)	1:A:64:VAL:HG22	1:A:62:LEU:HG	5	0.14
(2,1420)	1:A:64:VAL:HG21	1:A:62:LEU:HG	5	0.14
(2,1420)	1:A:64:VAL:HG23	1:A:62:LEU:HG	5	0.14
(2,1420)	1:A:93:ILE:HG13	1:A:64:VAL:HG22	5	0.14
(2,1420)	1:A:93:ILE:HG13	1:A:64:VAL:HG21	5	0.14
(2,1420)	1:A:93:ILE:HG13	1:A:64:VAL:HG23	5	0.14
(2,1420)	1:A:64:VAL:HG22	1:A:119:LEU:HB2	5	0.14
(2,1420)	1:A:64:VAL:HG21	1:A:119:LEU:HB2	5	0.14
(2,1420)	1:A:64:VAL:HG23	1:A:119:LEU:HB2	5	0.14
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:130:GLY:HA2	2	0.14
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:130:GLY:HA2	2	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:130:GLY:HA2	2	0.14
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:130:GLY:HA2	2	0.14
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:130:GLY:HA2	2	0.14
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:130:GLY:HA2	2	0.14
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:126:GLY:HA2	2	0.14
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:126:GLY:HA2	2	0.14
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:126:GLY:HA2	2	0.14
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:126:GLY:HA2	2	0.14
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:126:GLY:HA2	2	0.14
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:126:GLY:HA2	2	0.14
(2,1380)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:128:VAL:HG22	6	0.14
(2,1380)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:128:VAL:HG21	6	0.14
(2,1380)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:128:VAL:HG23	6	0.14
(2,1380)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:128:VAL:HG12	6	0.14
(2,1380)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:128:VAL:HG11	6	0.14
(2,1380)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:128:VAL:HG13	6	0.14
(2,1380)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:128:VAL:HG22	6	0.14
(2,1380)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:128:VAL:HG21	6	0.14
(2,1380)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:128:VAL:HG23	6	0.14
(2,1380)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:128:VAL:HG12	6	0.14
(2,1380)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:128:VAL:HG11	6	0.14
(2,1380)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:128:VAL:HG13	6	0.14
(2,1380)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:128:VAL:HG22	6	0.14
(2,1380)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:128:VAL:HG21	6	0.14
(2,1380)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:128:VAL:HG23	6	0.14
(2,1380)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:128:VAL:HG12	6	0.14
(2,1380)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:128:VAL:HG11	6	0.14
(2,1380)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:128:VAL:HG13	6	0.14
(2,1380)	1:A:129:VAL:HG12	1:A:64:VAL:HG12	6	0.14
(2,1380)	1:A:129:VAL:HG12	1:A:64:VAL:HG11	6	0.14
(2,1380)	1:A:129:VAL:HG12	1:A:64:VAL:HG13	6	0.14
(2,1380)	1:A:129:VAL:HG11	1:A:64:VAL:HG12	6	0.14
(2,1380)	1:A:129:VAL:HG11	1:A:64:VAL:HG11	6	0.14
(2,1380)	1:A:129:VAL:HG11	1:A:64:VAL:HG13	6	0.14
(2,1380)	1:A:129:VAL:HG13	1:A:64:VAL:HG12	6	0.14
(2,1380)	1:A:129:VAL:HG13	1:A:64:VAL:HG11	6	0.14
(2,1380)	1:A:129:VAL:HG13	1:A:64:VAL:HG13	6	0.14
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:123:LEU:HA	9	0.14
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:123:LEU:HA	9	0.14
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:123:LEU:HA	9	0.14
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:129:VAL:HA	9	0.14
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:129:VAL:HA	9	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:129:VAL:HA	9	0.14
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:101:VAL:HA	9	0.14
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:101:VAL:HA	9	0.14
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:101:VAL:HA	9	0.14
(2,1360)	1:A:119:LEU:HD22	1:A:115:MET:HG3	10	0.14
(2,1360)	1:A:119:LEU:HD21	1:A:115:MET:HG3	10	0.14
(2,1360)	1:A:119:LEU:HD23	1:A:115:MET:HG3	10	0.14
(2,1360)	1:A:63:MET:HB2	1:A:96:LEU:HD22	10	0.14
(2,1360)	1:A:63:MET:HB2	1:A:96:LEU:HD21	10	0.14
(2,1360)	1:A:63:MET:HB2	1:A:96:LEU:HD23	10	0.14
(2,1360)	1:A:63:MET:HB3	1:A:96:LEU:HD22	10	0.14
(2,1360)	1:A:63:MET:HB3	1:A:96:LEU:HD21	10	0.14
(2,1360)	1:A:63:MET:HB3	1:A:96:LEU:HD23	10	0.14
(2,1325)	1:A:136:LYS:HG3	1:A:58:GLU:HG2	5	0.14
(2,1325)	1:A:71:LYS:HG3	1:A:68:GLN:HB3	5	0.14
(2,1325)	1:A:108:LYS:HG3	1:A:115:MET:HB3	5	0.14
(2,1317)	1:A:78:LYS:HG3	1:A:78:LYS:HA	2	0.14
(2,1317)	1:A:85:ARG:HG2	1:A:82:PHE:HA	2	0.14
(2,1288)	1:A:137:LEU:HG	1:A:131:LEU:HA	3	0.14
(2,1288)	1:A:137:LEU:HG	1:A:132:ASP:HA	3	0.14
(2,1241)	1:A:120:HIS:HB3	1:A:119:LEU:HD12	4	0.14
(2,1241)	1:A:120:HIS:HB3	1:A:119:LEU:HD11	4	0.14
(2,1241)	1:A:120:HIS:HB3	1:A:119:LEU:HD13	4	0.14
(2,1241)	1:A:120:HIS:HB3	1:A:123:LEU:HD22	4	0.14
(2,1241)	1:A:120:HIS:HB3	1:A:123:LEU:HD21	4	0.14
(2,1241)	1:A:120:HIS:HB3	1:A:123:LEU:HD23	4	0.14
(2,1171)	1:A:58:GLU:HG2	1:A:58:GLU:HB3	2	0.14
(2,1171)	1:A:58:GLU:HG2	1:A:107:PRO:HB2	2	0.14
(2,1171)	1:A:88:GLU:HG2	1:A:88:GLU:HB2	2	0.14
(2,1171)	1:A:112:GLU:HG2	1:A:112:GLU:HB3	2	0.14
(2,1171)	1:A:112:GLU:HG3	1:A:112:GLU:HB2	2	0.14
(2,1171)	1:A:58:GLU:HG2	1:A:58:GLU:HB3	3	0.14
(2,1171)	1:A:58:GLU:HG2	1:A:107:PRO:HB2	3	0.14
(2,1171)	1:A:88:GLU:HG2	1:A:88:GLU:HB2	3	0.14
(2,1171)	1:A:112:GLU:HG2	1:A:112:GLU:HB3	3	0.14
(2,1171)	1:A:112:GLU:HG3	1:A:112:GLU:HB2	3	0.14
(2,1171)	1:A:58:GLU:HG2	1:A:58:GLU:HB3	8	0.14
(2,1171)	1:A:58:GLU:HG2	1:A:107:PRO:HB2	8	0.14
(2,1171)	1:A:88:GLU:HG2	1:A:88:GLU:HB2	8	0.14
(2,1171)	1:A:112:GLU:HG2	1:A:112:GLU:HB3	8	0.14
(2,1171)	1:A:112:GLU:HG3	1:A:112:GLU:HB2	8	0.14
(2,1144)	1:A:126:GLY:H	1:A:127:GLY:HA2	4	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1144)	1:A:126:GLY:H	1:A:127:GLY:HA2	6	0.14
(2,1144)	1:A:126:GLY:H	1:A:127:GLY:HA2	7	0.14
(1,47)	1:A:103:MET:H	1:A:95:PHE:HB3	6	0.14
(1,47)	1:A:103:MET:H	1:A:95:PHE:HB3	7	0.14
(2,956)	1:A:101:VAL:H	1:A:65:THR:HG21	10	0.13
(2,956)	1:A:101:VAL:H	1:A:65:THR:HG22	10	0.13
(2,956)	1:A:101:VAL:H	1:A:65:THR:HG23	10	0.13
(2,937)	1:A:108:LYS:H	1:A:107:PRO:HB3	3	0.13
(2,918)	1:A:71:LYS:H	1:A:67:LYS:HA	7	0.13
(2,893)	1:A:115:MET:H	1:A:114:ASP:HB3	5	0.13
(2,642)	1:A:113:HIS:HB2	1:A:113:HIS:HD2	10	0.13
(2,617)	1:A:103:MET:HG2	1:A:103:MET:HA	3	0.13
(2,617)	1:A:103:MET:HG2	1:A:103:MET:HA	9	0.13
(2,604)	1:A:131:LEU:HD22	1:A:131:LEU:HA	1	0.13
(2,604)	1:A:131:LEU:HD21	1:A:131:LEU:HA	1	0.13
(2,604)	1:A:131:LEU:HD23	1:A:131:LEU:HA	1	0.13
(2,583)	1:A:136:LYS:HA	1:A:133:SER:HB2	2	0.13
(2,523)	1:A:87:GLU:HG3	1:A:87:GLU:HA	2	0.13
(2,521)	1:A:86:ILE:HG22	1:A:87:GLU:HA	9	0.13
(2,521)	1:A:86:ILE:HG21	1:A:87:GLU:HA	9	0.13
(2,521)	1:A:86:ILE:HG23	1:A:87:GLU:HA	9	0.13
(2,484)	1:A:86:ILE:HG13	1:A:86:ILE:HA	10	0.13
(2,375)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:122:ILE:HD12	8	0.13
(2,375)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:122:ILE:HD11	8	0.13
(2,375)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:122:ILE:HD13	8	0.13
(2,375)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:122:ILE:HD12	8	0.13
(2,375)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:122:ILE:HD11	8	0.13
(2,375)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:122:ILE:HD13	8	0.13
(2,375)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:122:ILE:HD12	8	0.13
(2,375)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:122:ILE:HD11	8	0.13
(2,375)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:122:ILE:HD13	8	0.13
(2,353)	1:A:86:ILE:HG22	1:A:104:ILE:HG22	6	0.13
(2,353)	1:A:86:ILE:HG22	1:A:104:ILE:HG21	6	0.13
(2,353)	1:A:86:ILE:HG22	1:A:104:ILE:HG23	6	0.13
(2,353)	1:A:86:ILE:HG21	1:A:104:ILE:HG22	6	0.13
(2,353)	1:A:86:ILE:HG21	1:A:104:ILE:HG21	6	0.13
(2,353)	1:A:86:ILE:HG21	1:A:104:ILE:HG23	6	0.13
(2,353)	1:A:86:ILE:HG23	1:A:104:ILE:HG22	6	0.13
(2,353)	1:A:86:ILE:HG23	1:A:104:ILE:HG21	6	0.13
(2,353)	1:A:86:ILE:HG23	1:A:104:ILE:HG23	6	0.13
(2,343)	1:A:86:ILE:HG22	1:A:91:GLY:HA2	9	0.13
(2,343)	1:A:86:ILE:HG21	1:A:91:GLY:HA2	9	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,343)	1:A:86:ILE:HG23	1:A:91:GLY:HA2	9	0.13
(2,331)	1:A:125:ALA:HB2	1:A:121:ASP:HB3	5	0.13
(2,331)	1:A:125:ALA:HB1	1:A:121:ASP:HB3	5	0.13
(2,331)	1:A:125:ALA:HB3	1:A:121:ASP:HB3	5	0.13
(2,267)	1:A:110:VAL:HG22	1:A:114:ASP:HB3	5	0.13
(2,267)	1:A:110:VAL:HG21	1:A:114:ASP:HB3	5	0.13
(2,267)	1:A:110:VAL:HG23	1:A:114:ASP:HB3	5	0.13
(2,246)	1:A:123:LEU:HD12	1:A:127:GLY:HA2	1	0.13
(2,246)	1:A:123:LEU:HD11	1:A:127:GLY:HA2	1	0.13
(2,246)	1:A:123:LEU:HD13	1:A:127:GLY:HA2	1	0.13
(2,241)	1:A:106:LEU:HD22	1:A:110:VAL:HG12	10	0.13
(2,241)	1:A:106:LEU:HD22	1:A:110:VAL:HG11	10	0.13
(2,241)	1:A:106:LEU:HD22	1:A:110:VAL:HG13	10	0.13
(2,241)	1:A:106:LEU:HD21	1:A:110:VAL:HG12	10	0.13
(2,241)	1:A:106:LEU:HD21	1:A:110:VAL:HG11	10	0.13
(2,241)	1:A:106:LEU:HD21	1:A:110:VAL:HG13	10	0.13
(2,241)	1:A:106:LEU:HD23	1:A:110:VAL:HG12	10	0.13
(2,241)	1:A:106:LEU:HD23	1:A:110:VAL:HG11	10	0.13
(2,241)	1:A:106:LEU:HD23	1:A:110:VAL:HG13	10	0.13
(2,1930)	1:A:92:SER:H	1:A:87:GLU:HB2	3	0.13
(2,1930)	1:A:92:SER:H	1:A:105:GLU:HG2	3	0.13
(2,1930)	1:A:92:SER:H	1:A:87:GLU:HB2	9	0.13
(2,1930)	1:A:92:SER:H	1:A:105:GLU:HG2	9	0.13
(2,1915)	1:A:79:SER:H	1:A:78:LYS:HD2	6	0.13
(2,1915)	1:A:79:SER:H	1:A:78:LYS:HD3	6	0.13
(2,1915)	1:A:79:SER:H	1:A:78:LYS:HG3	6	0.13
(2,1892)	1:A:65:THR:H	1:A:101:VAL:HB	5	0.13
(2,1892)	1:A:65:THR:H	1:A:128:VAL:HB	5	0.13
(2,1891)	1:A:116:ASP:H	1:A:115:MET:HB2	9	0.13
(2,1891)	1:A:116:ASP:H	1:A:117:GLN:HB2	9	0.13
(2,1891)	1:A:116:ASP:H	1:A:117:GLN:HB3	9	0.13
(2,186)	1:A:96:LEU:HG	1:A:103:MET:HG2	1	0.13
(2,186)	1:A:96:LEU:HG	1:A:103:MET:HG2	3	0.13
(2,1810)	1:A:136:LYS:H	1:A:136:LYS:HD2	7	0.13
(2,1810)	1:A:136:LYS:H	1:A:136:LYS:HD3	7	0.13
(2,1810)	1:A:136:LYS:H	1:A:136:LYS:HD2	9	0.13
(2,1810)	1:A:136:LYS:H	1:A:136:LYS:HD3	9	0.13
(2,1774)	1:A:63:MET:HB2	1:A:104:ILE:HB	1	0.13
(2,1774)	1:A:104:ILE:HB	1:A:87:GLU:HG2	1	0.13
(2,1774)	1:A:104:ILE:HB	1:A:103:MET:HG3	1	0.13
(2,1763)	1:A:82:PHE:HB2	1:A:76:MET:HB2	7	0.13
(2,1763)	1:A:82:PHE:HB2	1:A:85:ARG:HB3	7	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1763)	1:A:121:ASP:HB3	1:A:76:MET:HB2	7	0.13
(2,1763)	1:A:121:ASP:HB3	1:A:85:ARG:HB2	7	0.13
(2,1763)	1:A:121:ASP:HB3	1:A:85:ARG:HB3	7	0.13
(2,1738)	1:A:95:PHE:HD1	1:A:71:LYS:HE2	3	0.13
(2,1738)	1:A:95:PHE:HD2	1:A:71:LYS:HE2	3	0.13
(2,1738)	1:A:71:LYS:HE2	1:A:95:PHE:HE1	3	0.13
(2,1738)	1:A:71:LYS:HE2	1:A:95:PHE:HE2	3	0.13
(2,1738)	1:A:95:PHE:HD1	1:A:71:LYS:HE3	3	0.13
(2,1738)	1:A:95:PHE:HD2	1:A:71:LYS:HE3	3	0.13
(2,1738)	1:A:71:LYS:HE3	1:A:95:PHE:HE1	3	0.13
(2,1738)	1:A:71:LYS:HE3	1:A:95:PHE:HE2	3	0.13
(2,1738)	1:A:75:LYS:HE2	1:A:95:PHE:HE1	3	0.13
(2,1738)	1:A:75:LYS:HE2	1:A:95:PHE:HE2	3	0.13
(2,1738)	1:A:75:LYS:HE3	1:A:95:PHE:HE1	3	0.13
(2,1738)	1:A:75:LYS:HE3	1:A:95:PHE:HE2	3	0.13
(2,1714)	1:A:106:LEU:HB2	1:A:91:GLY:HA2	9	0.13
(2,1714)	1:A:106:LEU:HB3	1:A:91:GLY:HA2	9	0.13
(2,1714)	1:A:106:LEU:HG	1:A:91:GLY:HA2	9	0.13
(2,1708)	1:A:91:GLY:HA3	1:A:58:GLU:HA	3	0.13
(2,1708)	1:A:91:GLY:HA3	1:A:60:THR:HB	3	0.13
(2,1708)	1:A:91:GLY:HA3	1:A:89:LEU:HA	3	0.13
(2,1705)	1:A:126:GLY:HA3	1:A:69:GLU:HA	4	0.13
(2,1705)	1:A:126:GLY:HA3	1:A:73:PHE:HA	4	0.13
(2,1705)	1:A:126:GLY:HA3	1:A:124:ALA:HA	4	0.13
(2,1702)	1:A:106:LEU:HB2	1:A:86:ILE:HB	4	0.13
(2,1702)	1:A:106:LEU:HB3	1:A:86:ILE:HB	4	0.13
(2,1702)	1:A:105:GLU:HG3	1:A:106:LEU:HB2	4	0.13
(2,1702)	1:A:105:GLU:HG3	1:A:106:LEU:HB3	4	0.13
(2,1702)	1:A:115:MET:HB2	1:A:106:LEU:HB2	4	0.13
(2,1702)	1:A:115:MET:HB2	1:A:106:LEU:HB3	4	0.13
(2,1702)	1:A:106:LEU:HB2	1:A:118:LEU:HB3	4	0.13
(2,1702)	1:A:106:LEU:HB3	1:A:118:LEU:HB3	4	0.13
(2,167)	1:A:61:ARG:HG2	1:A:105:GLU:HA	4	0.13
(2,167)	1:A:61:ARG:HG2	1:A:105:GLU:HA	9	0.13
(2,1657)	1:A:61:ARG:HG2	1:A:105:GLU:HA	10	0.13
(2,1657)	1:A:105:GLU:HA	1:A:106:LEU:HB2	10	0.13
(2,1657)	1:A:105:GLU:HA	1:A:106:LEU:HB3	10	0.13
(2,1617)	1:A:79:SER:HA	1:A:75:LYS:HB2	8	0.13
(2,1617)	1:A:79:SER:HA	1:A:75:LYS:HB3	8	0.13
(2,1617)	1:A:79:SER:HA	1:A:78:LYS:HB3	8	0.13
(2,1617)	1:A:121:ASP:HA	1:A:123:LEU:HB3	8	0.13
(2,1617)	1:A:70:SER:HA	1:A:71:LYS:HD3	8	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1589)	1:A:112:GLU:HA	1:A:89:LEU:HD22	3	0.13
(2,1589)	1:A:112:GLU:HA	1:A:89:LEU:HD21	3	0.13
(2,1589)	1:A:112:GLU:HA	1:A:89:LEU:HD23	3	0.13
(2,1589)	1:A:112:GLU:HA	1:A:106:LEU:HD22	3	0.13
(2,1589)	1:A:112:GLU:HA	1:A:106:LEU:HD21	3	0.13
(2,1589)	1:A:112:GLU:HA	1:A:106:LEU:HD23	3	0.13
(2,1589)	1:A:112:GLU:HA	1:A:119:LEU:HD12	3	0.13
(2,1589)	1:A:112:GLU:HA	1:A:119:LEU:HD11	3	0.13
(2,1589)	1:A:112:GLU:HA	1:A:119:LEU:HD13	3	0.13
(2,1589)	1:A:112:GLU:HA	1:A:89:LEU:HD22	5	0.13
(2,1589)	1:A:112:GLU:HA	1:A:89:LEU:HD21	5	0.13
(2,1589)	1:A:112:GLU:HA	1:A:89:LEU:HD23	5	0.13
(2,1589)	1:A:112:GLU:HA	1:A:106:LEU:HD22	5	0.13
(2,1589)	1:A:112:GLU:HA	1:A:106:LEU:HD21	5	0.13
(2,1589)	1:A:112:GLU:HA	1:A:106:LEU:HD23	5	0.13
(2,1589)	1:A:112:GLU:HA	1:A:119:LEU:HD12	5	0.13
(2,1589)	1:A:112:GLU:HA	1:A:119:LEU:HD11	5	0.13
(2,1589)	1:A:112:GLU:HA	1:A:119:LEU:HD13	5	0.13
(2,1540)	1:A:135:VAL:HA	1:A:109:THR:H	2	0.13
(2,1540)	1:A:135:VAL:HA	1:A:110:VAL:H	2	0.13
(2,1420)	1:A:64:VAL:HG22	1:A:62:LEU:HG	6	0.13
(2,1420)	1:A:64:VAL:HG21	1:A:62:LEU:HG	6	0.13
(2,1420)	1:A:64:VAL:HG23	1:A:62:LEU:HG	6	0.13
(2,1420)	1:A:93:ILE:HG13	1:A:64:VAL:HG22	6	0.13
(2,1420)	1:A:93:ILE:HG13	1:A:64:VAL:HG21	6	0.13
(2,1420)	1:A:93:ILE:HG13	1:A:64:VAL:HG23	6	0.13
(2,1420)	1:A:64:VAL:HG22	1:A:119:LEU:HB2	6	0.13
(2,1420)	1:A:64:VAL:HG21	1:A:119:LEU:HB2	6	0.13
(2,1420)	1:A:64:VAL:HG23	1:A:119:LEU:HB2	6	0.13
(2,1420)	1:A:64:VAL:HG22	1:A:62:LEU:HG	9	0.13
(2,1420)	1:A:64:VAL:HG21	1:A:62:LEU:HG	9	0.13
(2,1420)	1:A:64:VAL:HG23	1:A:62:LEU:HG	9	0.13
(2,1420)	1:A:93:ILE:HG13	1:A:64:VAL:HG22	9	0.13
(2,1420)	1:A:93:ILE:HG13	1:A:64:VAL:HG21	9	0.13
(2,1420)	1:A:93:ILE:HG13	1:A:64:VAL:HG23	9	0.13
(2,1420)	1:A:64:VAL:HG22	1:A:119:LEU:HB2	9	0.13
(2,1420)	1:A:64:VAL:HG21	1:A:119:LEU:HB2	9	0.13
(2,1420)	1:A:64:VAL:HG23	1:A:119:LEU:HB2	9	0.13
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:123:LEU:HA	2	0.13
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:123:LEU:HA	2	0.13
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:123:LEU:HA	2	0.13
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:129:VAL:HA	2	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:129:VAL:HA	2	0.13
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:129:VAL:HA	2	0.13
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:101:VAL:HA	2	0.13
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:101:VAL:HA	2	0.13
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:101:VAL:HA	2	0.13
(2,1332)	1:A:137:LEU:HD12	1:A:133:SER:HB3	2	0.13
(2,1332)	1:A:137:LEU:HD11	1:A:133:SER:HB3	2	0.13
(2,1332)	1:A:137:LEU:HD13	1:A:133:SER:HB3	2	0.13
(2,1332)	1:A:119:LEU:HD12	1:A:119:LEU:HA	2	0.13
(2,1332)	1:A:119:LEU:HD11	1:A:119:LEU:HA	2	0.13
(2,1332)	1:A:119:LEU:HD13	1:A:119:LEU:HA	2	0.13
(2,1331)	1:A:123:LEU:HD22	1:A:123:LEU:HA	8	0.13
(2,1331)	1:A:123:LEU:HD21	1:A:123:LEU:HA	8	0.13
(2,1331)	1:A:123:LEU:HD23	1:A:123:LEU:HA	8	0.13
(2,1331)	1:A:137:LEU:HD12	1:A:137:LEU:HA	8	0.13
(2,1331)	1:A:137:LEU:HD11	1:A:137:LEU:HA	8	0.13
(2,1331)	1:A:137:LEU:HD13	1:A:137:LEU:HA	8	0.13
(2,1331)	1:A:119:LEU:HD12	1:A:60:THR:HB	8	0.13
(2,1331)	1:A:119:LEU:HD11	1:A:60:THR:HB	8	0.13
(2,1331)	1:A:119:LEU:HD13	1:A:60:THR:HB	8	0.13
(2,1317)	1:A:78:LYS:HG3	1:A:78:LYS:HA	6	0.13
(2,1317)	1:A:85:ARG:HG2	1:A:82:PHE:HA	6	0.13
(2,1273)	1:A:122:ILE:HG12	1:A:62:LEU:HG	4	0.13
(2,1273)	1:A:122:ILE:HG12	1:A:93:ILE:HG13	4	0.13
(2,1273)	1:A:122:ILE:HG12	1:A:125:ALA:HB2	4	0.13
(2,1273)	1:A:122:ILE:HG12	1:A:125:ALA:HB1	4	0.13
(2,1273)	1:A:122:ILE:HG12	1:A:125:ALA:HB3	4	0.13
(2,1273)	1:A:122:ILE:HG12	1:A:62:LEU:HG	5	0.13
(2,1273)	1:A:122:ILE:HG12	1:A:93:ILE:HG13	5	0.13
(2,1273)	1:A:122:ILE:HG12	1:A:125:ALA:HB2	5	0.13
(2,1273)	1:A:122:ILE:HG12	1:A:125:ALA:HB1	5	0.13
(2,1273)	1:A:122:ILE:HG12	1:A:125:ALA:HB3	5	0.13
(2,1273)	1:A:122:ILE:HG12	1:A:62:LEU:HG	7	0.13
(2,1273)	1:A:122:ILE:HG12	1:A:93:ILE:HG13	7	0.13
(2,1273)	1:A:122:ILE:HG12	1:A:125:ALA:HB2	7	0.13
(2,1273)	1:A:122:ILE:HG12	1:A:125:ALA:HB1	7	0.13
(2,1273)	1:A:122:ILE:HG12	1:A:125:ALA:HB3	7	0.13
(2,1269)	1:A:78:LYS:HD2	1:A:75:LYS:HE2	6	0.13
(2,1269)	1:A:78:LYS:HD2	1:A:75:LYS:HE3	6	0.13
(2,1269)	1:A:78:LYS:HD2	1:A:75:LYS:H	6	0.13
(2,1269)	1:A:78:LYS:HD3	1:A:75:LYS:HE3	6	0.13
(2,1249)	1:A:117:GLN:HB2	1:A:113:HIS:HA	5	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1249)	1:A:117:GLN:HB3	1:A:113:HIS:HA	5	0.13
(2,1249)	1:A:117:GLN:HB2	1:A:114:ASP:HA	5	0.13
(2,1249)	1:A:117:GLN:HB3	1:A:114:ASP:HA	5	0.13
(2,1225)	1:A:115:MET:HB2	1:A:107:PRO:HD2	3	0.13
(2,1225)	1:A:115:MET:HB2	1:A:107:PRO:HD3	3	0.13
(2,1225)	1:A:115:MET:HB2	1:A:107:PRO:HD2	5	0.13
(2,1225)	1:A:115:MET:HB2	1:A:107:PRO:HD3	5	0.13
(2,1212)	1:A:128:VAL:HB	1:A:65:THR:HG21	3	0.13
(2,1212)	1:A:128:VAL:HB	1:A:65:THR:HG22	3	0.13
(2,1212)	1:A:128:VAL:HB	1:A:65:THR:HG23	3	0.13
(2,1212)	1:A:108:LYS:HB3	1:A:109:THR:HG21	3	0.13
(2,1212)	1:A:108:LYS:HB3	1:A:109:THR:HG22	3	0.13
(2,1212)	1:A:108:LYS:HB3	1:A:109:THR:HG23	3	0.13
(2,1212)	1:A:108:LYS:HB3	1:A:110:VAL:HG12	3	0.13
(2,1212)	1:A:108:LYS:HB3	1:A:110:VAL:HG11	3	0.13
(2,1212)	1:A:108:LYS:HB3	1:A:110:VAL:HG13	3	0.13
(2,1178)	1:A:86:ILE:HB	1:A:82:PHE:HD1	10	0.13
(2,1178)	1:A:86:ILE:HB	1:A:82:PHE:HD2	10	0.13
(2,1178)	1:A:85:ARG:H	1:A:86:ILE:HB	10	0.13
(2,1171)	1:A:58:GLU:HG2	1:A:58:GLU:HB3	1	0.13
(2,1171)	1:A:58:GLU:HG2	1:A:107:PRO:HB2	1	0.13
(2,1171)	1:A:88:GLU:HG2	1:A:88:GLU:HB2	1	0.13
(2,1171)	1:A:112:GLU:HG2	1:A:112:GLU:HB3	1	0.13
(2,1171)	1:A:112:GLU:HG3	1:A:112:GLU:HB2	1	0.13
(2,1088)	1:A:83:SER:H	1:A:82:PHE:HB2	2	0.13
(2,1088)	1:A:83:SER:H	1:A:82:PHE:HB2	6	0.13
(2,1062)	1:A:120:HIS:H	1:A:119:LEU:HB3	2	0.13
(1,47)	1:A:103:MET:H	1:A:95:PHE:HB3	5	0.13
(1,46)	1:A:108:LYS:HE3	1:A:59:MET:HA	3	0.13
(1,24)	1:A:75:LYS:HG3	1:A:78:LYS:HE3	6	0.13
(2,995)	1:A:125:ALA:H	1:A:126:GLY:HA2	1	0.12
(2,995)	1:A:125:ALA:H	1:A:126:GLY:HA2	7	0.12
(2,817)	1:A:110:VAL:H	1:A:107:PRO:HG2	2	0.12
(2,672)	1:A:61:ARG:HB2	1:A:61:ARG:HD2	8	0.12
(2,672)	1:A:61:ARG:HB2	1:A:61:ARG:HD3	8	0.12
(2,617)	1:A:103:MET:HG2	1:A:103:MET:HA	2	0.12
(2,6)	1:A:72:ASN:HB2	1:A:126:GLY:HA2	7	0.12
(2,514)	1:A:115:MET:HG3	1:A:112:GLU:HA	1	0.12
(2,514)	1:A:115:MET:HG3	1:A:112:GLU:HA	3	0.12
(2,458)	1:A:74:SER:HA	1:A:74:SER:HB3	4	0.12
(2,385)	1:A:86:ILE:HD12	1:A:85:ARG:HA	2	0.12
(2,385)	1:A:86:ILE:HD11	1:A:85:ARG:HA	2	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,385)	1:A:86:ILE:HD13	1:A:85:ARG:HA	2	0.12
(2,288)	1:A:110:VAL:HG22	1:A:113:HIS:HB2	9	0.12
(2,288)	1:A:110:VAL:HG21	1:A:113:HIS:HB2	9	0.12
(2,288)	1:A:110:VAL:HG23	1:A:113:HIS:HB2	9	0.12
(2,282)	1:A:97:THR:HG21	1:A:78:LYS:HE2	2	0.12
(2,282)	1:A:97:THR:HG22	1:A:78:LYS:HE2	2	0.12
(2,282)	1:A:97:THR:HG23	1:A:78:LYS:HE2	2	0.12
(2,28)	1:A:87:GLU:HG2	1:A:87:GLU:HB3	4	0.12
(2,267)	1:A:110:VAL:HG22	1:A:114:ASP:HB3	4	0.12
(2,267)	1:A:110:VAL:HG21	1:A:114:ASP:HB3	4	0.12
(2,267)	1:A:110:VAL:HG23	1:A:114:ASP:HB3	4	0.12
(2,267)	1:A:110:VAL:HG22	1:A:114:ASP:HB3	6	0.12
(2,267)	1:A:110:VAL:HG21	1:A:114:ASP:HB3	6	0.12
(2,267)	1:A:110:VAL:HG23	1:A:114:ASP:HB3	6	0.12
(2,267)	1:A:110:VAL:HG22	1:A:114:ASP:HB3	7	0.12
(2,267)	1:A:110:VAL:HG21	1:A:114:ASP:HB3	7	0.12
(2,267)	1:A:110:VAL:HG23	1:A:114:ASP:HB3	7	0.12
(2,267)	1:A:110:VAL:HG22	1:A:114:ASP:HB3	9	0.12
(2,267)	1:A:110:VAL:HG21	1:A:114:ASP:HB3	9	0.12
(2,267)	1:A:110:VAL:HG23	1:A:114:ASP:HB3	9	0.12
(2,241)	1:A:106:LEU:HD22	1:A:110:VAL:HG12	2	0.12
(2,241)	1:A:106:LEU:HD22	1:A:110:VAL:HG11	2	0.12
(2,241)	1:A:106:LEU:HD22	1:A:110:VAL:HG13	2	0.12
(2,241)	1:A:106:LEU:HD21	1:A:110:VAL:HG12	2	0.12
(2,241)	1:A:106:LEU:HD21	1:A:110:VAL:HG11	2	0.12
(2,241)	1:A:106:LEU:HD21	1:A:110:VAL:HG13	2	0.12
(2,241)	1:A:106:LEU:HD23	1:A:110:VAL:HG12	2	0.12
(2,241)	1:A:106:LEU:HD23	1:A:110:VAL:HG11	2	0.12
(2,241)	1:A:106:LEU:HD23	1:A:110:VAL:HG13	2	0.12
(2,241)	1:A:106:LEU:HD22	1:A:110:VAL:HG12	3	0.12
(2,241)	1:A:106:LEU:HD22	1:A:110:VAL:HG11	3	0.12
(2,241)	1:A:106:LEU:HD22	1:A:110:VAL:HG13	3	0.12
(2,241)	1:A:106:LEU:HD21	1:A:110:VAL:HG12	3	0.12
(2,241)	1:A:106:LEU:HD21	1:A:110:VAL:HG11	3	0.12
(2,241)	1:A:106:LEU:HD21	1:A:110:VAL:HG13	3	0.12
(2,241)	1:A:106:LEU:HD23	1:A:110:VAL:HG12	3	0.12
(2,241)	1:A:106:LEU:HD23	1:A:110:VAL:HG11	3	0.12
(2,241)	1:A:106:LEU:HD23	1:A:110:VAL:HG13	3	0.12
(2,1941)	1:A:127:GLY:H	1:A:128:VAL:HG22	6	0.12
(2,1941)	1:A:127:GLY:H	1:A:128:VAL:HG21	6	0.12
(2,1941)	1:A:127:GLY:H	1:A:128:VAL:HG23	6	0.12
(2,1941)	1:A:127:GLY:H	1:A:128:VAL:HG12	6	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1941)	1:A:127:GLY:H	1:A:128:VAL:HG11	6	0.12
(2,1941)	1:A:127:GLY:H	1:A:128:VAL:HG13	6	0.12
(2,1941)	1:A:127:GLY:H	1:A:129:VAL:HG12	6	0.12
(2,1941)	1:A:127:GLY:H	1:A:129:VAL:HG11	6	0.12
(2,1941)	1:A:127:GLY:H	1:A:129:VAL:HG13	6	0.12
(2,1933)	1:A:92:SER:H	1:A:93:ILE:HD12	8	0.12
(2,1933)	1:A:92:SER:H	1:A:93:ILE:HD11	8	0.12
(2,1933)	1:A:92:SER:H	1:A:93:ILE:HD13	8	0.12
(2,1933)	1:A:92:SER:H	1:A:104:ILE:HD12	8	0.12
(2,1933)	1:A:92:SER:H	1:A:104:ILE:HD11	8	0.12
(2,1933)	1:A:92:SER:H	1:A:104:ILE:HD13	8	0.12
(2,1933)	1:A:92:SER:H	1:A:104:ILE:HG12	8	0.12
(2,1922)	1:A:86:ILE:H	1:A:87:GLU:HB2	2	0.12
(2,1922)	1:A:86:ILE:H	1:A:87:GLU:HB3	2	0.12
(2,1922)	1:A:86:ILE:H	1:A:88:GLU:HB3	2	0.12
(2,1922)	1:A:86:ILE:H	1:A:87:GLU:HB2	4	0.12
(2,1922)	1:A:86:ILE:H	1:A:87:GLU:HB3	4	0.12
(2,1922)	1:A:86:ILE:H	1:A:88:GLU:HB3	4	0.12
(2,1891)	1:A:116:ASP:H	1:A:115:MET:HB2	2	0.12
(2,1891)	1:A:116:ASP:H	1:A:117:GLN:HB2	2	0.12
(2,1891)	1:A:116:ASP:H	1:A:117:GLN:HB3	2	0.12
(2,186)	1:A:96:LEU:HG	1:A:103:MET:HG2	2	0.12
(2,1769)	1:A:121:ASP:HB2	1:A:82:PHE:HA	3	0.12
(2,1769)	1:A:121:ASP:HB2	1:A:115:MET:HA	3	0.12
(2,1769)	1:A:121:ASP:HB2	1:A:116:ASP:HA	3	0.12
(2,1769)	1:A:121:ASP:HB2	1:A:82:PHE:HA	8	0.12
(2,1769)	1:A:121:ASP:HB2	1:A:115:MET:HA	8	0.12
(2,1769)	1:A:121:ASP:HB2	1:A:116:ASP:HA	8	0.12
(2,1745)	1:A:134:GLU:HB2	1:A:108:LYS:HE3	5	0.12
(2,1745)	1:A:108:LYS:HE3	1:A:108:LYS:HB3	5	0.12
(2,1714)	1:A:106:LEU:HB2	1:A:91:GLY:HA2	3	0.12
(2,1714)	1:A:106:LEU:HB3	1:A:91:GLY:HA2	3	0.12
(2,1714)	1:A:106:LEU:HG	1:A:91:GLY:HA2	3	0.12
(2,1702)	1:A:106:LEU:HB2	1:A:86:ILE:HB	3	0.12
(2,1702)	1:A:106:LEU:HB3	1:A:86:ILE:HB	3	0.12
(2,1702)	1:A:105:GLU:HG3	1:A:106:LEU:HB2	3	0.12
(2,1702)	1:A:105:GLU:HG3	1:A:106:LEU:HB3	3	0.12
(2,1702)	1:A:115:MET:HB2	1:A:106:LEU:HB2	3	0.12
(2,1702)	1:A:115:MET:HB2	1:A:106:LEU:HB3	3	0.12
(2,1702)	1:A:106:LEU:HB2	1:A:118:LEU:HB3	3	0.12
(2,1702)	1:A:106:LEU:HB3	1:A:118:LEU:HB3	3	0.12
(2,167)	1:A:61:ARG:HG2	1:A:105:GLU:HA	6	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1645)	1:A:71:LYS:HA	1:A:69:GLU:HB2	2	0.12
(2,1645)	1:A:71:LYS:HA	1:A:69:GLU:HB3	2	0.12
(2,1617)	1:A:79:SER:HA	1:A:75:LYS:HB2	1	0.12
(2,1617)	1:A:79:SER:HA	1:A:75:LYS:HB3	1	0.12
(2,1617)	1:A:79:SER:HA	1:A:78:LYS:HB3	1	0.12
(2,1617)	1:A:121:ASP:HA	1:A:123:LEU:HB3	1	0.12
(2,1617)	1:A:70:SER:HA	1:A:71:LYS:HD3	1	0.12
(2,156)	1:A:107:PRO:HG2	1:A:107:PRO:HD3	2	0.12
(2,156)	1:A:107:PRO:HG2	1:A:107:PRO:HD3	3	0.12
(2,156)	1:A:107:PRO:HG2	1:A:107:PRO:HD3	10	0.12
(2,1541)	1:A:81:SER:HB2	1:A:81:SER:HA	1	0.12
(2,1541)	1:A:81:SER:HB3	1:A:81:SER:HA	1	0.12
(2,1540)	1:A:135:VAL:HA	1:A:109:THR:H	6	0.12
(2,1540)	1:A:135:VAL:HA	1:A:110:VAL:H	6	0.12
(2,1540)	1:A:135:VAL:HA	1:A:109:THR:H	10	0.12
(2,1540)	1:A:135:VAL:HA	1:A:110:VAL:H	10	0.12
(2,154)	1:A:107:PRO:HG3	1:A:106:LEU:HA	2	0.12
(2,1531)	1:A:83:SER:HA	1:A:87:GLU:HG2	4	0.12
(2,1531)	1:A:87:GLU:HG3	1:A:83:SER:HA	4	0.12
(2,1451)	1:A:122:ILE:HG22	1:A:123:LEU:HB2	2	0.12
(2,1451)	1:A:122:ILE:HG21	1:A:123:LEU:HB2	2	0.12
(2,1451)	1:A:122:ILE:HG23	1:A:123:LEU:HB2	2	0.12
(2,1451)	1:A:125:ALA:HB2	1:A:122:ILE:HG22	2	0.12
(2,1451)	1:A:125:ALA:HB2	1:A:122:ILE:HG21	2	0.12
(2,1451)	1:A:125:ALA:HB2	1:A:122:ILE:HG23	2	0.12
(2,1451)	1:A:125:ALA:HB1	1:A:122:ILE:HG22	2	0.12
(2,1451)	1:A:125:ALA:HB1	1:A:122:ILE:HG21	2	0.12
(2,1451)	1:A:125:ALA:HB1	1:A:122:ILE:HG23	2	0.12
(2,1451)	1:A:125:ALA:HB3	1:A:122:ILE:HG22	2	0.12
(2,1451)	1:A:125:ALA:HB3	1:A:122:ILE:HG21	2	0.12
(2,1451)	1:A:125:ALA:HB3	1:A:122:ILE:HG23	2	0.12
(2,1433)	1:A:77:ALA:HB2	1:A:76:MET:HG2	2	0.12
(2,1433)	1:A:77:ALA:HB1	1:A:76:MET:HG2	2	0.12
(2,1433)	1:A:77:ALA:HB3	1:A:76:MET:HG2	2	0.12
(2,1433)	1:A:77:ALA:HB2	1:A:78:LYS:HB2	2	0.12
(2,1433)	1:A:77:ALA:HB1	1:A:78:LYS:HB2	2	0.12
(2,1433)	1:A:77:ALA:HB3	1:A:78:LYS:HB2	2	0.12
(2,1433)	1:A:77:ALA:HB2	1:A:125:ALA:HB2	2	0.12
(2,1433)	1:A:77:ALA:HB2	1:A:125:ALA:HB1	2	0.12
(2,1433)	1:A:77:ALA:HB2	1:A:125:ALA:HB3	2	0.12
(2,1433)	1:A:77:ALA:HB1	1:A:125:ALA:HB2	2	0.12
(2,1433)	1:A:77:ALA:HB1	1:A:125:ALA:HB1	2	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1433)	1:A:77:ALA:HB1	1:A:125:ALA:HB3	2	0.12
(2,1433)	1:A:77:ALA:HB3	1:A:125:ALA:HB2	2	0.12
(2,1433)	1:A:77:ALA:HB3	1:A:125:ALA:HB1	2	0.12
(2,1433)	1:A:77:ALA:HB3	1:A:125:ALA:HB3	2	0.12
(2,1425)	1:A:138:ALA:HB2	1:A:61:ARG:HG3	4	0.12
(2,1425)	1:A:138:ALA:HB1	1:A:61:ARG:HG3	4	0.12
(2,1425)	1:A:138:ALA:HB3	1:A:61:ARG:HG3	4	0.12
(2,1425)	1:A:138:ALA:HB2	1:A:106:LEU:HB2	4	0.12
(2,1425)	1:A:138:ALA:HB2	1:A:106:LEU:HB3	4	0.12
(2,1425)	1:A:138:ALA:HB1	1:A:106:LEU:HB2	4	0.12
(2,1425)	1:A:138:ALA:HB1	1:A:106:LEU:HB3	4	0.12
(2,1425)	1:A:138:ALA:HB3	1:A:106:LEU:HB2	4	0.12
(2,1425)	1:A:138:ALA:HB3	1:A:106:LEU:HB3	4	0.12
(2,1425)	1:A:138:ALA:HB2	1:A:108:LYS:HG3	4	0.12
(2,1425)	1:A:138:ALA:HB1	1:A:108:LYS:HG3	4	0.12
(2,1425)	1:A:138:ALA:HB3	1:A:108:LYS:HG3	4	0.12
(2,1425)	1:A:138:ALA:HB2	1:A:61:ARG:HG3	10	0.12
(2,1425)	1:A:138:ALA:HB1	1:A:61:ARG:HG3	10	0.12
(2,1425)	1:A:138:ALA:HB3	1:A:61:ARG:HG3	10	0.12
(2,1425)	1:A:138:ALA:HB2	1:A:106:LEU:HB2	10	0.12
(2,1425)	1:A:138:ALA:HB2	1:A:106:LEU:HB3	10	0.12
(2,1425)	1:A:138:ALA:HB1	1:A:106:LEU:HB2	10	0.12
(2,1425)	1:A:138:ALA:HB1	1:A:106:LEU:HB3	10	0.12
(2,1425)	1:A:138:ALA:HB3	1:A:106:LEU:HB2	10	0.12
(2,1425)	1:A:138:ALA:HB3	1:A:106:LEU:HB3	10	0.12
(2,1425)	1:A:138:ALA:HB2	1:A:108:LYS:HG3	10	0.12
(2,1425)	1:A:138:ALA:HB1	1:A:108:LYS:HG3	10	0.12
(2,1425)	1:A:138:ALA:HB3	1:A:108:LYS:HG3	10	0.12
(2,1420)	1:A:64:VAL:HG22	1:A:62:LEU:HG	3	0.12
(2,1420)	1:A:64:VAL:HG21	1:A:62:LEU:HG	3	0.12
(2,1420)	1:A:64:VAL:HG23	1:A:62:LEU:HG	3	0.12
(2,1420)	1:A:93:ILE:HG13	1:A:64:VAL:HG22	3	0.12
(2,1420)	1:A:93:ILE:HG13	1:A:64:VAL:HG21	3	0.12
(2,1420)	1:A:93:ILE:HG13	1:A:64:VAL:HG23	3	0.12
(2,1420)	1:A:64:VAL:HG22	1:A:119:LEU:HB2	3	0.12
(2,1420)	1:A:64:VAL:HG21	1:A:119:LEU:HB2	3	0.12
(2,1420)	1:A:64:VAL:HG23	1:A:119:LEU:HB2	3	0.12
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:130:GLY:HA2	8	0.12
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:130:GLY:HA2	8	0.12
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:130:GLY:HA2	8	0.12
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:130:GLY:HA2	8	0.12
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:130:GLY:HA2	8	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:130:GLY:HA2	8	0.12
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG22	1:A:126:GLY:HA2	8	0.12
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG21	1:A:126:GLY:HA2	8	0.12
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG23	1:A:126:GLY:HA2	8	0.12
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG12	1:A:126:GLY:HA2	8	0.12
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG11	1:A:126:GLY:HA2	8	0.12
(2,1412)	1:A:128:VAL:HG13	1:A:126:GLY:HA2	8	0.12
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:123:LEU:HA	7	0.12
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:123:LEU:HA	7	0.12
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:123:LEU:HA	7	0.12
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:129:VAL:HA	7	0.12
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:129:VAL:HA	7	0.12
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:129:VAL:HA	7	0.12
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:101:VAL:HA	7	0.12
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:101:VAL:HA	7	0.12
(2,1378)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:101:VAL:HA	7	0.12
(2,1371)	1:A:101:VAL:HG22	1:A:67:LYS:HE2	1	0.12
(2,1371)	1:A:101:VAL:HG21	1:A:67:LYS:HE2	1	0.12
(2,1371)	1:A:101:VAL:HG23	1:A:67:LYS:HE2	1	0.12
(2,1371)	1:A:101:VAL:HG12	1:A:67:LYS:HE2	1	0.12
(2,1371)	1:A:101:VAL:HG11	1:A:67:LYS:HE2	1	0.12
(2,1371)	1:A:101:VAL:HG13	1:A:67:LYS:HE2	1	0.12
(2,1371)	1:A:101:VAL:HG22	1:A:67:LYS:HE3	1	0.12
(2,1371)	1:A:101:VAL:HG21	1:A:67:LYS:HE3	1	0.12
(2,1371)	1:A:101:VAL:HG23	1:A:67:LYS:HE3	1	0.12
(2,1371)	1:A:101:VAL:HG12	1:A:67:LYS:HE3	1	0.12
(2,1371)	1:A:101:VAL:HG11	1:A:67:LYS:HE3	1	0.12
(2,1371)	1:A:101:VAL:HG13	1:A:67:LYS:HE3	1	0.12
(2,1371)	1:A:101:VAL:HG22	1:A:73:PHE:HB3	1	0.12
(2,1371)	1:A:101:VAL:HG21	1:A:73:PHE:HB3	1	0.12
(2,1371)	1:A:101:VAL:HG23	1:A:73:PHE:HB3	1	0.12
(2,1371)	1:A:101:VAL:HG12	1:A:73:PHE:HB3	1	0.12
(2,1371)	1:A:101:VAL:HG11	1:A:73:PHE:HB3	1	0.12
(2,1371)	1:A:101:VAL:HG13	1:A:73:PHE:HB3	1	0.12
(2,1371)	1:A:101:VAL:HG22	1:A:95:PHE:HB2	1	0.12
(2,1371)	1:A:101:VAL:HG21	1:A:95:PHE:HB2	1	0.12
(2,1371)	1:A:101:VAL:HG23	1:A:95:PHE:HB2	1	0.12
(2,1371)	1:A:101:VAL:HG12	1:A:95:PHE:HB2	1	0.12
(2,1371)	1:A:101:VAL:HG11	1:A:95:PHE:HB2	1	0.12
(2,1371)	1:A:101:VAL:HG13	1:A:95:PHE:HB2	1	0.12
(2,1360)	1:A:119:LEU:HD22	1:A:115:MET:HG3	3	0.12
(2,1360)	1:A:119:LEU:HD21	1:A:115:MET:HG3	3	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1360)	1:A:119:LEU:HD23	1:A:115:MET:HG3	3	0.12
(2,1360)	1:A:63:MET:HB2	1:A:96:LEU:HD22	3	0.12
(2,1360)	1:A:63:MET:HB2	1:A:96:LEU:HD21	3	0.12
(2,1360)	1:A:63:MET:HB2	1:A:96:LEU:HD23	3	0.12
(2,1360)	1:A:63:MET:HB3	1:A:96:LEU:HD22	3	0.12
(2,1360)	1:A:63:MET:HB3	1:A:96:LEU:HD21	3	0.12
(2,1360)	1:A:63:MET:HB3	1:A:96:LEU:HD23	3	0.12
(2,1343)	1:A:137:LEU:HD12	1:A:136:LYS:HE2	6	0.12
(2,1343)	1:A:137:LEU:HD11	1:A:136:LYS:HE2	6	0.12
(2,1343)	1:A:137:LEU:HD13	1:A:136:LYS:HE2	6	0.12
(2,1343)	1:A:137:LEU:HD12	1:A:136:LYS:HE3	6	0.12
(2,1343)	1:A:137:LEU:HD11	1:A:136:LYS:HE3	6	0.12
(2,1343)	1:A:137:LEU:HD13	1:A:136:LYS:HE3	6	0.12
(2,1343)	1:A:106:LEU:HD22	1:A:113:HIS:HB2	6	0.12
(2,1343)	1:A:106:LEU:HD21	1:A:113:HIS:HB2	6	0.12
(2,1343)	1:A:106:LEU:HD23	1:A:113:HIS:HB2	6	0.12
(2,1332)	1:A:137:LEU:HD12	1:A:133:SER:HB3	7	0.12
(2,1332)	1:A:137:LEU:HD11	1:A:133:SER:HB3	7	0.12
(2,1332)	1:A:137:LEU:HD13	1:A:133:SER:HB3	7	0.12
(2,1332)	1:A:119:LEU:HD12	1:A:119:LEU:HA	7	0.12
(2,1332)	1:A:119:LEU:HD11	1:A:119:LEU:HA	7	0.12
(2,1332)	1:A:119:LEU:HD13	1:A:119:LEU:HA	7	0.12
(2,1325)	1:A:136:LYS:HG3	1:A:58:GLU:HG2	1	0.12
(2,1325)	1:A:71:LYS:HG3	1:A:68:GLN:HB3	1	0.12
(2,1325)	1:A:108:LYS:HG3	1:A:115:MET:HB3	1	0.12
(2,1317)	1:A:78:LYS:HG3	1:A:78:LYS:HA	1	0.12
(2,1317)	1:A:85:ARG:HG2	1:A:82:PHE:HA	1	0.12
(2,1317)	1:A:78:LYS:HG3	1:A:78:LYS:HA	10	0.12
(2,1317)	1:A:85:ARG:HG2	1:A:82:PHE:HA	10	0.12
(2,1314)	1:A:108:LYS:HG3	1:A:106:LEU:HD22	7	0.12
(2,1314)	1:A:108:LYS:HG3	1:A:106:LEU:HD21	7	0.12
(2,1314)	1:A:108:LYS:HG3	1:A:106:LEU:HD23	7	0.12
(2,1314)	1:A:108:LYS:HG3	1:A:106:LEU:HD12	7	0.12
(2,1314)	1:A:108:LYS:HG3	1:A:106:LEU:HD11	7	0.12
(2,1314)	1:A:108:LYS:HG3	1:A:106:LEU:HD13	7	0.12
(2,1288)	1:A:137:LEU:HG	1:A:131:LEU:HA	5	0.12
(2,1288)	1:A:137:LEU:HG	1:A:132:ASP:HA	5	0.12
(2,1273)	1:A:122:ILE:HG12	1:A:62:LEU:HG	1	0.12
(2,1273)	1:A:122:ILE:HG12	1:A:93:ILE:HG13	1	0.12
(2,1273)	1:A:122:ILE:HG12	1:A:125:ALA:HB2	1	0.12
(2,1273)	1:A:122:ILE:HG12	1:A:125:ALA:HB1	1	0.12
(2,1273)	1:A:122:ILE:HG12	1:A:125:ALA:HB3	1	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1258)	1:A:108:LYS:HD3	1:A:59:MET:HA	3	0.12
(2,1258)	1:A:136:LYS:HD2	1:A:59:MET:HA	3	0.12
(2,1258)	1:A:136:LYS:HD3	1:A:59:MET:HA	3	0.12
(2,1225)	1:A:115:MET:HB2	1:A:107:PRO:HD2	9	0.12
(2,1225)	1:A:115:MET:HB2	1:A:107:PRO:HD3	9	0.12
(2,1212)	1:A:128:VAL:HB	1:A:65:THR:HG21	1	0.12
(2,1212)	1:A:128:VAL:HB	1:A:65:THR:HG22	1	0.12
(2,1212)	1:A:128:VAL:HB	1:A:65:THR:HG23	1	0.12
(2,1212)	1:A:108:LYS:HB3	1:A:109:THR:HG21	1	0.12
(2,1212)	1:A:108:LYS:HB3	1:A:109:THR:HG22	1	0.12
(2,1212)	1:A:108:LYS:HB3	1:A:109:THR:HG23	1	0.12
(2,1212)	1:A:108:LYS:HB3	1:A:110:VAL:HG12	1	0.12
(2,1212)	1:A:108:LYS:HB3	1:A:110:VAL:HG11	1	0.12
(2,1212)	1:A:108:LYS:HB3	1:A:110:VAL:HG13	1	0.12
(2,1178)	1:A:86:ILE:HB	1:A:82:PHE:HD1	2	0.12
(2,1178)	1:A:86:ILE:HB	1:A:82:PHE:HD2	2	0.12
(2,1178)	1:A:85:ARG:H	1:A:86:ILE:HB	2	0.12
(2,1158)	1:A:72:ASN:HB2	1:A:70:SER:HB2	8	0.12
(2,1158)	1:A:72:ASN:HB2	1:A:70:SER:HB3	8	0.12
(2,1032)	1:A:84:THR:H	1:A:84:THR:HG21	6	0.12
(2,1032)	1:A:84:THR:H	1:A:84:THR:HG22	6	0.12
(2,1032)	1:A:84:THR:H	1:A:84:THR:HG23	6	0.12
(1,47)	1:A:103:MET:H	1:A:95:PHE:HB3	1	0.12
(1,47)	1:A:103:MET:H	1:A:95:PHE:HB3	10	0.12
(1,46)	1:A:108:LYS:HE3	1:A:59:MET:HA	7	0.12
(1,43)	1:A:132:ASP:HA	1:A:103:MET:HG2	7	0.12
(1,43)	1:A:132:ASP:HA	1:A:103:MET:HG2	10	0.12
(1,36)	1:A:85:ARG:HA	1:A:88:GLU:HB3	6	0.12
(1,23)	1:A:93:ILE:HG12	1:A:78:LYS:HG2	1	0.12
(1,23)	1:A:93:ILE:HG12	1:A:78:LYS:HG2	8	0.12
(2,995)	1:A:125:ALA:H	1:A:126:GLY:HA2	2	0.11
(2,995)	1:A:125:ALA:H	1:A:126:GLY:HA2	6	0.11
(2,956)	1:A:101:VAL:H	1:A:65:THR:HG21	7	0.11
(2,956)	1:A:101:VAL:H	1:A:65:THR:HG22	7	0.11
(2,956)	1:A:101:VAL:H	1:A:65:THR:HG23	7	0.11
(2,943)	1:A:58:GLU:H	1:A:59:MET:H	10	0.11
(2,943)	1:A:58:GLU:H	1:A:59:MET:H	10	0.11
(2,943)	1:A:58:GLU:H	1:A:59:MET:H	10	0.11
(2,84)	1:A:63:MET:HB3	1:A:101:VAL:HG22	1	0.11
(2,84)	1:A:63:MET:HB3	1:A:101:VAL:HG21	1	0.11
(2,84)	1:A:63:MET:HB3	1:A:101:VAL:HG23	1	0.11
(2,84)	1:A:63:MET:HB3	1:A:101:VAL:HG12	1	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,84)	1:A:63:MET:HB3	1:A:101:VAL:HG11	1	0.11
(2,84)	1:A:63:MET:HB3	1:A:101:VAL:HG13	1	0.11
(2,817)	1:A:110:VAL:H	1:A:107:PRO:HG2	10	0.11
(2,723)	1:A:62:LEU:HB2	1:A:104:ILE:HB	6	0.11
(2,650)	1:A:126:GLY:HA3	1:A:123:LEU:HA	7	0.11
(2,579)	1:A:108:LYS:HA	1:A:108:LYS:HE3	8	0.11
(2,569)	1:A:95:PHE:HD1	1:A:94:SER:HA	4	0.11
(2,569)	1:A:95:PHE:HD2	1:A:94:SER:HA	4	0.11
(2,514)	1:A:115:MET:HG3	1:A:112:GLU:HA	5	0.11
(2,458)	1:A:74:SER:HA	1:A:74:SER:HB3	2	0.11
(2,458)	1:A:74:SER:HA	1:A:74:SER:HB3	3	0.11
(2,408)	1:A:122:ILE:HG13	1:A:122:ILE:HA	5	0.11
(2,387)	1:A:86:ILE:HD12	1:A:85:ARG:HD2	10	0.11
(2,387)	1:A:86:ILE:HD11	1:A:85:ARG:HD2	10	0.11
(2,387)	1:A:86:ILE:HD13	1:A:85:ARG:HD2	10	0.11
(2,375)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:122:ILE:HD12	5	0.11
(2,375)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:122:ILE:HD11	5	0.11
(2,375)	1:A:64:VAL:HG12	1:A:122:ILE:HD13	5	0.11
(2,375)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:122:ILE:HD12	5	0.11
(2,375)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:122:ILE:HD11	5	0.11
(2,375)	1:A:64:VAL:HG11	1:A:122:ILE:HD13	5	0.11
(2,375)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:122:ILE:HD12	5	0.11
(2,375)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:122:ILE:HD11	5	0.11
(2,375)	1:A:64:VAL:HG13	1:A:122:ILE:HD13	5	0.11
(2,353)	1:A:86:ILE:HG22	1:A:104:ILE:HG22	7	0.11
(2,353)	1:A:86:ILE:HG22	1:A:104:ILE:HG21	7	0.11
(2,353)	1:A:86:ILE:HG22	1:A:104:ILE:HG23	7	0.11
(2,353)	1:A:86:ILE:HG21	1:A:104:ILE:HG22	7	0.11
(2,353)	1:A:86:ILE:HG21	1:A:104:ILE:HG21	7	0.11
(2,353)	1:A:86:ILE:HG21	1:A:104:ILE:HG23	7	0.11
(2,353)	1:A:86:ILE:HG23	1:A:104:ILE:HG22	7	0.11
(2,353)	1:A:86:ILE:HG23	1:A:104:ILE:HG21	7	0.11
(2,353)	1:A:86:ILE:HG23	1:A:104:ILE:HG23	7	0.11
(2,331)	1:A:125:ALA:HB2	1:A:121:ASP:HB3	2	0.11
(2,331)	1:A:125:ALA:HB1	1:A:121:ASP:HB3	2	0.11
(2,331)	1:A:125:ALA:HB3	1:A:121:ASP:HB3	2	0.11
(2,288)	1:A:110:VAL:HG22	1:A:113:HIS:HB2	5	0.11
(2,288)	1:A:110:VAL:HG21	1:A:113:HIS:HB2	5	0.11
(2,288)	1:A:110:VAL:HG23	1:A:113:HIS:HB2	5	0.11
(2,288)	1:A:110:VAL:HG22	1:A:113:HIS:HB2	8	0.11
(2,288)	1:A:110:VAL:HG21	1:A:113:HIS:HB2	8	0.11
(2,288)	1:A:110:VAL:HG23	1:A:113:HIS:HB2	8	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,267)	1:A:110:VAL:HG22	1:A:114:ASP:HB3	1	0.11
(2,267)	1:A:110:VAL:HG21	1:A:114:ASP:HB3	1	0.11
(2,267)	1:A:110:VAL:HG23	1:A:114:ASP:HB3	1	0.11
(2,1930)	1:A:92:SER:H	1:A:87:GLU:HB2	8	0.11
(2,1930)	1:A:92:SER:H	1:A:105:GLU:HG2	8	0.11
(2,1922)	1:A:86:ILE:H	1:A:87:GLU:HB2	7	0.11
(2,1922)	1:A:86:ILE:H	1:A:87:GLU:HB3	7	0.11
(2,1922)	1:A:86:ILE:H	1:A:88:GLU:HB3	7	0.11
(2,1922)	1:A:86:ILE:H	1:A:87:GLU:HB2	10	0.11
(2,1922)	1:A:86:ILE:H	1:A:87:GLU:HB3	10	0.11
(2,1922)	1:A:86:ILE:H	1:A:88:GLU:HB3	10	0.11
(2,1863)	1:A:121:ASP:H	1:A:122:ILE:HB	8	0.11
(2,1863)	1:A:121:ASP:H	1:A:119:LEU:HG	8	0.11
(2,186)	1:A:96:LEU:HG	1:A:103:MET:HG2	4	0.11
(2,182)	1:A:137:LEU:HG	1:A:61:ARG:HD2	1	0.11
(2,182)	1:A:137:LEU:HG	1:A:61:ARG:HD3	1	0.11
(2,182)	1:A:137:LEU:HG	1:A:61:ARG:HD2	4	0.11
(2,182)	1:A:137:LEU:HG	1:A:61:ARG:HD3	4	0.11
(2,182)	1:A:137:LEU:HG	1:A:61:ARG:HD2	5	0.11
(2,182)	1:A:137:LEU:HG	1:A:61:ARG:HD3	5	0.11
(2,180)	1:A:115:MET:HG3	1:A:119:LEU:HG	10	0.11
(2,1765)	1:A:113:HIS:HA	1:A:116:ASP:HB3	4	0.11
(2,1765)	1:A:116:ASP:HA	1:A:116:ASP:HB3	4	0.11
(2,1765)	1:A:113:HIS:HA	1:A:116:ASP:HB3	8	0.11
(2,1765)	1:A:116:ASP:HA	1:A:116:ASP:HB3	8	0.11
(2,1763)	1:A:82:PHE:HB2	1:A:76:MET:HB2	4	0.11
(2,1763)	1:A:82:PHE:HB2	1:A:85:ARG:HB3	4	0.11
(2,1763)	1:A:121:ASP:HB3	1:A:76:MET:HB2	4	0.11
(2,1763)	1:A:121:ASP:HB3	1:A:85:ARG:HB2	4	0.11
(2,1763)	1:A:121:ASP:HB3	1:A:85:ARG:HB3	4	0.11
(2,1651)	1:A:61:ARG:HA	1:A:131:LEU:HD22	7	0.11
(2,1651)	1:A:61:ARG:HA	1:A:131:LEU:HD21	7	0.11
(2,1651)	1:A:61:ARG:HA	1:A:131:LEU:HD23	7	0.11
(2,1651)	1:A:104:ILE:HG22	1:A:61:ARG:HA	7	0.11
(2,1651)	1:A:104:ILE:HG21	1:A:61:ARG:HA	7	0.11
(2,1651)	1:A:104:ILE:HG23	1:A:61:ARG:HA	7	0.11
(2,1651)	1:A:61:ARG:HA	1:A:119:LEU:HD22	7	0.11
(2,1651)	1:A:61:ARG:HA	1:A:119:LEU:HD21	7	0.11
(2,1651)	1:A:61:ARG:HA	1:A:119:LEU:HD23	7	0.11
(2,1651)	1:A:61:ARG:HA	1:A:119:LEU:HD12	7	0.11
(2,1651)	1:A:61:ARG:HA	1:A:119:LEU:HD11	7	0.11
(2,1651)	1:A:61:ARG:HA	1:A:119:LEU:HD13	7	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1626)	1:A:118:LEU:HA	1:A:85:ARG:HG2	5	0.11
(2,1626)	1:A:69:GLU:HA	1:A:67:LYS:HG3	5	0.11
(2,1617)	1:A:79:SER:HA	1:A:75:LYS:HB2	2	0.11
(2,1617)	1:A:79:SER:HA	1:A:75:LYS:HB3	2	0.11
(2,1617)	1:A:79:SER:HA	1:A:78:LYS:HB3	2	0.11
(2,1617)	1:A:121:ASP:HA	1:A:123:LEU:HB3	2	0.11
(2,1617)	1:A:70:SER:HA	1:A:71:LYS:HD3	2	0.11
(2,1589)	1:A:112:GLU:HA	1:A:89:LEU:HD22	8	0.11
(2,1589)	1:A:112:GLU:HA	1:A:89:LEU:HD21	8	0.11
(2,1589)	1:A:112:GLU:HA	1:A:89:LEU:HD23	8	0.11
(2,1589)	1:A:112:GLU:HA	1:A:106:LEU:HD22	8	0.11
(2,1589)	1:A:112:GLU:HA	1:A:106:LEU:HD21	8	0.11
(2,1589)	1:A:112:GLU:HA	1:A:106:LEU:HD23	8	0.11
(2,1589)	1:A:112:GLU:HA	1:A:119:LEU:HD12	8	0.11
(2,1589)	1:A:112:GLU:HA	1:A:119:LEU:HD11	8	0.11
(2,1589)	1:A:112:GLU:HA	1:A:119:LEU:HD13	8	0.11
(2,1572)	1:A:82:PHE:HE1	1:A:77:ALA:HA	9	0.11
(2,1572)	1:A:82:PHE:HE2	1:A:77:ALA:HA	9	0.11
(2,1572)	1:A:82:PHE:HE1	1:A:122:ILE:HA	9	0.11
(2,1572)	1:A:82:PHE:HE2	1:A:122:ILE:HA	9	0.11
(2,156)	1:A:107:PRO:HG2	1:A:107:PRO:HD3	1	0.11
(2,156)	1:A:107:PRO:HG2	1:A:107:PRO:HD3	4	0.11
(2,156)	1:A:107:PRO:HG2	1:A:107:PRO:HD3	5	0.11
(2,156)	1:A:107:PRO:HG2	1:A:107:PRO:HD3	6	0.11
(2,156)	1:A:107:PRO:HG2	1:A:107:PRO:HD3	7	0.11
(2,156)	1:A:107:PRO:HG2	1:A:107:PRO:HD3	8	0.11
(2,156)	1:A:107:PRO:HG2	1:A:107:PRO:HD3	9	0.11
(2,1504)	1:A:133:SER:HB3	1:A:62:LEU:HD22	2	0.11
(2,1504)	1:A:133:SER:HB3	1:A:62:LEU:HD21	2	0.11
(2,1504)	1:A:133:SER:HB3	1:A:62:LEU:HD23	2	0.11
(2,1504)	1:A:70:SER:HB2	1:A:64:VAL:HG22	2	0.11
(2,1504)	1:A:70:SER:HB2	1:A:64:VAL:HG21	2	0.11
(2,1504)	1:A:70:SER:HB2	1:A:64:VAL:HG23	2	0.11
(2,1504)	1:A:70:SER:HB3	1:A:64:VAL:HG22	2	0.11
(2,1504)	1:A:70:SER:HB3	1:A:64:VAL:HG21	2	0.11
(2,1504)	1:A:70:SER:HB3	1:A:64:VAL:HG23	2	0.11
(2,1478)	1:A:84:THR:HB	1:A:87:GLU:HG2	2	0.11
(2,1478)	1:A:97:THR:HB	1:A:78:LYS:HE2	2	0.11
(2,1478)	1:A:98:GLU:HG3	1:A:97:THR:HB	2	0.11
(2,1446)	1:A:86:ILE:HG22	1:A:107:PRO:HG3	9	0.11
(2,1446)	1:A:86:ILE:HG21	1:A:107:PRO:HG3	9	0.11
(2,1446)	1:A:86:ILE:HG23	1:A:107:PRO:HG3	9	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1446)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG22	9	0.11
(2,1446)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG21	9	0.11
(2,1446)	1:A:87:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG23	9	0.11
(2,1446)	1:A:88:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG22	9	0.11
(2,1446)	1:A:88:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG21	9	0.11
(2,1446)	1:A:88:GLU:HB3	1:A:86:ILE:HG23	9	0.11
(2,1420)	1:A:64:VAL:HG22	1:A:62:LEU:HG	4	0.11
(2,1420)	1:A:64:VAL:HG21	1:A:62:LEU:HG	4	0.11
(2,1420)	1:A:64:VAL:HG23	1:A:62:LEU:HG	4	0.11
(2,1420)	1:A:93:ILE:HG13	1:A:64:VAL:HG22	4	0.11
(2,1420)	1:A:93:ILE:HG13	1:A:64:VAL:HG21	4	0.11
(2,1420)	1:A:93:ILE:HG13	1:A:64:VAL:HG23	4	0.11
(2,1420)	1:A:64:VAL:HG22	1:A:119:LEU:HB2	4	0.11
(2,1420)	1:A:64:VAL:HG21	1:A:119:LEU:HB2	4	0.11
(2,1420)	1:A:64:VAL:HG23	1:A:119:LEU:HB2	4	0.11
(2,1395)	1:A:101:VAL:HG22	1:A:73:PHE:HD1	8	0.11
(2,1395)	1:A:101:VAL:HG22	1:A:73:PHE:HD2	8	0.11
(2,1395)	1:A:101:VAL:HG21	1:A:73:PHE:HD1	8	0.11
(2,1395)	1:A:101:VAL:HG21	1:A:73:PHE:HD2	8	0.11
(2,1395)	1:A:101:VAL:HG23	1:A:73:PHE:HD1	8	0.11
(2,1395)	1:A:101:VAL:HG23	1:A:73:PHE:HD2	8	0.11
(2,1395)	1:A:101:VAL:HG12	1:A:73:PHE:HD1	8	0.11
(2,1395)	1:A:101:VAL:HG12	1:A:73:PHE:HD2	8	0.11
(2,1395)	1:A:101:VAL:HG11	1:A:73:PHE:HD1	8	0.11
(2,1395)	1:A:101:VAL:HG11	1:A:73:PHE:HD2	8	0.11
(2,1395)	1:A:101:VAL:HG13	1:A:73:PHE:HD1	8	0.11
(2,1395)	1:A:101:VAL:HG13	1:A:73:PHE:HD2	8	0.11
(2,1395)	1:A:101:VAL:HG22	1:A:73:PHE:HE1	8	0.11
(2,1395)	1:A:101:VAL:HG22	1:A:73:PHE:HE2	8	0.11
(2,1395)	1:A:101:VAL:HG21	1:A:73:PHE:HE1	8	0.11
(2,1395)	1:A:101:VAL:HG21	1:A:73:PHE:HE2	8	0.11
(2,1395)	1:A:101:VAL:HG23	1:A:73:PHE:HE1	8	0.11
(2,1395)	1:A:101:VAL:HG23	1:A:73:PHE:HE2	8	0.11
(2,1395)	1:A:101:VAL:HG12	1:A:73:PHE:HE1	8	0.11
(2,1395)	1:A:101:VAL:HG12	1:A:73:PHE:HE2	8	0.11
(2,1395)	1:A:101:VAL:HG11	1:A:73:PHE:HE1	8	0.11
(2,1395)	1:A:101:VAL:HG11	1:A:73:PHE:HE2	8	0.11
(2,1395)	1:A:101:VAL:HG13	1:A:73:PHE:HE1	8	0.11
(2,1395)	1:A:101:VAL:HG13	1:A:73:PHE:HE2	8	0.11
(2,1388)	1:A:109:THR:HG21	1:A:108:LYS:HE3	6	0.11
(2,1388)	1:A:109:THR:HG22	1:A:108:LYS:HE3	6	0.11
(2,1388)	1:A:109:THR:HG23	1:A:108:LYS:HE3	6	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1388)	1:A:84:THR:HG21	1:A:85:ARG:HD2	6	0.11
(2,1388)	1:A:84:THR:HG22	1:A:85:ARG:HD2	6	0.11
(2,1388)	1:A:84:THR:HG23	1:A:85:ARG:HD2	6	0.11
(2,1386)	1:A:109:THR:HG21	1:A:58:GLU:HG2	6	0.11
(2,1386)	1:A:109:THR:HG22	1:A:58:GLU:HG2	6	0.11
(2,1386)	1:A:109:THR:HG23	1:A:58:GLU:HG2	6	0.11
(2,1386)	1:A:84:THR:HG21	1:A:87:GLU:HB3	6	0.11
(2,1386)	1:A:84:THR:HG22	1:A:87:GLU:HB3	6	0.11
(2,1386)	1:A:84:THR:HG23	1:A:87:GLU:HB3	6	0.11
(2,1386)	1:A:84:THR:HG21	1:A:88:GLU:HB3	6	0.11
(2,1386)	1:A:84:THR:HG22	1:A:88:GLU:HB3	6	0.11
(2,1386)	1:A:84:THR:HG23	1:A:88:GLU:HB3	6	0.11
(2,1367)	1:A:65:THR:HG21	1:A:70:SER:HB3	7	0.11
(2,1367)	1:A:65:THR:HG22	1:A:70:SER:HB3	7	0.11
(2,1367)	1:A:65:THR:HG23	1:A:70:SER:HB3	7	0.11
(2,1367)	1:A:65:THR:HG21	1:A:100:GLY:HA2	7	0.11
(2,1367)	1:A:65:THR:HG22	1:A:100:GLY:HA2	7	0.11
(2,1367)	1:A:65:THR:HG23	1:A:100:GLY:HA2	7	0.11
(2,1360)	1:A:119:LEU:HD22	1:A:115:MET:HG3	2	0.11
(2,1360)	1:A:119:LEU:HD21	1:A:115:MET:HG3	2	0.11
(2,1360)	1:A:119:LEU:HD23	1:A:115:MET:HG3	2	0.11
(2,1360)	1:A:63:MET:HB2	1:A:96:LEU:HD22	2	0.11
(2,1360)	1:A:63:MET:HB2	1:A:96:LEU:HD21	2	0.11
(2,1360)	1:A:63:MET:HB2	1:A:96:LEU:HD23	2	0.11
(2,1360)	1:A:63:MET:HB3	1:A:96:LEU:HD22	2	0.11
(2,1360)	1:A:63:MET:HB3	1:A:96:LEU:HD21	2	0.11
(2,1360)	1:A:63:MET:HB3	1:A:96:LEU:HD23	2	0.11
(2,1332)	1:A:137:LEU:HD12	1:A:133:SER:HB3	6	0.11
(2,1332)	1:A:137:LEU:HD11	1:A:133:SER:HB3	6	0.11
(2,1332)	1:A:137:LEU:HD13	1:A:133:SER:HB3	6	0.11
(2,1332)	1:A:119:LEU:HD12	1:A:119:LEU:HA	6	0.11
(2,1332)	1:A:119:LEU:HD11	1:A:119:LEU:HA	6	0.11
(2,1332)	1:A:119:LEU:HD13	1:A:119:LEU:HA	6	0.11
(2,1331)	1:A:123:LEU:HD22	1:A:123:LEU:HA	1	0.11
(2,1331)	1:A:123:LEU:HD21	1:A:123:LEU:HA	1	0.11
(2,1331)	1:A:123:LEU:HD23	1:A:123:LEU:HA	1	0.11
(2,1331)	1:A:137:LEU:HD12	1:A:137:LEU:HA	1	0.11
(2,1331)	1:A:137:LEU:HD11	1:A:137:LEU:HA	1	0.11
(2,1331)	1:A:137:LEU:HD13	1:A:137:LEU:HA	1	0.11
(2,1331)	1:A:119:LEU:HD12	1:A:60:THR:HB	1	0.11
(2,1331)	1:A:119:LEU:HD11	1:A:60:THR:HB	1	0.11
(2,1331)	1:A:119:LEU:HD13	1:A:60:THR:HB	1	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,132)	1:A:75:LYS:HD3	1:A:75:LYS:HA	3	0.11
(2,1317)	1:A:78:LYS:HG3	1:A:78:LYS:HA	3	0.11
(2,1317)	1:A:85:ARG:HG2	1:A:82:PHE:HA	3	0.11
(2,1314)	1:A:108:LYS:HG3	1:A:106:LEU:HD22	9	0.11
(2,1314)	1:A:108:LYS:HG3	1:A:106:LEU:HD21	9	0.11
(2,1314)	1:A:108:LYS:HG3	1:A:106:LEU:HD23	9	0.11
(2,1314)	1:A:108:LYS:HG3	1:A:106:LEU:HD12	9	0.11
(2,1314)	1:A:108:LYS:HG3	1:A:106:LEU:HD11	9	0.11
(2,1314)	1:A:108:LYS:HG3	1:A:106:LEU:HD13	9	0.11
(2,1288)	1:A:137:LEU:HG	1:A:131:LEU:HA	10	0.11
(2,1288)	1:A:137:LEU:HG	1:A:132:ASP:HA	10	0.11
(2,1273)	1:A:122:ILE:HG12	1:A:62:LEU:HG	9	0.11
(2,1273)	1:A:122:ILE:HG12	1:A:93:ILE:HG13	9	0.11
(2,1273)	1:A:122:ILE:HG12	1:A:125:ALA:HB2	9	0.11
(2,1273)	1:A:122:ILE:HG12	1:A:125:ALA:HB1	9	0.11
(2,1273)	1:A:122:ILE:HG12	1:A:125:ALA:HB3	9	0.11
(2,1249)	1:A:117:GLN:HB2	1:A:113:HIS:HA	7	0.11
(2,1249)	1:A:117:GLN:HB3	1:A:113:HIS:HA	7	0.11
(2,1249)	1:A:117:GLN:HB2	1:A:114:ASP:HA	7	0.11
(2,1249)	1:A:117:GLN:HB3	1:A:114:ASP:HA	7	0.11
(2,1241)	1:A:120:HIS:HB3	1:A:119:LEU:HD12	1	0.11
(2,1241)	1:A:120:HIS:HB3	1:A:119:LEU:HD11	1	0.11
(2,1241)	1:A:120:HIS:HB3	1:A:119:LEU:HD13	1	0.11
(2,1241)	1:A:120:HIS:HB3	1:A:123:LEU:HD22	1	0.11
(2,1241)	1:A:120:HIS:HB3	1:A:123:LEU:HD21	1	0.11
(2,1241)	1:A:120:HIS:HB3	1:A:123:LEU:HD23	1	0.11
(2,1212)	1:A:128:VAL:HB	1:A:65:THR:HG21	8	0.11
(2,1212)	1:A:128:VAL:HB	1:A:65:THR:HG22	8	0.11
(2,1212)	1:A:128:VAL:HB	1:A:65:THR:HG23	8	0.11
(2,1212)	1:A:108:LYS:HB3	1:A:109:THR:HG21	8	0.11
(2,1212)	1:A:108:LYS:HB3	1:A:109:THR:HG22	8	0.11
(2,1212)	1:A:108:LYS:HB3	1:A:109:THR:HG23	8	0.11
(2,1212)	1:A:108:LYS:HB3	1:A:110:VAL:HG12	8	0.11
(2,1212)	1:A:108:LYS:HB3	1:A:110:VAL:HG11	8	0.11
(2,1212)	1:A:108:LYS:HB3	1:A:110:VAL:HG13	8	0.11
(2,1171)	1:A:58:GLU:HG2	1:A:58:GLU:HB3	5	0.11
(2,1171)	1:A:58:GLU:HG2	1:A:107:PRO:HB2	5	0.11
(2,1171)	1:A:88:GLU:HG2	1:A:88:GLU:HB2	5	0.11
(2,1171)	1:A:112:GLU:HG2	1:A:112:GLU:HB3	5	0.11
(2,1171)	1:A:112:GLU:HG3	1:A:112:GLU:HB2	5	0.11
(2,1171)	1:A:58:GLU:HG2	1:A:58:GLU:HB3	6	0.11
(2,1171)	1:A:58:GLU:HG2	1:A:107:PRO:HB2	6	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,1171)	1:A:88:GLU:HG2	1:A:88:GLU:HB2	6	0.11
(2,1171)	1:A:112:GLU:HG2	1:A:112:GLU:HB3	6	0.11
(2,1171)	1:A:112:GLU:HG3	1:A:112:GLU:HB2	6	0.11
(2,1171)	1:A:58:GLU:HG2	1:A:58:GLU:HB3	10	0.11
(2,1171)	1:A:58:GLU:HG2	1:A:107:PRO:HB2	10	0.11
(2,1171)	1:A:88:GLU:HG2	1:A:88:GLU:HB2	10	0.11
(2,1171)	1:A:112:GLU:HG2	1:A:112:GLU:HB3	10	0.11
(2,1171)	1:A:112:GLU:HG3	1:A:112:GLU:HB2	10	0.11
(2,1158)	1:A:72:ASN:HB2	1:A:70:SER:HB2	1	0.11
(2,1158)	1:A:72:ASN:HB2	1:A:70:SER:HB3	1	0.11
(2,1144)	1:A:126:GLY:H	1:A:127:GLY:HA2	10	0.11
(2,1131)	1:A:99:THR:H	1:A:65:THR:HG21	4	0.11
(2,1131)	1:A:99:THR:H	1:A:65:THR:HG22	4	0.11
(2,1131)	1:A:99:THR:H	1:A:65:THR:HG23	4	0.11
(2,1088)	1:A:83:SER:H	1:A:82:PHE:HB2	1	0.11
(2,1088)	1:A:83:SER:H	1:A:82:PHE:HB2	8	0.11
(1,41)	1:A:105:GLU:HA	1:A:132:ASP:HB2	2	0.11
(1,23)	1:A:93:ILE:HG12	1:A:78:LYS:HG2	2	0.11

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

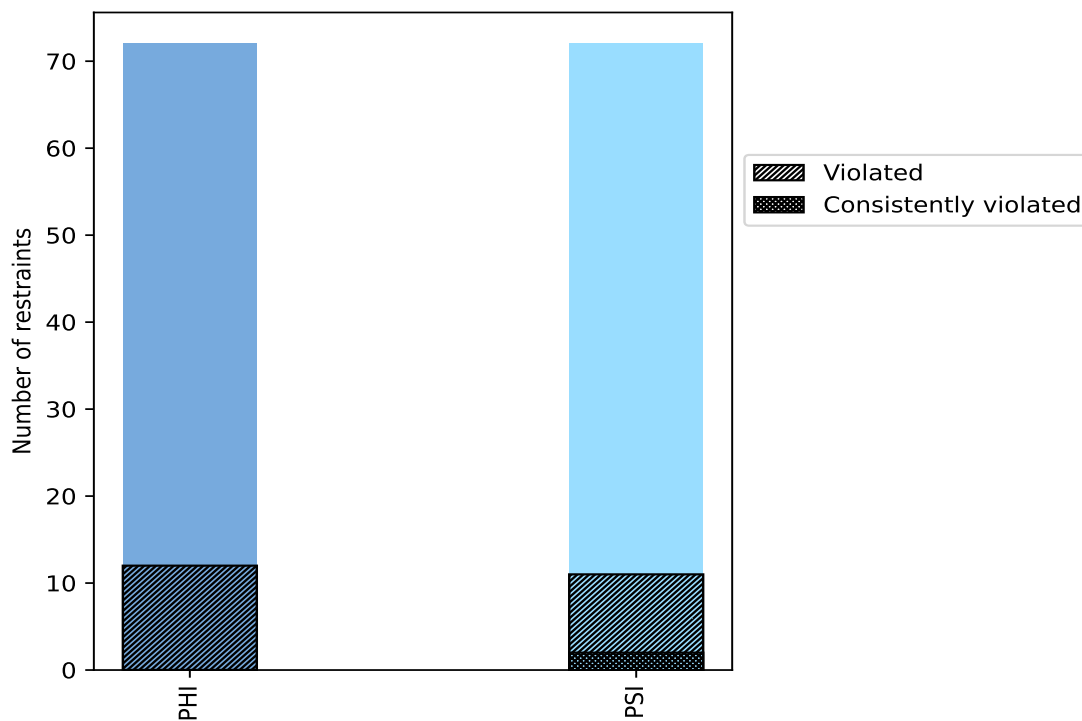
10.1 Summary of dihedral-angle violations [i](#)

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

Angle type	Count	% ¹	Violated ³			Consistently Violated ⁴		
			Count	% ²	% ¹	Count	% ²	% ¹
PHI	72	50.0	12	16.7	8.3	0	0.0	0.0
PSI	72	50.0	11	15.3	7.6	2	2.8	1.4
Total	144	100.0	23	16.0	16.0	2	1.4	1.4

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

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



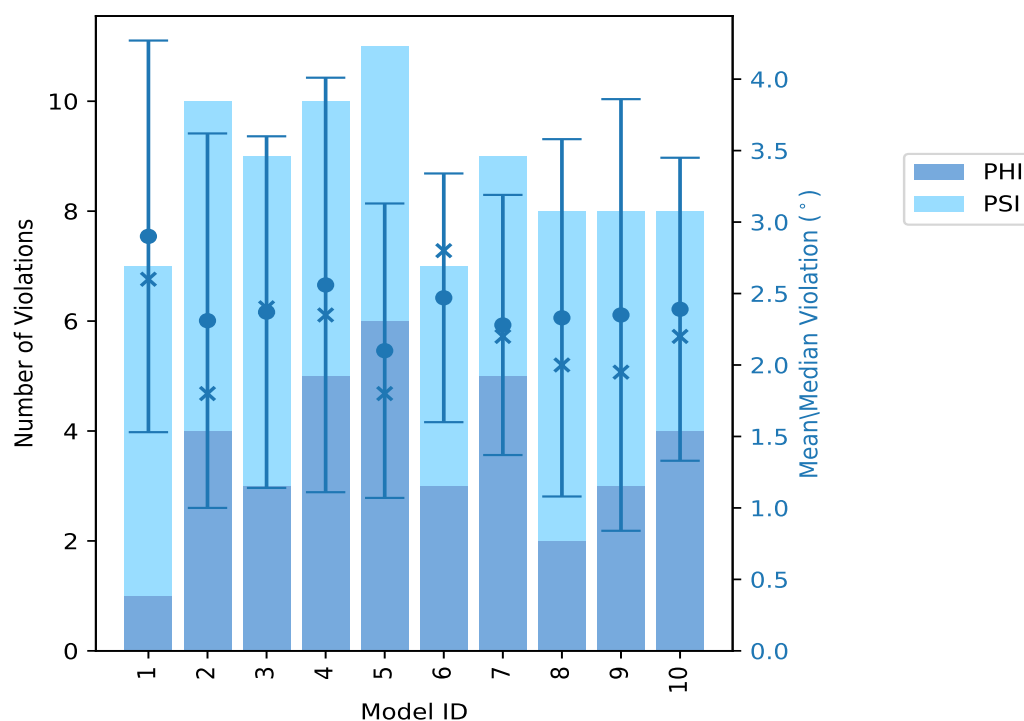
Violated and consistently violated restraints are shown using different hatch patterns in their respective categories

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

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

Model ID	Number of violations			Mean (°)	Max (°)	SD (°)	Median (°)
	PHI	PSI	Total				
1	1	6	7	2.9	5.9	1.37	2.6
2	4	6	10	2.31	5.1	1.31	1.8
3	3	6	9	2.37	5.2	1.23	2.4
4	5	5	10	2.56	5.9	1.45	2.35
5	6	5	11	2.1	4.1	1.03	1.8
6	3	4	7	2.47	3.6	0.87	2.8
7	5	4	9	2.28	3.8	0.91	2.2
8	2	6	8	2.33	5.3	1.25	2.0
9	3	5	8	2.35	6.3	1.51	1.95
10	4	4	8	2.39	3.9	1.06	2.2

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



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

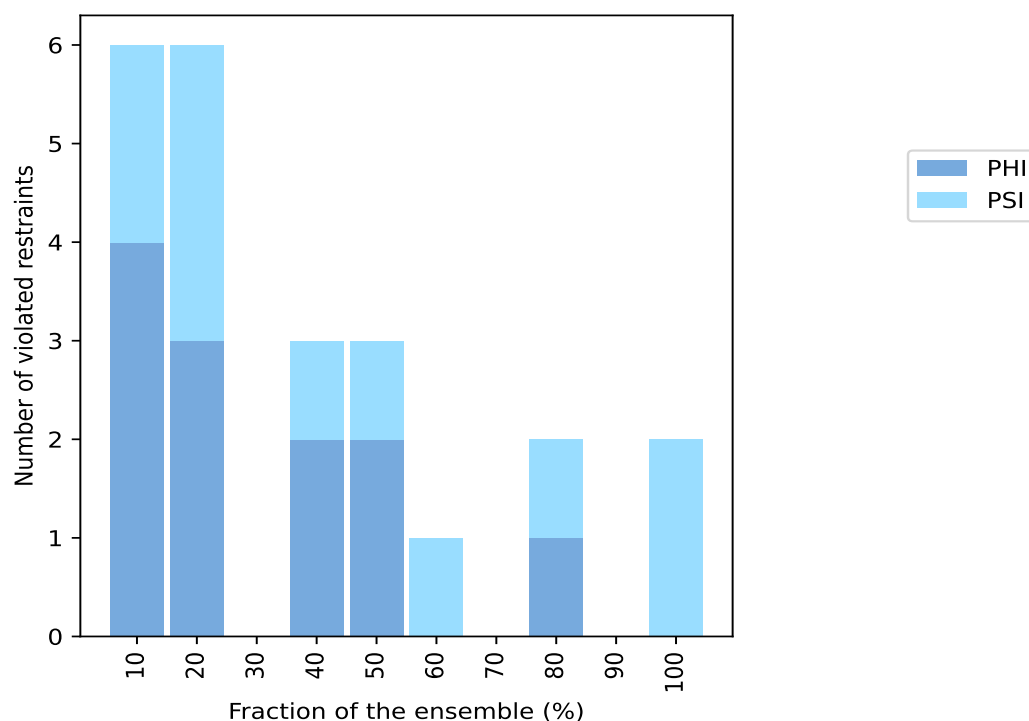
10.3 Dihedral-angle violation statistics for the ensemble [i](#)

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

Number of violated restraints			Fraction of the ensemble	
PHI	PSI	Total	Count ¹	%
4	2	6	1	10.0
3	3	6	2	20.0
0	0	0	3	30.0
2	1	3	4	40.0
2	1	3	5	50.0
0	1	1	6	60.0
0	0	0	7	70.0
1	1	2	8	80.0
0	0	0	9	90.0
0	2	2	10	100.0

¹ Number of models with violations

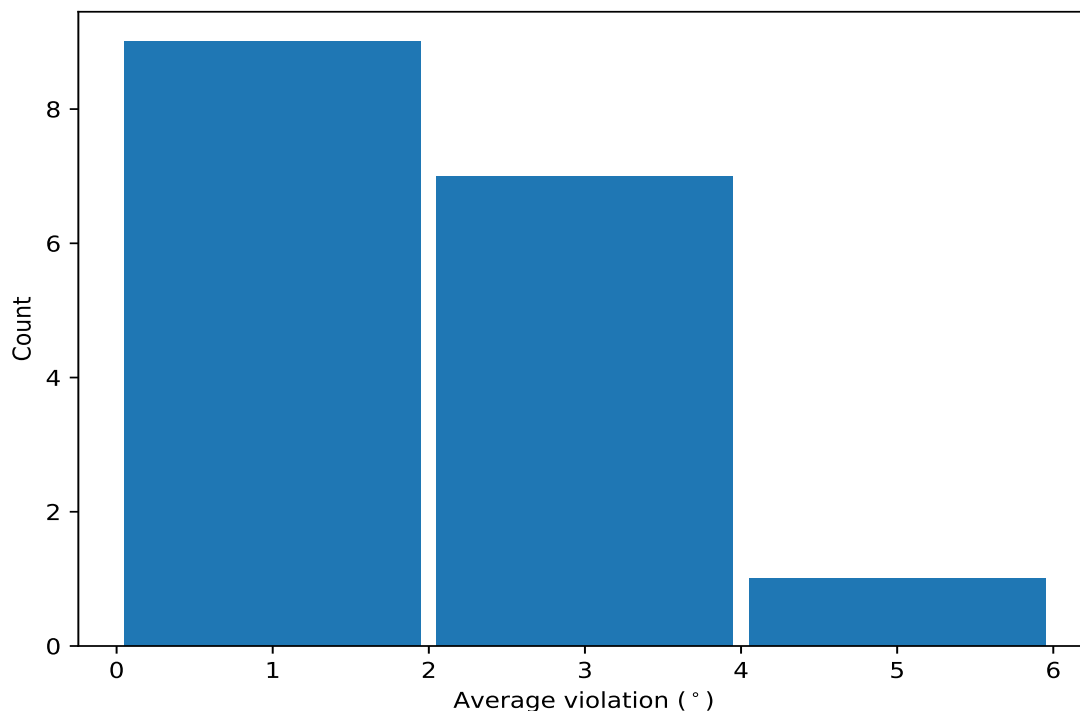
10.3.1 Bar graph : Dihedral-angle Violation statistics for the ensemble [i](#)



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

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

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



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

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

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,46)	1:A:82:PHE:N	1:A:82:PHE:CA	1:A:82:PHE:C	1:A:83:SER:N	10	3.47	0.94	3.45
(1,100)	1:A:110:VAL:N	1:A:110:VAL:CA	1:A:110:VAL:C	1:A:111:SER:N	10	2.51	1.06	2.45
(1,53)	1:A:85:ARG:C	1:A:86:ILE:N	1:A:86:ILE:CA	1:A:86:ILE:C	8	2.84	0.54	2.8
(1,80)	1:A:100:GLY:N	1:A:100:GLY:CA	1:A:100:GLY:C	1:A:101:VAL:N	8	2.19	0.33	2.15
(1,144)	1:A:135:VAL:N	1:A:135:VAL:CA	1:A:135:VAL:C	1:A:136:LYS:N	6	4.82	0.96	4.9
(1,49)	1:A:83:SER:C	1:A:84:THR:N	1:A:84:THR:CA	1:A:84:THR:C	5	2.4	1.99	1.2
(1,64)	1:A:92:SER:N	1:A:92:SER:CA	1:A:92:SER:C	1:A:93:ILE:N	5	1.88	0.53	1.8
(1,61)	1:A:89:LEU:C	1:A:90:GLY:N	1:A:90:GLY:CA	1:A:90:GLY:C	5	1.54	0.48	1.2
(1,143)	1:A:134:GLU:C	1:A:135:VAL:N	1:A:135:VAL:CA	1:A:135:VAL:C	4	2.5	0.83	2.35
(1,16)	1:A:66:GLU:N	1:A:66:GLU:CA	1:A:66:GLU:C	1:A:67:LYS:N	4	1.85	0.49	1.85
(1,31)	1:A:74:SER:C	1:A:75:LYS:N	1:A:75:LYS:CA	1:A:75:LYS:C	4	1.62	0.33	1.45
(1,142)	1:A:134:GLU:N	1:A:134:GLU:CA	1:A:134:GLU:C	1:A:135:VAL:N	2	2.45	0.35	2.45
(1,141)	1:A:133:SER:C	1:A:134:GLU:N	1:A:134:GLU:CA	1:A:134:GLU:C	2	1.5	0.3	1.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

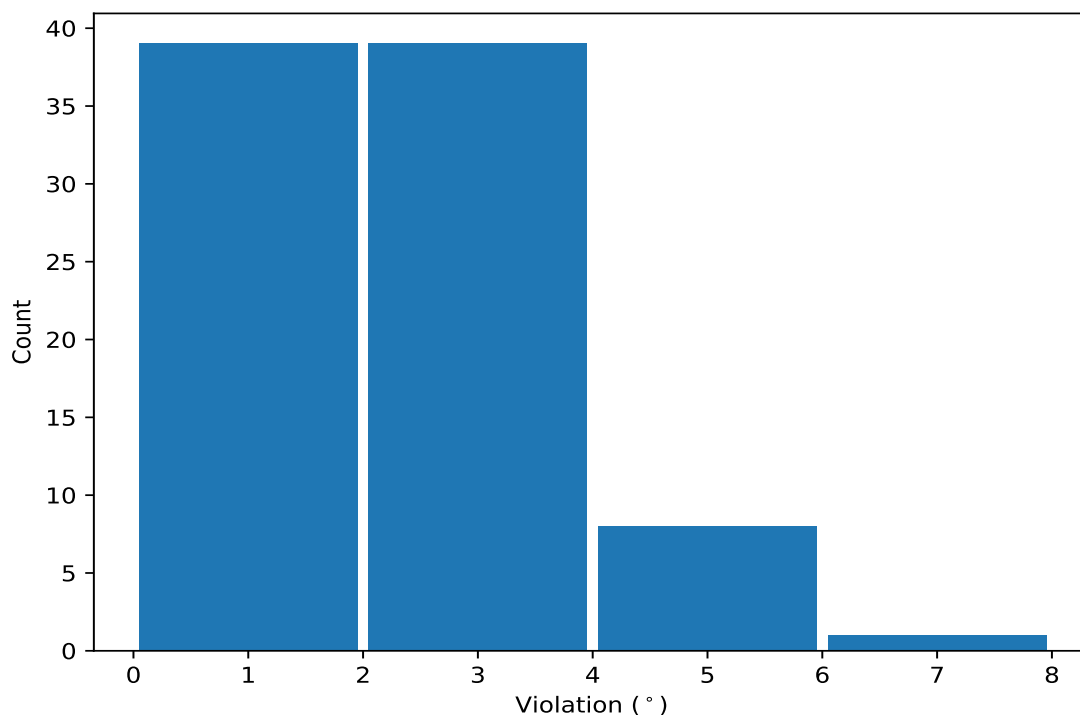
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,111)	1:A:115:MET:C	1:A:116:ASP:N	1:A:116:ASP:CA	1:A:116:ASP:C	2	1.45	0.15	1.45
(1,32)	1:A:75:LYS:N	1:A:75:LYS:CA	1:A:75:LYS:C	1:A:76:MET:N	2	1.35	0.05	1.35
(1,22)	1:A:70:SER:N	1:A:70:SER:CA	1:A:70:SER:C	1:A:71:LYS:N	2	1.3	0.1	1.3
(1,81)	1:A:100:GLY:C	1:A:101:VAL:N	1:A:101:VAL:CA	1:A:101:VAL:C	2	1.2	0.0	1.2

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

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

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

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



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

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

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,49)	1:A:83:SER:C	1:A:84:THR:N	1:A:84:THR:CA	1:A:84:THR:C	9	6.3
(1,144)	1:A:135:VAL:N	1:A:135:VAL:CA	1:A:135:VAL:C	1:A:136:LYS:N	1	5.9
(1,144)	1:A:135:VAL:N	1:A:135:VAL:CA	1:A:135:VAL:C	1:A:136:LYS:N	4	5.9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,144)	1:A:135:VAL:N	1:A:135:VAL:CA	1:A:135:VAL:C	1:A:136:LYS:N	8	5.3
(1,100)	1:A:110:VAL:N	1:A:110:VAL:CA	1:A:110:VAL:C	1:A:111:SER:N	3	5.2
(1,46)	1:A:82:PHE:N	1:A:82:PHE:CA	1:A:82:PHE:C	1:A:83:SER:N	2	5.1
(1,144)	1:A:135:VAL:N	1:A:135:VAL:CA	1:A:135:VAL:C	1:A:136:LYS:N	2	4.5
(1,46)	1:A:82:PHE:N	1:A:82:PHE:CA	1:A:82:PHE:C	1:A:83:SER:N	4	4.4
(1,46)	1:A:82:PHE:N	1:A:82:PHE:CA	1:A:82:PHE:C	1:A:83:SER:N	5	4.1
(1,53)	1:A:85:ARG:C	1:A:86:ILE:N	1:A:86:ILE:CA	1:A:86:ILE:C	5	3.9
(1,144)	1:A:135:VAL:N	1:A:135:VAL:CA	1:A:135:VAL:C	1:A:136:LYS:N	10	3.9
(1,46)	1:A:82:PHE:N	1:A:82:PHE:CA	1:A:82:PHE:C	1:A:83:SER:N	7	3.8
(1,143)	1:A:134:GLU:C	1:A:135:VAL:N	1:A:135:VAL:CA	1:A:135:VAL:C	10	3.8
(1,46)	1:A:82:PHE:N	1:A:82:PHE:CA	1:A:82:PHE:C	1:A:83:SER:N	6	3.6
(1,144)	1:A:135:VAL:N	1:A:135:VAL:CA	1:A:135:VAL:C	1:A:136:LYS:N	7	3.4
(1,46)	1:A:82:PHE:N	1:A:82:PHE:CA	1:A:82:PHE:C	1:A:83:SER:N	1	3.3
(1,53)	1:A:85:ARG:C	1:A:86:ILE:N	1:A:86:ILE:CA	1:A:86:ILE:C	6	3.2
(1,46)	1:A:82:PHE:N	1:A:82:PHE:CA	1:A:82:PHE:C	1:A:83:SER:N	3	3.2
(1,46)	1:A:82:PHE:N	1:A:82:PHE:CA	1:A:82:PHE:C	1:A:83:SER:N	10	3.2
(1,53)	1:A:85:ARG:C	1:A:86:ILE:N	1:A:86:ILE:CA	1:A:86:ILE:C	7	3.1
(1,64)	1:A:92:SER:N	1:A:92:SER:CA	1:A:92:SER:C	1:A:93:ILE:N	3	2.9
(1,53)	1:A:85:ARG:C	1:A:86:ILE:N	1:A:86:ILE:CA	1:A:86:ILE:C	8	2.9
(1,100)	1:A:110:VAL:N	1:A:110:VAL:CA	1:A:110:VAL:C	1:A:111:SER:N	1	2.9
(1,142)	1:A:134:GLU:N	1:A:134:GLU:CA	1:A:134:GLU:C	1:A:135:VAL:N	6	2.8
(1,100)	1:A:110:VAL:N	1:A:110:VAL:CA	1:A:110:VAL:C	1:A:111:SER:N	5	2.8
(1,100)	1:A:110:VAL:N	1:A:110:VAL:CA	1:A:110:VAL:C	1:A:111:SER:N	6	2.8
(1,53)	1:A:85:ARG:C	1:A:86:ILE:N	1:A:86:ILE:CA	1:A:86:ILE:C	4	2.7
(1,100)	1:A:110:VAL:N	1:A:110:VAL:CA	1:A:110:VAL:C	1:A:111:SER:N	4	2.7
(1,80)	1:A:100:GLY:N	1:A:100:GLY:CA	1:A:100:GLY:C	1:A:101:VAL:N	1	2.6
(1,80)	1:A:100:GLY:N	1:A:100:GLY:CA	1:A:100:GLY:C	1:A:101:VAL:N	2	2.5
(1,80)	1:A:100:GLY:N	1:A:100:GLY:CA	1:A:100:GLY:C	1:A:101:VAL:N	6	2.5
(1,53)	1:A:85:ARG:C	1:A:86:ILE:N	1:A:86:ILE:CA	1:A:86:ILE:C	1	2.5
(1,16)	1:A:66:GLU:N	1:A:66:GLU:CA	1:A:66:GLU:C	1:A:67:LYS:N	4	2.5
(1,53)	1:A:85:ARG:C	1:A:86:ILE:N	1:A:86:ILE:CA	1:A:86:ILE:C	3	2.4
(1,46)	1:A:82:PHE:N	1:A:82:PHE:CA	1:A:82:PHE:C	1:A:83:SER:N	8	2.4
(1,143)	1:A:134:GLU:C	1:A:135:VAL:N	1:A:135:VAL:CA	1:A:135:VAL:C	3	2.4
(1,61)	1:A:89:LEU:C	1:A:90:GLY:N	1:A:90:GLY:CA	1:A:90:GLY:C	10	2.3
(1,143)	1:A:134:GLU:C	1:A:135:VAL:N	1:A:135:VAL:CA	1:A:135:VAL:C	7	2.3
(1,80)	1:A:100:GLY:N	1:A:100:GLY:CA	1:A:100:GLY:C	1:A:101:VAL:N	8	2.2
(1,49)	1:A:83:SER:C	1:A:84:THR:N	1:A:84:THR:CA	1:A:84:THR:C	5	2.2
(1,31)	1:A:74:SER:C	1:A:75:LYS:N	1:A:75:LYS:CA	1:A:75:LYS:C	4	2.2
(1,100)	1:A:110:VAL:N	1:A:110:VAL:CA	1:A:110:VAL:C	1:A:111:SER:N	7	2.2
(1,80)	1:A:100:GLY:N	1:A:100:GLY:CA	1:A:100:GLY:C	1:A:101:VAL:N	5	2.1
(1,80)	1:A:100:GLY:N	1:A:100:GLY:CA	1:A:100:GLY:C	1:A:101:VAL:N	10	2.1
(1,16)	1:A:66:GLU:N	1:A:66:GLU:CA	1:A:66:GLU:C	1:A:67:LYS:N	2	2.1
(1,142)	1:A:134:GLU:N	1:A:134:GLU:CA	1:A:134:GLU:C	1:A:135:VAL:N	9	2.1
(1,80)	1:A:100:GLY:N	1:A:100:GLY:CA	1:A:100:GLY:C	1:A:101:VAL:N	9	2.0
(1,53)	1:A:85:ARG:C	1:A:86:ILE:N	1:A:86:ILE:CA	1:A:86:ILE:C	9	2.0
(1,61)	1:A:89:LEU:C	1:A:90:GLY:N	1:A:90:GLY:CA	1:A:90:GLY:C	2	1.9
(1,100)	1:A:110:VAL:N	1:A:110:VAL:CA	1:A:110:VAL:C	1:A:111:SER:N	9	1.9
(1,64)	1:A:92:SER:N	1:A:92:SER:CA	1:A:92:SER:C	1:A:93:ILE:N	1	1.8
(1,64)	1:A:92:SER:N	1:A:92:SER:CA	1:A:92:SER:C	1:A:93:ILE:N	7	1.8
(1,141)	1:A:133:SER:C	1:A:134:GLU:N	1:A:134:GLU:CA	1:A:134:GLU:C	5	1.8
(1,100)	1:A:110:VAL:N	1:A:110:VAL:CA	1:A:110:VAL:C	1:A:111:SER:N	8	1.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,100)	1:A:110:VAL:N	1:A:110:VAL:CA	1:A:110:VAL:C	1:A:111:SER:N	2	1.7
(1,46)	1:A:82:PHE:N	1:A:82:PHE:CA	1:A:82:PHE:C	1:A:83:SER:N	9	1.6
(1,16)	1:A:66:GLU:N	1:A:66:GLU:CA	1:A:66:GLU:C	1:A:67:LYS:N	9	1.6
(1,111)	1:A:115:MET:C	1:A:116:ASP:N	1:A:116:ASP:CA	1:A:116:ASP:C	10	1.6
(1,80)	1:A:100:GLY:N	1:A:100:GLY:CA	1:A:100:GLY:C	1:A:101:VAL:N	3	1.5
(1,64)	1:A:92:SER:N	1:A:92:SER:CA	1:A:92:SER:C	1:A:93:ILE:N	5	1.5
(1,31)	1:A:74:SER:C	1:A:75:LYS:N	1:A:75:LYS:CA	1:A:75:LYS:C	7	1.5
(1,143)	1:A:134:GLU:C	1:A:135:VAL:N	1:A:135:VAL:CA	1:A:135:VAL:C	4	1.5
(1,64)	1:A:92:SER:N	1:A:92:SER:CA	1:A:92:SER:C	1:A:93:ILE:N	4	1.4
(1,32)	1:A:75:LYS:N	1:A:75:LYS:CA	1:A:75:LYS:C	1:A:76:MET:N	8	1.4
(1,31)	1:A:74:SER:C	1:A:75:LYS:N	1:A:75:LYS:CA	1:A:75:LYS:C	2	1.4
(1,31)	1:A:74:SER:C	1:A:75:LYS:N	1:A:75:LYS:CA	1:A:75:LYS:C	5	1.4
(1,22)	1:A:70:SER:N	1:A:70:SER:CA	1:A:70:SER:C	1:A:71:LYS:N	8	1.4
(1,21)	1:A:69:GLU:C	1:A:70:SER:N	1:A:70:SER:CA	1:A:70:SER:C	2	1.4
(1,96)	1:A:108:LYS:N	1:A:108:LYS:CA	1:A:108:LYS:C	1:A:109:THR:N	3	1.3
(1,32)	1:A:75:LYS:N	1:A:75:LYS:CA	1:A:75:LYS:C	1:A:76:MET:N	1	1.3
(1,119)	1:A:119:LEU:C	1:A:120:HIS:N	1:A:120:HIS:CA	1:A:120:HIS:C	9	1.3
(1,111)	1:A:115:MET:C	1:A:116:ASP:N	1:A:116:ASP:CA	1:A:116:ASP:C	2	1.3
(1,81)	1:A:100:GLY:C	1:A:101:VAL:N	1:A:101:VAL:CA	1:A:101:VAL:C	3	1.2
(1,81)	1:A:100:GLY:C	1:A:101:VAL:N	1:A:101:VAL:CA	1:A:101:VAL:C	4	1.2
(1,61)	1:A:89:LEU:C	1:A:90:GLY:N	1:A:90:GLY:CA	1:A:90:GLY:C	6	1.2
(1,61)	1:A:89:LEU:C	1:A:90:GLY:N	1:A:90:GLY:CA	1:A:90:GLY:C	8	1.2
(1,49)	1:A:83:SER:C	1:A:84:THR:N	1:A:84:THR:CA	1:A:84:THR:C	6	1.2
(1,49)	1:A:83:SER:C	1:A:84:THR:N	1:A:84:THR:CA	1:A:84:THR:C	7	1.2
(1,22)	1:A:70:SER:N	1:A:70:SER:CA	1:A:70:SER:C	1:A:71:LYS:N	2	1.2
(1,16)	1:A:66:GLU:N	1:A:66:GLU:CA	1:A:66:GLU:C	1:A:67:LYS:N	3	1.2
(1,141)	1:A:133:SER:C	1:A:134:GLU:N	1:A:134:GLU:CA	1:A:134:GLU:C	7	1.2
(1,61)	1:A:89:LEU:C	1:A:90:GLY:N	1:A:90:GLY:CA	1:A:90:GLY:C	5	1.1
(1,58)	1:A:88:GLU:N	1:A:88:GLU:CA	1:A:88:GLU:C	1:A:89:LEU:N	5	1.1
(1,57)	1:A:87:GLU:C	1:A:88:GLU:N	1:A:88:GLU:CA	1:A:88:GLU:C	5	1.1
(1,49)	1:A:83:SER:C	1:A:84:THR:N	1:A:84:THR:CA	1:A:84:THR:C	10	1.1
(1,135)	1:A:128:VAL:C	1:A:129:VAL:N	1:A:129:VAL:CA	1:A:129:VAL:C	4	1.1
(1,100)	1:A:110:VAL:N	1:A:110:VAL:CA	1:A:110:VAL:C	1:A:111:SER:N	10	1.1