Full wwPDB NMR Structure Validation Report (i)

Mar 4, 2026 – 09:41 PM UTC

PDB ID	:	9G32 / pdb_00009g32
BMRB ID	:	34936
Title	:	Trp-cage fortified Tc5b-Exenatide chimera (Ex-4-Tc5bDR) at 321K
Authors	:	Horvath, D.
Deposited on	:	2024-07-11

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

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

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

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

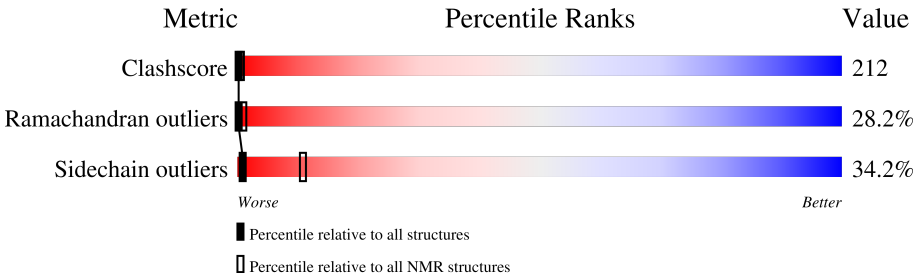
MolProbity	:	4-5-2 with Phenix2.0
Percentile statistics	:	20250101.v01 (using entries in the PDB archive January 1st 2025)
wwPDB-RCI	:	v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV	:	Wang et al. (2010)
wwPDB-ShiftChecker	:	v1.2
BMRB Restraints Analysis	:	v1.2
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP)	:	2.49

1 Overall quality at a glance (i)

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

The overall completeness of chemical shifts assignment is 50%.

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	229148	14424
Ramachandran outliers	224038	12848
Sidechain outliers	223484	12823

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

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	25	20% 24% 24% 24% 8%

2 Ensemble composition and analysis (i)

This entry contains 10 models. The atoms present in the NMR models are not consistent. Some calculations may have failed as a result. All residues are included in the validation scores. Model 1 is the overall representative, medoid model (most similar to other models).

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	**Residue range (total)**	**Backbone RMSD (Å)**	**Medoid model**
1	A:3-A:25 (23)	0.56	1

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

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

NmrClust was unable to cluster the ensemble.

Error message: Inconsistent models in file

3 Entry composition (i)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 385 atoms, of which 189 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Exendin-4.

Mol	Chain	Residues	Atoms					Trace
1	A	25	Total	C	H	N	O	0
			385	123	189	34	39	

There are 4 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	8	TYR	PHE	engineered mutation	UNP P26349
A	10	GLN	GLU	engineered mutation	UNP P26349
A	14	ASP	ASN	engineered mutation	UNP P26349
A	21	ARG	ALA	engineered mutation	UNP P26349

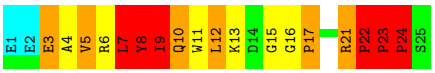
4 Residue-property plots

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: Exendin-4

Chain A:



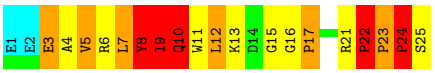
4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1 (medoid)

• Molecule 1: Exendin-4

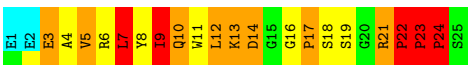
Chain A:



4.2.2 Score per residue for model 2

• Molecule 1: Exendin-4

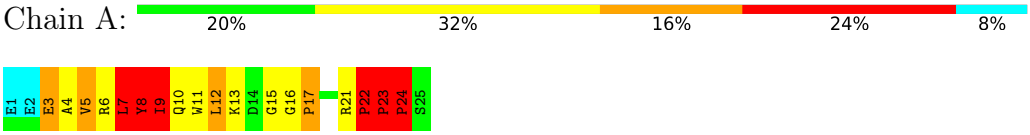
Chain A:



4.2.3 Score per residue for model 3

• Molecule 1: Exendin-4

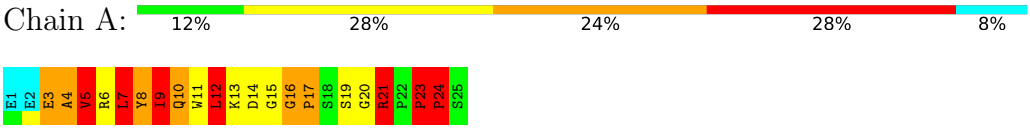
Chain A:



4.2.4 Score per residue for model 4

• Molecule 1: Exendin-4

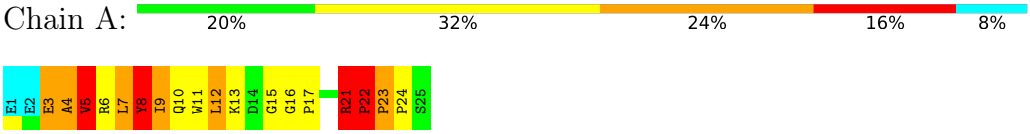
Chain A:



4.2.5 Score per residue for model 5

• Molecule 1: Exendin-4

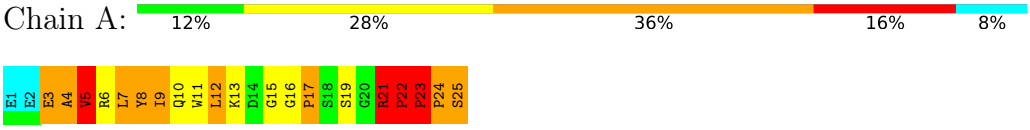
Chain A:



4.2.6 Score per residue for model 6

• Molecule 1: Exendin-4

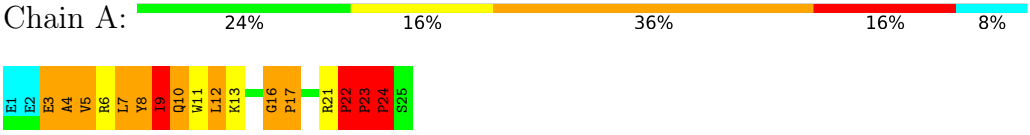
Chain A:



4.2.7 Score per residue for model 7

• Molecule 1: Exendin-4

Chain A:



4.2.8 Score per residue for model 8

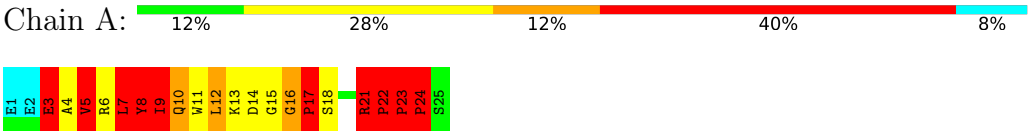
• Molecule 1: Exendin-4

Chain A:

4.2.9 Score per residue for model 9

• Molecule 1: Exendin-4

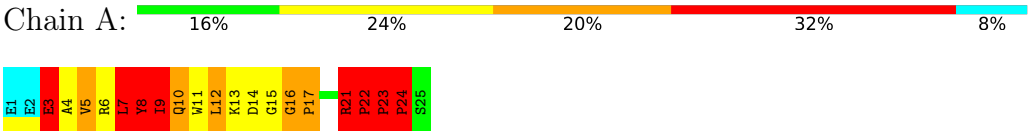
Chain A:



4.2.10 Score per residue for model 10

• Molecule 1: Exendin-4

Chain A:



5 Refinement protocol and experimental data overview

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

Of the 20 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
CcpNmr Analysis Assign	refinement	2.4.1.
ARIA2alpha	structure calculation	2.3.1

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

Chemical shift file(s)	working_cs.cif
Number of chemical shift lists	1
Total number of shifts	162
Number of shifts mapped to atoms	162
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Assignment completeness (well-defined parts)	50%

6 Model quality (i)

6.1 Standard geometry (i)

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	#Z>5	RMSZ	#Z>5
1	A	1.83±0.32	3±2/184 (1.4± 1.1%)	2.10±0.18	9±2/249 (3.8± 0.7%)
All	All	1.86	26/1840 (1.4%)	2.11	94/2490 (3.8%)

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

Mol	Chain	Chirality	Planarity
1	A	0.0±0.0	3.0±1.2
All	All	0	30

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

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	8	TYR	CE1-CZ	21.10	1.89	1.38	5	3
1	A	8	TYR	CE2-CZ	-15.81	1.00	1.38	5	1
1	A	8	TYR	CZ-OH	12.10	1.63	1.38	5	3
1	A	4	ALA	CA-C	-8.03	1.45	1.53	4	1
1	A	5	VAL	N-CA	-7.51	1.36	1.46	7	5
1	A	4	ALA	CA-CB	-6.55	1.44	1.53	4	1
1	A	8	TYR	CA-C	-6.31	1.46	1.53	5	4
1	A	4	ALA	C-N	-6.17	1.25	1.33	4	1
1	A	24	PRO	CA-CB	-6.00	1.45	1.53	4	1
1	A	5	VAL	CA-CB	-5.74	1.46	1.54	8	1
1	A	8	TYR	CA-CB	-5.60	1.44	1.53	1	3
1	A	22	PRO	CA-CB	-5.11	1.47	1.54	8	1
1	A	23	PRO	CA-CB	-5.00	1.47	1.54	8	1

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

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(^{o})	Ideal(^{o})	Models	
								Worst	Total
1	A	23	PRO	N-CA-C	12.90	126.43	110.70	8	10
1	A	24	PRO	N-CA-CB	-12.67	89.95	103.25	9	7
1	A	8	TYR	CE1-CZ-OH	-11.53	85.31	119.90	5	3
1	A	22	PRO	N-CA-CB	-10.48	92.92	103.08	6	9
1	A	21	ARG	CA-C-N	8.55	129.19	120.38	6	7
1	A	21	ARG	C-N-CA	8.55	129.19	120.38	6	7
1	A	23	PRO	CA-C-N	7.33	129.00	119.84	1	9
1	A	23	PRO	C-N-CA	7.33	129.00	119.84	1	9
1	A	16	GLY	CA-C-N	7.08	128.69	119.84	9	5
1	A	16	GLY	C-N-CA	7.08	128.69	119.84	9	5
1	A	22	PRO	CA-C-N	6.82	127.41	120.38	7	3
1	A	22	PRO	C-N-CA	6.82	127.41	120.38	7	3
1	A	8	TYR	CD1-CE1-CZ	-6.77	107.42	119.60	5	1
1	A	4	ALA	N-CA-C	-6.70	103.98	111.28	7	2
1	A	7	LEU	CB-CA-C	-6.70	100.32	110.90	4	1
1	A	8	TYR	CE1-CZ-CE2	-6.38	107.54	120.30	3	2
1	A	8	TYR	CB-CG-CD2	-5.82	112.07	120.80	1	1
1	A	5	VAL	N-CA-CB	-5.74	101.76	111.23	8	2
1	A	17	PRO	CA-N-CD	-5.58	104.19	112.00	9	1
1	A	23	PRO	O-C-N	5.51	127.96	121.46	8	2
1	A	13	LYS	N-CA-C	-5.25	106.14	112.54	2	1
1	A	4	ALA	CB-CA-C	-5.18	102.77	112.30	4	1
1	A	10	GLN	CA-C-N	5.05	127.31	120.44	1	1
1	A	10	GLN	C-N-CA	5.05	127.31	120.44	1	1
1	A	12	LEU	N-CA-C	-5.00	107.25	113.55	4	1

There are no chirality outliers.

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

Mol	Chain	Res	Type	Group	Models (Total)
1	A	3	GLU	Peptide	10
1	A	23	PRO	Peptide	8
1	A	7	LEU	Peptide	6
1	A	8	TYR	Sidechain	5
1	A	20	GLY	Peptide	1

6.2 Too-close contacts (i)

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

averaged over the ensemble.

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	178	175	175	75±8
All	All	1780	1750	1750	747

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 212.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:8:TYR:CE1	1:A:8:TYR:CZ	1.54	1.88	5	1
1:A:8:TYR:CZ	1:A:8:TYR:OH	1.52	1.63	5	1
1:A:11:TRP:CH2	1:A:23:PRO:HG3	1.11	1.80	8	9
1:A:3:GLU:HA	1:A:5:VAL:HG12	0.99	1.34	2	9
1:A:5:VAL:HA	1:A:8:TYR:CB	0.91	1.94	1	5
1:A:11:TRP:CE3	1:A:12:LEU:HD11	0.90	2.02	4	10
1:A:11:TRP:CD2	1:A:24:PRO:HD2	0.89	2.03	4	8
1:A:8:TYR:HA	1:A:24:PRO:CG	0.88	1.99	1	10
1:A:12:LEU:HD22	1:A:12:LEU:N	0.85	1.87	10	10
1:A:9:ILE:HA	1:A:12:LEU:HD23	0.84	1.48	9	6
1:A:11:TRP:CE3	1:A:24:PRO:HD2	0.82	2.08	3	10
1:A:12:LEU:HD12	1:A:16:GLY:HA2	0.82	1.51	6	7
1:A:5:VAL:HA	1:A:8:TYR:HB2	0.82	1.51	7	4
1:A:8:TYR:CE1	1:A:8:TYR:CE2	0.81	2.39	5	1
1:A:11:TRP:CZ2	1:A:17:PRO:HD3	0.80	2.12	8	10
1:A:4:ALA:O	1:A:7:LEU:HG	0.79	1.76	8	8
1:A:5:VAL:HA	1:A:8:TYR:HB3	0.78	1.55	8	10
1:A:5:VAL:N	1:A:8:TYR:HB3	0.77	1.95	4	1
1:A:8:TYR:CE1	1:A:8:TYR:OH	0.75	2.39	5	1
1:A:9:ILE:CA	1:A:12:LEU:HD23	0.74	2.11	10	3
1:A:11:TRP:CH2	1:A:17:PRO:HG3	0.74	2.18	10	2
1:A:8:TYR:CD1	1:A:24:PRO:CB	0.73	2.72	8	7
1:A:8:TYR:CE1	1:A:12:LEU:HD21	0.72	2.19	4	5
1:A:5:VAL:CA	1:A:8:TYR:HB3	0.72	2.15	4	6
1:A:11:TRP:CD1	1:A:21:ARG:HG2	0.72	2.19	6	8
1:A:3:GLU:CA	1:A:5:VAL:HG12	0.72	2.13	4	7
1:A:6:ARG:N	1:A:9:ILE:HD11	0.72	1.99	7	9
1:A:11:TRP:HE3	1:A:12:LEU:HD21	0.72	1.44	9	10
1:A:4:ALA:O	1:A:8:TYR:HB2	0.71	1.85	6	8
1:A:8:TYR:HD1	1:A:24:PRO:CB	0.69	1.99	4	2
1:A:11:TRP:CH2	1:A:17:PRO:HD3	0.69	2.22	6	7
1:A:5:VAL:HG13	1:A:6:ARG:HD2	0.68	1.63	4	7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:11:TRP:CZ3	1:A:12:LEU:HD11	0.68	2.24	9	10
1:A:10:GLN:N	1:A:13:LYS:HD3	0.67	2.04	7	4
1:A:9:ILE:HB	1:A:13:LYS:CD	0.67	2.19	10	9
1:A:8:TYR:HA	1:A:24:PRO:HG2	0.66	1.66	1	4
1:A:9:ILE:HD12	1:A:10:GLN:H	0.66	1.49	10	8
1:A:11:TRP:CD1	1:A:21:ARG:CG	0.66	2.79	6	4
1:A:12:LEU:CD1	1:A:16:GLY:HA2	0.66	2.19	5	8
1:A:8:TYR:CD1	1:A:24:PRO:HG2	0.66	2.25	1	4
1:A:5:VAL:HG22	1:A:9:ILE:HG13	0.65	1.68	6	7
1:A:12:LEU:HD22	1:A:12:LEU:H	0.65	1.49	3	5
1:A:12:LEU:N	1:A:12:LEU:CD2	0.65	2.59	9	7
1:A:5:VAL:O	1:A:6:ARG:HB2	0.65	1.90	6	9
1:A:11:TRP:CE3	1:A:12:LEU:HD21	0.65	2.27	8	10
1:A:7:LEU:HD23	1:A:7:LEU:N	0.65	2.06	7	10
1:A:9:ILE:CD1	1:A:10:GLN:H	0.64	2.06	2	8
1:A:11:TRP:HD1	1:A:21:ARG:CG	0.64	2.05	9	4
1:A:11:TRP:CZ2	1:A:17:PRO:HG3	0.64	2.28	10	2
1:A:8:TYR:CB	1:A:24:PRO:HB3	0.63	2.23	8	6
1:A:11:TRP:CE3	1:A:12:LEU:CD1	0.63	2.82	7	10
1:A:5:VAL:O	1:A:7:LEU:HG	0.63	1.93	4	6
1:A:3:GLU:C	1:A:5:VAL:H	0.62	2.02	1	5
1:A:12:LEU:H	1:A:12:LEU:HD22	0.62	1.54	1	3
1:A:8:TYR:CD1	1:A:24:PRO:HB2	0.62	2.29	4	5
1:A:4:ALA:O	1:A:5:VAL:HB	0.62	1.92	4	1
1:A:5:VAL:CG2	1:A:9:ILE:HG13	0.62	2.24	6	10
1:A:9:ILE:C	1:A:13:LYS:HD3	0.61	2.20	7	3
1:A:8:TYR:C	1:A:9:ILE:HD12	0.61	2.20	1	2
1:A:12:LEU:HA	1:A:16:GLY:N	0.61	2.11	2	9
1:A:5:VAL:CA	1:A:8:TYR:HB2	0.61	2.23	6	4
1:A:6:ARG:CA	1:A:9:ILE:HD11	0.61	2.26	7	8
1:A:8:TYR:CD1	1:A:24:PRO:HB3	0.61	2.30	8	3
1:A:8:TYR:O	1:A:11:TRP:HB3	0.61	1.96	5	7
1:A:8:TYR:HA	1:A:24:PRO:CB	0.60	2.26	6	1
1:A:11:TRP:HB3	1:A:12:LEU:HD22	0.60	1.74	8	8
1:A:5:VAL:N	1:A:8:TYR:HD2	0.60	1.95	9	4
1:A:8:TYR:CD1	1:A:8:TYR:C	0.59	2.77	3	6
1:A:6:ARG:H	1:A:9:ILE:HD11	0.59	1.54	7	4
1:A:5:VAL:O	1:A:5:VAL:HG22	0.59	1.96	8	1
1:A:8:TYR:HD1	1:A:24:PRO:HB2	0.59	1.56	4	1
1:A:3:GLU:HG2	1:A:7:LEU:HD21	0.59	1.73	7	1
1:A:8:TYR:HB2	1:A:24:PRO:HB3	0.59	1.74	2	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:11:TRP:CZ2	1:A:23:PRO:HD3	0.59	2.32	6	4
1:A:8:TYR:O	1:A:10:GLN:HG3	0.59	1.98	7	1
1:A:9:ILE:HB	1:A:13:LYS:HD3	0.58	1.75	3	9
1:A:11:TRP:CZ2	1:A:23:PRO:HG3	0.58	2.31	8	5
1:A:3:GLU:HG2	1:A:4:ALA:N	0.58	2.14	2	6
1:A:11:TRP:CD2	1:A:24:PRO:CD	0.57	2.86	4	10
1:A:11:TRP:CH2	1:A:23:PRO:CG	0.57	2.77	7	7
1:A:21:ARG:HB2	1:A:22:PRO:CD	0.57	2.29	5	4
1:A:4:ALA:C	1:A:8:TYR:HB2	0.57	2.25	6	1
1:A:9:ILE:HD12	1:A:9:ILE:N	0.56	2.15	6	8
1:A:4:ALA:C	1:A:8:TYR:HD2	0.56	2.09	1	3
1:A:5:VAL:HG13	1:A:6:ARG:CD	0.56	2.30	9	5
1:A:5:VAL:HG22	1:A:9:ILE:CG1	0.56	2.31	9	9
1:A:11:TRP:CZ2	1:A:17:PRO:CD	0.55	2.87	8	7
1:A:4:ALA:O	1:A:8:TYR:CB	0.55	2.54	10	5
1:A:8:TYR:HA	1:A:24:PRO:HG3	0.55	1.77	1	3
1:A:11:TRP:CH2	1:A:23:PRO:CB	0.54	2.90	3	4
1:A:11:TRP:HE1	1:A:21:ARG:C	0.54	2.09	6	4
1:A:10:GLN:O	1:A:14:ASP:HB2	0.54	2.03	10	1
1:A:11:TRP:HB3	1:A:12:LEU:CD2	0.53	2.33	4	4
1:A:4:ALA:HB1	1:A:8:TYR:CE2	0.53	2.37	7	2
1:A:10:GLN:HA	1:A:13:LYS:HB2	0.53	1.80	8	3
1:A:5:VAL:O	1:A:5:VAL:HG13	0.53	2.04	8	1
1:A:3:GLU:C	1:A:5:VAL:N	0.53	2.65	3	5
1:A:8:TYR:CG	1:A:24:PRO:HB3	0.53	2.39	10	4
1:A:5:VAL:HA	1:A:8:TYR:CD2	0.53	2.38	9	5
1:A:5:VAL:O	1:A:6:ARG:HD2	0.53	2.04	8	1
1:A:12:LEU:CD1	1:A:17:PRO:HD2	0.53	2.34	10	2
1:A:5:VAL:HG13	1:A:6:ARG:N	0.52	2.20	5	9
1:A:11:TRP:CE3	1:A:24:PRO:CD	0.52	2.92	7	7
1:A:7:LEU:HD23	1:A:7:LEU:H	0.52	1.64	1	7
1:A:7:LEU:CD2	1:A:7:LEU:H	0.52	2.18	1	5
1:A:8:TYR:CD1	1:A:12:LEU:HD21	0.52	2.39	4	6
1:A:8:TYR:CE1	1:A:12:LEU:CD2	0.52	2.92	4	2
1:A:7:LEU:H	1:A:7:LEU:CD2	0.52	2.16	7	3
1:A:9:ILE:CD1	1:A:10:GLN:HG2	0.51	2.35	10	4
1:A:3:GLU:O	1:A:3:GLU:HG2	0.51	2.04	5	1
1:A:17:PRO:HA	1:A:21:ARG:O	0.51	2.05	3	1
1:A:11:TRP:CE2	1:A:17:PRO:HD3	0.51	2.40	2	4
1:A:5:VAL:C	1:A:7:LEU:H	0.51	2.13	5	2
1:A:8:TYR:CG	1:A:9:ILE:N	0.51	2.77	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:10:GLN:N	1:A:13:LYS:HD2	0.51	2.21	1	1
1:A:21:ARG:CB	1:A:22:PRO:CD	0.51	2.89	10	4
1:A:9:ILE:C	1:A:11:TRP:H	0.50	2.14	10	2
1:A:5:VAL:CA	1:A:8:TYR:CD2	0.50	2.94	9	1
1:A:11:TRP:C	1:A:12:LEU:HD22	0.49	2.31	10	2
1:A:8:TYR:O	1:A:11:TRP:N	0.49	2.39	1	1
1:A:5:VAL:CA	1:A:8:TYR:HD2	0.49	2.21	9	1
1:A:7:LEU:N	1:A:7:LEU:CD2	0.49	2.74	1	4
1:A:23:PRO:HB3	1:A:25:SER:HB2	0.49	1.84	6	2
1:A:9:ILE:O	1:A:13:LYS:N	0.49	2.39	7	3
1:A:11:TRP:CE3	1:A:12:LEU:CD2	0.48	2.96	8	4
1:A:4:ALA:HA	1:A:25:SER:OXT	0.48	2.08	1	1
1:A:3:GLU:CG	1:A:7:LEU:HD21	0.48	2.38	7	1
1:A:9:ILE:C	1:A:11:TRP:N	0.48	2.71	10	5
1:A:11:TRP:CZ2	1:A:23:PRO:CD	0.48	2.96	6	3
1:A:3:GLU:HG3	1:A:6:ARG:HB2	0.48	1.85	8	1
1:A:4:ALA:C	1:A:8:TYR:CD2	0.47	2.91	1	4
1:A:12:LEU:N	1:A:12:LEU:HD13	0.47	2.24	7	5
1:A:5:VAL:HA	1:A:9:ILE:HG13	0.47	1.85	4	1
1:A:3:GLU:HG2	1:A:3:GLU:O	0.47	2.08	7	1
1:A:9:ILE:C	1:A:13:LYS:HG3	0.47	2.34	1	1
1:A:9:ILE:O	1:A:12:LEU:N	0.47	2.47	1	3
1:A:6:ARG:C	1:A:9:ILE:HD11	0.47	2.35	4	4
1:A:8:TYR:O	1:A:9:ILE:C	0.47	2.58	5	8
1:A:8:TYR:C	1:A:8:TYR:HD1	0.46	2.16	5	1
1:A:5:VAL:O	1:A:6:ARG:CB	0.46	2.63	6	5
1:A:11:TRP:CH2	1:A:23:PRO:HB3	0.46	2.46	3	1
1:A:5:VAL:C	1:A:7:LEU:N	0.45	2.73	5	2
1:A:5:VAL:CG2	1:A:9:ILE:CG1	0.45	2.94	10	2
1:A:3:GLU:CG	1:A:4:ALA:N	0.45	2.79	8	1
1:A:8:TYR:O	1:A:12:LEU:HD22	0.45	2.11	5	2
1:A:3:GLU:CD	1:A:7:LEU:HD21	0.45	2.37	9	2
1:A:8:TYR:O	1:A:10:GLN:N	0.45	2.49	7	2
1:A:11:TRP:CH2	1:A:17:PRO:CG	0.44	2.96	10	2
1:A:9:ILE:CD1	1:A:9:ILE:N	0.44	2.77	10	4
1:A:8:TYR:HE1	1:A:12:LEU:HD21	0.44	1.67	3	1
1:A:10:GLN:CA	1:A:13:LYS:HD3	0.44	2.43	8	1
1:A:11:TRP:HD1	1:A:21:ARG:HG3	0.44	1.72	9	1
1:A:9:ILE:N	1:A:9:ILE:CD1	0.44	2.77	3	1
1:A:11:TRP:CZ2	1:A:23:PRO:CA	0.44	3.01	10	4
1:A:16:GLY:O	1:A:18:SER:N	0.44	2.51	2	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:11:TRP:CH2	1:A:23:PRO:CA	0.43	3.01	10	3
1:A:4:ALA:HB1	1:A:8:TYR:CD2	0.43	2.48	6	1
1:A:3:GLU:HA	1:A:5:VAL:CG1	0.43	2.36	8	1
1:A:11:TRP:C	1:A:14:ASP:HB2	0.43	2.39	4	2
1:A:9:ILE:HD13	1:A:10:GLN:HG2	0.43	1.90	4	1
1:A:12:LEU:H	1:A:12:LEU:CD2	0.43	2.23	3	1
1:A:12:LEU:CD2	1:A:12:LEU:H	0.43	2.24	8	1
1:A:9:ILE:CD1	1:A:10:GLN:N	0.43	2.81	10	2
1:A:5:VAL:HG22	1:A:6:ARG:H	0.43	1.73	10	5
1:A:23:PRO:HA	1:A:24:PRO:HD2	0.42	1.58	6	2
1:A:8:TYR:HD1	1:A:24:PRO:HG2	0.42	1.74	3	1
1:A:12:LEU:HA	1:A:16:GLY:H	0.42	1.73	1	1
1:A:5:VAL:O	1:A:7:LEU:N	0.42	2.51	4	2
1:A:11:TRP:CZ2	1:A:23:PRO:CG	0.42	3.02	1	1
1:A:4:ALA:HB1	1:A:8:TYR:HE2	0.42	1.75	7	1
1:A:8:TYR:CA	1:A:24:PRO:HB3	0.42	2.45	8	1
1:A:9:ILE:HB	1:A:13:LYS:HE3	0.42	1.91	1	1
1:A:9:ILE:O	1:A:11:TRP:N	0.41	2.53	1	1
1:A:11:TRP:CZ2	1:A:23:PRO:HA	0.41	2.50	9	3
1:A:11:TRP:CZ2	1:A:23:PRO:N	0.41	2.88	5	3
1:A:11:TRP:CH2	1:A:23:PRO:HA	0.41	2.49	10	1
1:A:8:TYR:O	1:A:11:TRP:CB	0.41	2.67	5	1
1:A:8:TYR:HA	1:A:24:PRO:HB3	0.41	1.92	4	1
1:A:8:TYR:CG	1:A:24:PRO:HB2	0.41	2.50	6	1
1:A:11:TRP:O	1:A:14:ASP:HB3	0.41	2.16	10	1
1:A:19:SER:HB3	1:A:21:ARG:HB3	0.41	1.93	2	2
1:A:11:TRP:C	1:A:14:ASP:HB3	0.40	2.41	10	1
1:A:8:TYR:CD1	1:A:24:PRO:CG	0.40	3.04	7	1
1:A:11:TRP:CZ2	1:A:17:PRO:CG	0.40	3.04	9	1
1:A:11:TRP:O	1:A:14:ASP:HB2	0.40	2.15	4	1
1:A:9:ILE:O	1:A:13:LYS:HG3	0.40	2.16	6	1
1:A:19:SER:HB3	1:A:21:ARG:HD3	0.40	1.92	6	1

6.3 Torsion angles (i)

6.3.1 Protein backbone (i)

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles
1	A	22/25 (88%)	9±1 (41±5%)	7±1 (30±6%)	6±2 (28±8%)	0 1
All	All	220/250 (88%)	91 (41%)	67 (30%)	62 (28%)	0 1

All 13 unique Ramachandran outliers are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	17	PRO	9
1	A	22	PRO	9
1	A	9	ILE	8
1	A	15	GLY	8
1	A	24	PRO	8
1	A	5	VAL	6
1	A	10	GLN	5
1	A	23	PRO	3
1	A	3	GLU	2
1	A	8	TYR	1
1	A	21	ARG	1
1	A	4	ALA	1
1	A	18	SER	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	19/21 (90%)	12±1 (66±7%)	6±1 (34±7%)	1 11
All	All	190/210 (90%)	125 (66%)	65 (34%)	1 11

All 12 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	7	LEU	10
1	A	9	ILE	10
1	A	12	LEU	10
1	A	22	PRO	9
1	A	24	PRO	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	21	ARG	4
1	A	8	TYR	3
1	A	23	PRO	3
1	A	14	ASP	2
1	A	5	VAL	2
1	A	25	SER	2
1	A	10	GLN	1

6.3.3 RNA

There are no RNA molecules in this entry.

6.4 Non-standard residues in protein, DNA, RNA chains

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

6.5 Carbohydrates

There are no oligosaccharides in this entry.

6.6 Ligand geometry

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers

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

The completeness of assignment taking into account all chemical shift lists is 50% for the well-defined parts and 49% for the entire structure.

7.1 Chemical shift list 1

File name: working_cs.cif

Chemical shift list name: *nef_chemical_shift_list_ShiftList_1*

7.1.1 Bookkeeping

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	162
Number of shifts mapped to atoms	162
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Number of shift outliers (ShiftChecker)	1

7.1.2 Chemical shift referencing

No chemical shift referencing corrections were calculated (not enough data).

7.1.3 Completeness of resonance assignments

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the well-defined regions of the structure. The overall completeness is 50%, i.e. 152 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 305. 0 out of 3 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	^{1}H	^{13}C	^{15}N
Backbone	39/110 (35%)	39/45 (87%)	0/46 (0%)	0/19 (0%)
Sidechain	103/174 (59%)	103/113 (91%)	0/53 (0%)	0/8 (0%)
Aromatic	10/21 (48%)	10/10 (100%)	0/10 (0%)	0/1 (0%)
Overall	152/305 (50%)	152/168 (90%)	0/109 (0%)	0/28 (0%)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 49%, i.e. 162 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 329. 0 out of 3 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	^{1}H	^{13}C	^{15}N
Backbone	41/120 (34%)	41/49 (84%)	0/50 (0%)	0/21 (0%)
Sidechain	111/188 (59%)	111/121 (92%)	0/59 (0%)	0/8 (0%)
Aromatic	10/21 (48%)	10/10 (100%)	0/10 (0%)	0/1 (0%)
Overall	162/329 (49%)	162/180 (90%)	0/119 (0%)	0/30 (0%)

7.1.4 Statistically unusual chemical shifts (i)

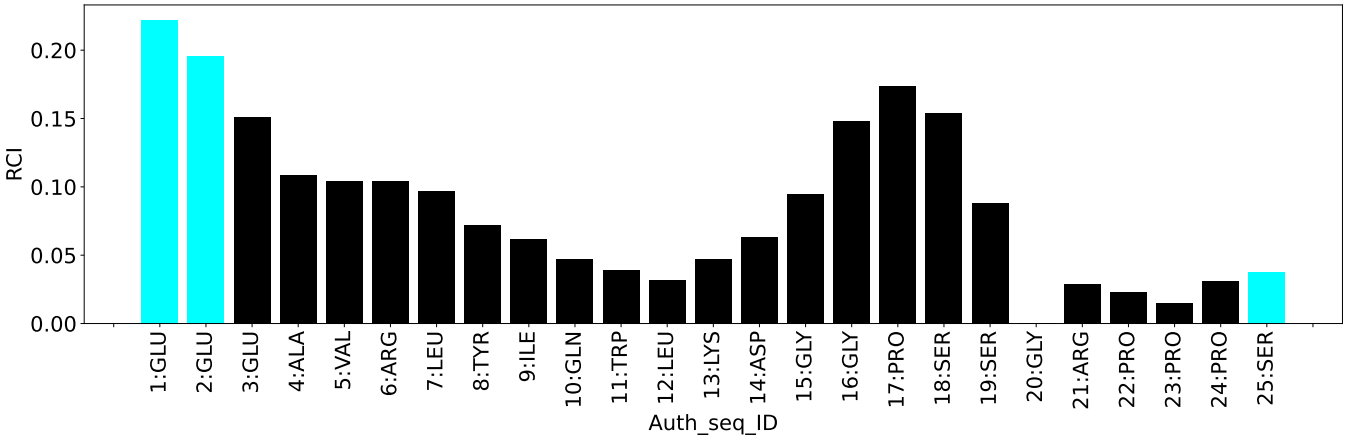
The following table lists the statistically unusual chemical shifts. These are statistical measures, and large deviations from the mean do not necessarily imply incorrect assignments. Molecules containing paramagnetic centres or hemes are expected to give rise to anomalous chemical shifts.

List Id	Chain	Res	Type	Atom	Shift, *ppm*	Expected range, *ppm*	Z-score
1	A	16	GLY	HA2	1.78	2.15 – 5.77	-6.0

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	1596
Intra-residue (|i-j|=0)	735
Sequential (|i-j|=1)	314
Medium range (|i-j|>1 and |i-j|<5)	297
Long range (|i-j|≥5)	250
Inter-chain	0
Hydrogen bond restraints	0
Disulfide bond restraints	0
Total dihedral-angle restraints	0
Number of unmapped restraints	0
Number of restraints per residue	63.8
Number of long range restraints per residue[1]	10.0

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

8.2 Residual restraint violations

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)	99.9	0.2
0.2-0.5 (Medium)	192.3	0.5
>0.5 (Large)	370.4	6.21

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

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

9 Distance violation analysis (i)

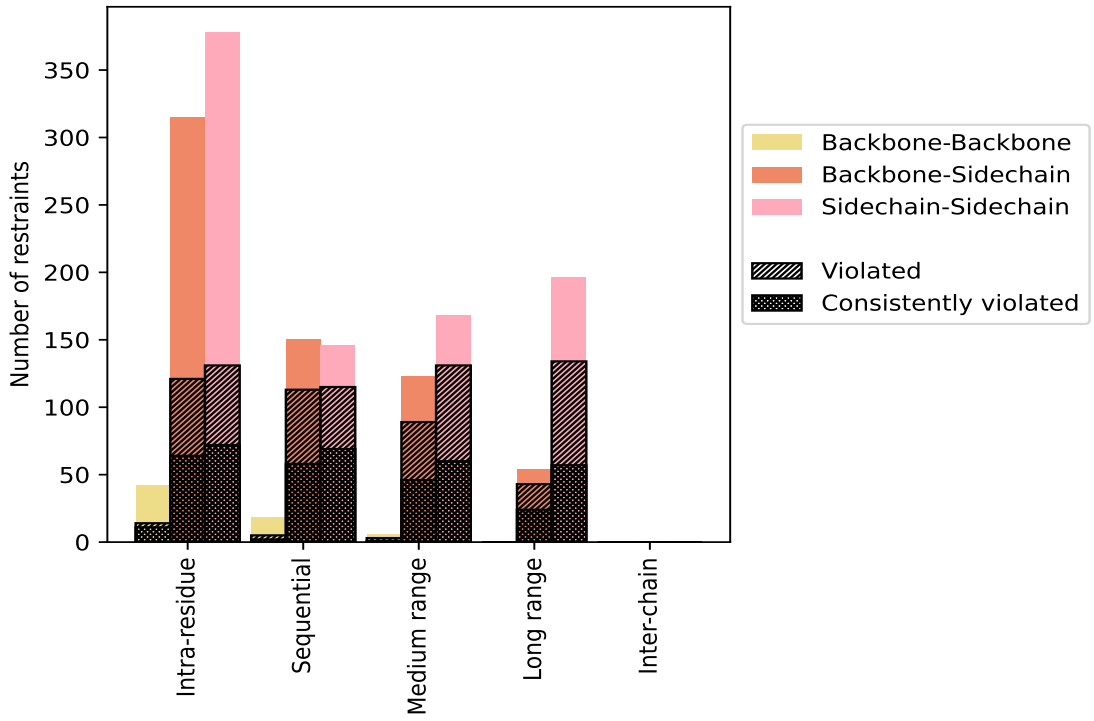
9.1 Summary of distance violations (i)

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

Restraints type	Count	%[1]	Violated[3]			Consistently Violated[4]		
			Count	%[2]	%[1]	Count	%[2]	%[1]
Intra-residue (|i-j|=0)	735	46.1	266	36.2	16.7	147	20.0	9.2
Backbone-Backbone	42	2.6	14	33.3	0.9	11	26.2	0.7
Backbone-Sidechain	315	19.7	121	38.4	7.6	64	20.3	4.0
Sidechain-Sidechain	378	23.7	131	34.7	8.2	72	19.0	4.5
Sequential (|i-j|=1)	314	19.7	233	74.2	14.6	129	41.1	8.1
Backbone-Backbone	18	1.1	5	27.8	0.3	2	11.1	0.1
Backbone-Sidechain	150	9.4	113	75.3	7.1	58	38.7	3.6
Sidechain-Sidechain	146	9.1	115	78.8	7.2	69	47.3	4.3
Medium range (|i-j|>1 & |i-j|<5)	297	18.6	223	75.1	14.0	107	36.0	6.7
Backbone-Backbone	6	0.4	3	50.0	0.2	1	16.7	0.1
Backbone-Sidechain	123	7.7	89	72.4	5.6	46	37.4	2.9
Sidechain-Sidechain	168	10.5	131	78.0	8.2	60	35.7	3.8
Long range (|i-j|≥5)	250	15.7	177	70.8	11.1	81	32.4	5.1
Backbone-Backbone	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	54	3.4	43	79.6	2.7	24	44.4	1.5
Sidechain-Sidechain	196	12.3	134	68.4	8.4	57	29.1	3.6
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	1596	100.0	899	56.3	56.3	464	29.1	29.1
Backbone-Backbone	66	4.1	22	33.3	1.4	14	21.2	0.9
Backbone-Sidechain	642	40.2	366	57.0	22.9	192	29.9	12.0
Sidechain-Sidechain	888	55.6	511	57.5	32.0	258	29.1	16.2

[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



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

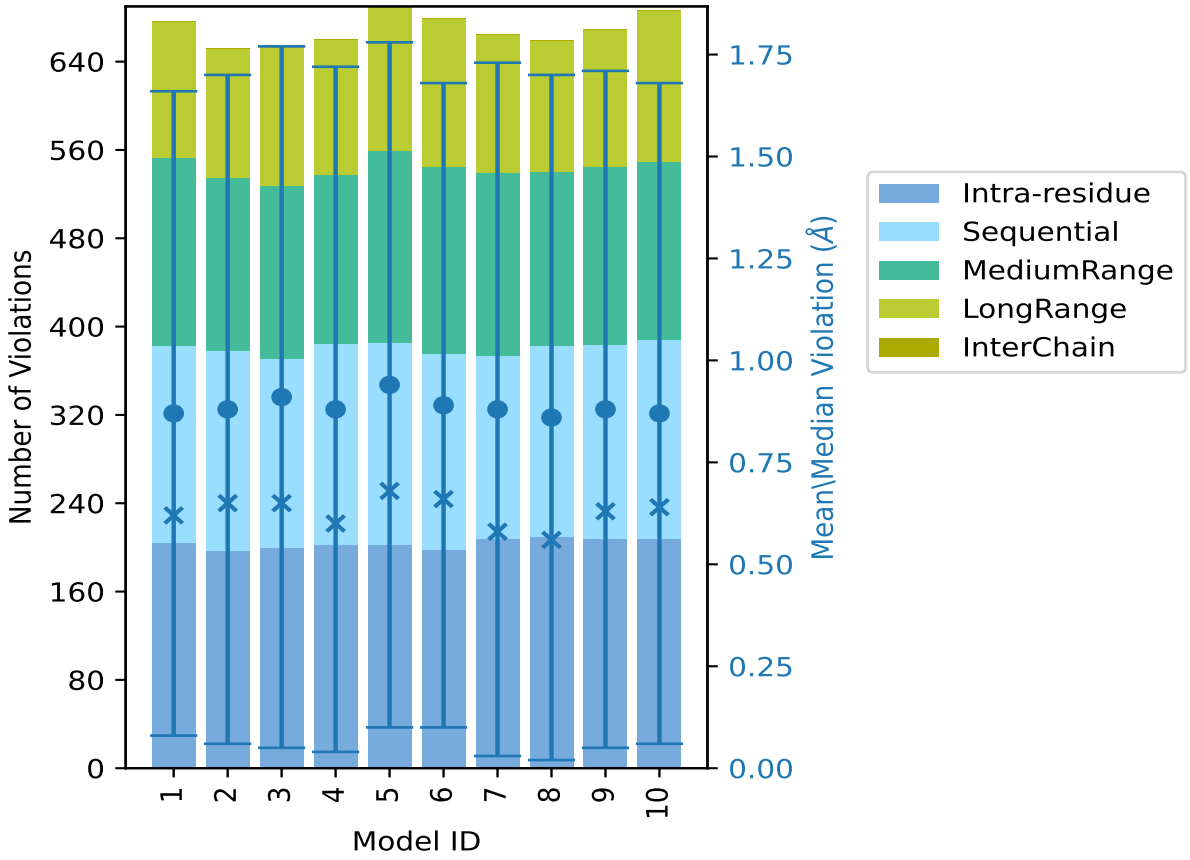
9.2 Distance violation statistics for each model

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

Model ID	Number of violations						Mean (Å)	Max (Å)	SD[6] (Å)	Median (Å)
	IR[1]	SQ[2]	MR[3]	LR[4]	IC[5]	Total				
1	204	179	170	123	0	676	0.87	4.58	0.79	0.62
2	197	181	157	117	0	652	0.88	5.11	0.82	0.65
3	200	171	157	127	0	655	0.91	6.02	0.86	0.65
4	202	182	153	123	0	660	0.88	5.18	0.84	0.6
5	203	183	173	131	0	690	0.94	5.2	0.84	0.68
6	198	177	170	134	0	679	0.89	4.57	0.79	0.66
7	208	166	166	125	0	665	0.88	6.21	0.85	0.58
8	210	173	157	119	0	659	0.86	5.7	0.84	0.56
9	208	175	162	124	0	669	0.88	5.34	0.83	0.63
10	208	180	161	137	0	686	0.87	4.98	0.81	0.64

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

9.2.1 Bar graph : Distance Violation statistics for each model



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

9.3 Distance violation statistics for the ensemble

Violation analysis may find that some restraints are violated in few models and some are violated in most of models. The following table provides this information as number of violated restraints for a given fraction of the ensemble. In total, 697(IR:469, SQ:81, MR:74, LR:73, 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]	%
22	17	16	8	0	63	1	10.0
8	8	18	16	0	50	2	20.0
21	21	10	7	0	59	3	30.0

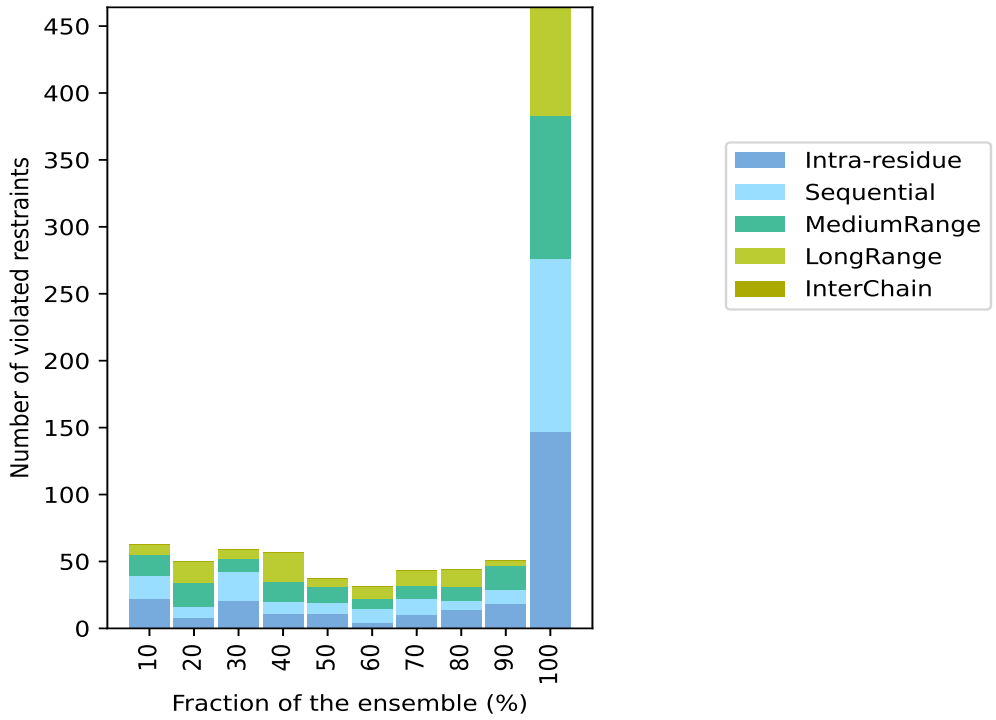
Continued on next page...

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]	%
11	9	15	22	0	57	4	40.0
11	8	12	6	0	37	5	50.0
4	11	7	9	0	31	6	60.0
10	12	10	11	0	43	7	70.0
14	7	10	13	0	44	8	80.0
18	11	18	4	0	51	9	90.0
147	129	107	81	0	464	10	100.0

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

9.3.1 Bar graph : Distance violation statistics for the ensemble

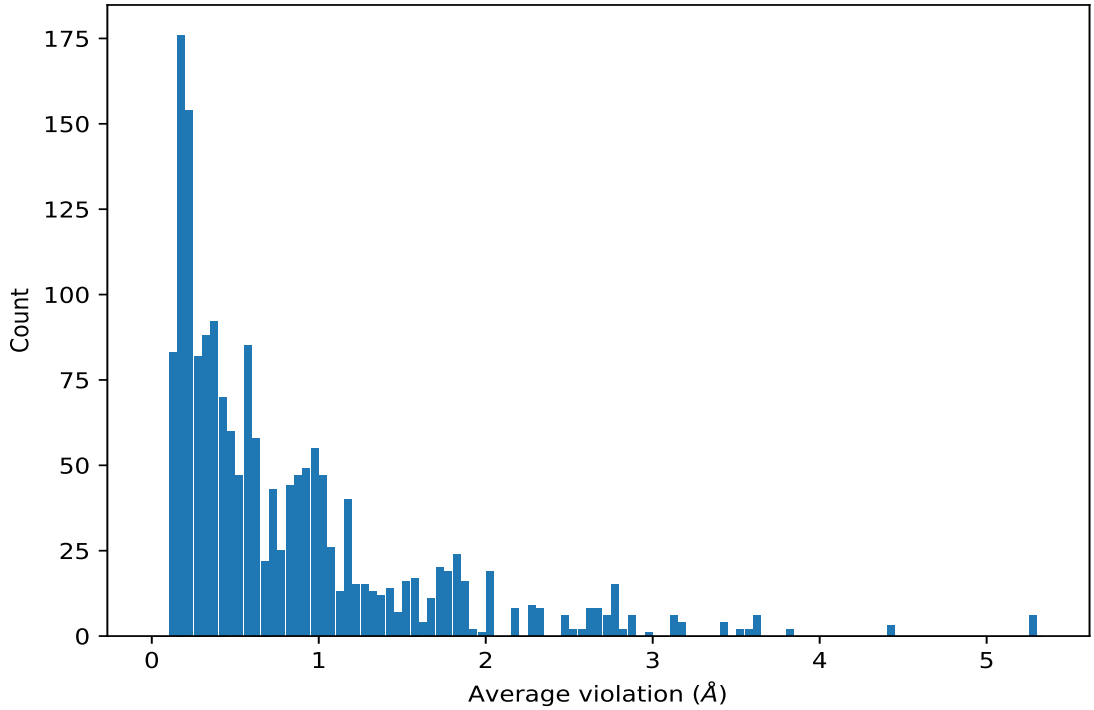


9.4 Most violated distance restraints in the ensemble

9.4.1 Histogram : Distribution of mean distance violations

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

The following table provides the mean and the standard deviation of theviolation 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)
(2,465)	1:12:A:LEU:HD21	1:18:A:SER:HB2	10	5.29	0.52	5.19
(2,465)	1:12:A:LEU:HD22	1:18:A:SER:HB2	10	5.29	0.52	5.19
(2,465)	1:12:A:LEU:HD23	1:18:A:SER:HB2	10	5.29	0.52	5.19
(4,152)	1:12:A:LEU:HD21	1:18:A:SER:HB2	10	5.29	0.52	5.19
(4,152)	1:12:A:LEU:HD22	1:18:A:SER:HB2	10	5.29	0.52	5.19
(4,152)	1:12:A:LEU:HD23	1:18:A:SER:HB2	10	5.29	0.52	5.19
(1,465)	1:12:A:LEU:HD21	1:18:A:SER:HB2	10	4.41	0.52	4.31
(1,465)	1:12:A:LEU:HD22	1:18:A:SER:HB2	10	4.41	0.52	4.31
(1,465)	1:12:A:LEU:HD23	1:18:A:SER:HB2	10	4.41	0.52	4.31
(2,353)	1:14:A:ASP:H	1:21:A:ARG:HG2	10	3.82	0.27	3.8
(4,92)	1:14:A:ASP:H	1:21:A:ARG:HG2	10	3.82	0.27	3.8
(2,463)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HA	10	3.6	0.08	3.58
(2,463)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HA	10	3.6	0.08	3.58
(2,463)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HA	10	3.6	0.08	3.58
(4,151)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HA	10	3.6	0.08	3.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(4,151)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HA	10	3.6	0.08	3.58
(4,151)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HA	10	3.6	0.08	3.58
(2,315)	1:11:A:TRP:HE3	1:23:A:PRO:HD2	10	3.57	0.19	3.64
(4,71)	1:11:A:TRP:HE3	1:23:A:PRO:HD2	10	3.57	0.19	3.64
(2,499)	1:12:A:LEU:HB3	1:13:A:LYS:HG2	10	3.52	0.23	3.51
(4,167)	1:12:A:LEU:HB3	1:13:A:LYS:HG2	10	3.52	0.23	3.51
(2,238)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HD2	10	3.4	0.4	3.51
(2,238)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HD2	10	3.4	0.4	3.51
(4,44)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HD2	10	3.4	0.4	3.51
(4,44)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HD2	10	3.4	0.4	3.51
(2,405)	1:17:A:PRO:HG2	1:19:A:SER:HB3	10	3.18	0.53	2.93
(2,405)	1:17:A:PRO:HG3	1:19:A:SER:HB3	10	3.18	0.53	2.93
(4,116)	1:17:A:PRO:HG2	1:19:A:SER:HB3	10	3.18	0.53	2.93
(4,116)	1:17:A:PRO:HG3	1:19:A:SER:HB3	10	3.18	0.53	2.93
(2,439)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD21	10	3.12	0.26	3.08
(2,439)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD22	10	3.12	0.26	3.08
(2,439)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD23	10	3.12	0.26	3.08
(4,138)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD21	10	3.12	0.26	3.08
(4,138)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD22	10	3.12	0.26	3.08
(4,138)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD23	10	3.12	0.26	3.08
(1,353)	1:14:A:ASP:H	1:21:A:ARG:HG2	10	2.95	0.27	2.92
(2,527)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HB	10	2.86	0.06	2.85
(2,527)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HB	10	2.86	0.06	2.85
(2,527)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HB	10	2.86	0.06	2.85
(4,178)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HB	10	2.86	0.06	2.85
(4,178)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HB	10	2.86	0.06	2.85
(4,178)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HB	10	2.86	0.06	2.85
(2,387)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HG12	10	2.84	0.18	2.86
(4,109)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HG12	10	2.84	0.18	2.86
(2,419)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HG2	10	2.77	0.28	2.62
(2,419)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HG2	10	2.77	0.28	2.62
(4,127)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HG2	10	2.77	0.28	2.62
(4,127)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HG2	10	2.77	0.28	2.62
(2,241)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HE1	10	2.76	0.53	2.58
(2,241)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HE2	10	2.76	0.53	2.58
(2,241)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HE1	10	2.76	0.53	2.58
(2,241)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HE2	10	2.76	0.53	2.58
(4,45)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HE1	10	2.76	0.53	2.58
(4,45)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HE2	10	2.76	0.53	2.58
(4,45)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HE1	10	2.76	0.53	2.58
(4,45)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HE2	10	2.76	0.53	2.58
(1,463)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HA	10	2.75	0.08	2.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(1,463)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HA	10	2.75	0.08	2.72
(1,463)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HA	10	2.75	0.08	2.72
(2,253)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HG2	10	2.7	0.59	2.93
(2,253)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HG2	10	2.7	0.59	2.93
(4,49)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HG2	10	2.7	0.59	2.93
(4,49)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HG2	10	2.7	0.59	2.93
(1,315)	1:11:A:TRP:HE3	1:23:A:PRO:HD2	10	2.7	0.19	2.76
(1,499)	1:12:A:LEU:HB3	1:13:A:LYS:HG2	10	2.7	0.23	2.68
(2,468)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG21	10	2.69	0.22	2.76
(2,468)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG22	10	2.69	0.22	2.76
(2,468)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG23	10	2.69	0.22	2.76
(4,155)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG21	10	2.69	0.22	2.76
(4,155)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG22	10	2.69	0.22	2.76
(4,155)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG23	10	2.69	0.22	2.76
(2,425)	1:7:A:LEU:HG	1:9:A:ILE:HG13	10	2.66	0.32	2.63
(4,130)	1:7:A:LEU:HG	1:9:A:ILE:HG13	10	2.66	0.32	2.63
(2,408)	1:23:A:PRO:HG2	1:24:A:PRO:HD3	10	2.62	0.44	2.88
(4,118)	1:23:A:PRO:HG2	1:24:A:PRO:HD3	10	2.62	0.44	2.88
(2,424)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	10	2.61	0.23	2.52
(2,424)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	10	2.61	0.23	2.52
(2,424)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	10	2.61	0.23	2.52
(4,129)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	10	2.61	0.23	2.52
(4,129)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	10	2.61	0.23	2.52
(4,129)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	10	2.61	0.23	2.52
(2,312)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:HD1	10	2.56	0.22	2.64
(4,69)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:HD1	10	2.56	0.22	2.64
(1,238)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HD2	10	2.53	0.41	2.64
(1,238)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HD2	10	2.53	0.41	2.64
(2,372)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB1	10	2.45	0.68	2.53
(2,372)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB2	10	2.45	0.68	2.53
(2,372)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB3	10	2.45	0.68	2.53
(4,101)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB1	10	2.45	0.68	2.53
(4,101)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB2	10	2.45	0.68	2.53
(4,101)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB3	10	2.45	0.68	2.53
(2,511)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HA	10	2.34	0.15	2.28
(2,511)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HA	10	2.34	0.15	2.28
(2,511)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HA	10	2.34	0.15	2.28
(4,173)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HA	10	2.34	0.15	2.28
(4,173)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HA	10	2.34	0.15	2.28
(4,173)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HA	10	2.34	0.15	2.28
(1,405)	1:17:A:PRO:HG2	1:19:A:SER:HB3	10	2.31	0.52	2.06
(1,405)	1:17:A:PRO:HG3	1:19:A:SER:HB3	10	2.31	0.52	2.06

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(2,307)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG2	10	2.29	0.41	2.08
(2,307)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG3	10	2.29	0.41	2.08
(4,68)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG2	10	2.29	0.41	2.08
(4,68)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG3	10	2.29	0.41	2.08
(1,439)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD21	10	2.27	0.26	2.24
(1,439)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD22	10	2.27	0.26	2.24
(1,439)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD23	10	2.27	0.26	2.24
(2,318)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HA	10	2.25	0.19	2.24
(4,73)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HA	10	2.25	0.19	2.24
(2,472)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HA	10	2.17	0.33	2.13
(2,472)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HA	10	2.17	0.33	2.13
(2,472)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HA	10	2.17	0.33	2.13
(4,157)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HA	10	2.17	0.33	2.13
(4,157)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HA	10	2.17	0.33	2.13
(4,157)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HA	10	2.17	0.33	2.13
(2,355)	1:9:A:ILE:HG12	1:11:A:TRP:H	10	2.16	0.09	2.16
(4,94)	1:9:A:ILE:HG12	1:11:A:TRP:H	10	2.16	0.09	2.16
(2,262)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	10	2.03	0.56	1.94
(2,262)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	10	2.03	0.56	1.94
(2,262)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	10	2.03	0.56	1.94
(2,262)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	10	2.03	0.56	1.94
(2,262)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	10	2.03	0.56	1.94
(2,262)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	10	2.03	0.56	1.94
(4,53)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	10	2.03	0.56	1.94
(4,53)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	10	2.03	0.56	1.94
(4,53)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	10	2.03	0.56	1.94
(4,53)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	10	2.03	0.56	1.94
(4,53)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	10	2.03	0.56	1.94
(4,53)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	10	2.03	0.56	1.94
(2,418)	1:7:A:LEU:HG	1:10:A:GLN:HG2	10	2.0	0.11	1.97
(2,418)	1:7:A:LEU:HG	1:10:A:GLN:HG3	10	2.0	0.11	1.97
(4,126)	1:7:A:LEU:HG	1:10:A:GLN:HG2	10	2.0	0.11	1.97
(4,126)	1:7:A:LEU:HG	1:10:A:GLN:HG3	10	2.0	0.11	1.97
(1,527)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HB	10	2.0	0.06	1.99
(1,527)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HB	10	2.0	0.06	1.99
(1,527)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HB	10	2.0	0.06	1.99
(1,387)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HG12	10	1.97	0.18	1.99
(1,419)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HG2	10	1.92	0.28	1.78
(1,419)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HG2	10	1.92	0.28	1.78
(1,241)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HE1	10	1.88	0.53	1.7
(1,241)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HE2	10	1.88	0.53	1.7
(1,241)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HE1	10	1.88	0.53	1.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(1,241)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HE2	10	1.88	0.53	1.7
(2,438)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG21	10	1.86	0.46	1.65
(2,438)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG22	10	1.86	0.46	1.65
(2,438)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG23	10	1.86	0.46	1.65
(2,444)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HB2	10	1.86	0.27	1.94
(4,137)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG21	10	1.86	0.46	1.65
(4,137)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG22	10	1.86	0.46	1.65
(4,137)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG23	10	1.86	0.46	1.65
(4,141)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HB2	10	1.86	0.27	1.94
(2,230)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HA	10	1.86	0.21	1.92
(2,230)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HA	10	1.86	0.21	1.92
(4,40)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HA	10	1.86	0.21	1.92
(4,40)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HA	10	1.86	0.21	1.92
(2,467)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG11	10	1.83	0.24	1.83
(2,467)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG12	10	1.83	0.24	1.83
(2,467)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG13	10	1.83	0.24	1.83
(4,154)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG11	10	1.83	0.24	1.83
(4,154)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG12	10	1.83	0.24	1.83
(4,154)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG13	10	1.83	0.24	1.83
(1,253)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HG2	10	1.83	0.59	2.06
(1,253)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HG2	10	1.83	0.59	2.06
(1,468)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG21	10	1.82	0.22	1.89
(1,468)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG22	10	1.82	0.22	1.89
(1,468)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG23	10	1.82	0.22	1.89
(2,434)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB2	10	1.81	0.13	1.8
(2,434)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB2	10	1.81	0.13	1.8
(2,434)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB2	10	1.81	0.13	1.8
(2,434)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB3	10	1.81	0.13	1.8
(2,434)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB3	10	1.81	0.13	1.8
(2,434)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB3	10	1.81	0.13	1.8
(4,134)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB2	10	1.81	0.13	1.8
(4,134)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB2	10	1.81	0.13	1.8
(4,134)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB2	10	1.81	0.13	1.8
(4,134)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB3	10	1.81	0.13	1.8
(4,134)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB3	10	1.81	0.13	1.8
(4,134)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB3	10	1.81	0.13	1.8
(1,425)	1:7:A:LEU:HG	1:9:A:ILE:HG13	10	1.81	0.32	1.78
(2,437)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG2	10	1.78	0.23	1.92
(2,437)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG2	10	1.78	0.23	1.92
(2,437)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG2	10	1.78	0.23	1.92
(2,437)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG3	10	1.78	0.23	1.92
(2,437)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG3	10	1.78	0.23	1.92

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(2,437)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG3	10	1.78	0.23	1.92
(3,301)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG2	10	1.78	0.23	1.92
(3,301)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG2	10	1.78	0.23	1.92
(3,301)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG2	10	1.78	0.23	1.92
(3,301)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG3	10	1.78	0.23	1.92
(3,301)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG3	10	1.78	0.23	1.92
(3,301)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG3	10	1.78	0.23	1.92
(2,470)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	10	1.78	0.59	2.0
(2,470)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	10	1.78	0.59	2.0
(2,470)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	10	1.78	0.59	2.0
(4,156)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	10	1.78	0.59	2.0
(4,156)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	10	1.78	0.59	2.0
(4,156)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	10	1.78	0.59	2.0
(1,408)	1:23:A:PRO:HG2	1:24:A:PRO:HD3	10	1.75	0.44	2.0
(2,347)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD11	10	1.73	0.3	1.83
(2,347)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD12	10	1.73	0.3	1.83
(2,347)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD13	10	1.73	0.3	1.83
(4,88)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD11	10	1.73	0.3	1.83
(4,88)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD12	10	1.73	0.3	1.83
(4,88)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD13	10	1.73	0.3	1.83
(2,294)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD21	10	1.7	0.08	1.72
(2,294)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD22	10	1.7	0.08	1.72
(2,294)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD23	10	1.7	0.08	1.72
(4,63)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD21	10	1.7	0.08	1.72
(4,63)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD22	10	1.7	0.08	1.72
(4,63)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD23	10	1.7	0.08	1.72
(2,141)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:HB2	10	1.7	0.14	1.66
(4,28)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:HB2	10	1.7	0.14	1.66
(2,14)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	10	1.7	0.02	1.69
(2,14)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	10	1.7	0.02	1.69
(2,14)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	10	1.7	0.02	1.69
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	10	1.7	0.02	1.69
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	10	1.7	0.02	1.69
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	10	1.7	0.02	1.69
(1,312)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:HD1	10	1.69	0.21	1.76
(2,357)	1:11:A:TRP:H	1:24:A:PRO:HB3	10	1.68	0.24	1.72
(4,95)	1:11:A:TRP:H	1:24:A:PRO:HB3	10	1.68	0.24	1.72
(2,456)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA3	10	1.67	0.09	1.7
(2,456)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA3	10	1.67	0.09	1.7
(2,456)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA3	10	1.67	0.09	1.7
(3,309)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA3	10	1.67	0.09	1.7
(3,309)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA3	10	1.67	0.09	1.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(3,309)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA3	10	1.67	0.09	1.7
(2,529)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HB3	10	1.67	0.07	1.67
(4,180)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HB3	10	1.67	0.07	1.67
(2,520)	1:11:A:TRP:HZ3	1:24:A:PRO:HG3	10	1.62	0.03	1.62
(3,345)	1:11:A:TRP:HZ3	1:24:A:PRO:HG3	10	1.62	0.03	1.62
(2,140)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:HB3	10	1.61	0.4	1.42
(4,27)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:HB3	10	1.61	0.4	1.42
(2,252)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	10	1.58	0.17	1.65
(2,252)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	10	1.58	0.17	1.65
(3,204)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	10	1.58	0.17	1.65
(3,204)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	10	1.58	0.17	1.65
(1,372)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB1	10	1.58	0.68	1.65
(1,372)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB2	10	1.58	0.68	1.65
(1,372)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB3	10	1.58	0.68	1.65
(2,341)	1:10:A:GLN:HB2	1:13:A:LYS:H	10	1.56	0.18	1.5
(4,84)	1:10:A:GLN:HB2	1:13:A:LYS:H	10	1.56	0.18	1.5
(2,449)	1:12:A:LEU:HD11	1:14:A:ASP:HB2	10	1.55	0.7	1.88
(2,449)	1:12:A:LEU:HD12	1:14:A:ASP:HB2	10	1.55	0.7	1.88
(2,449)	1:12:A:LEU:HD13	1:14:A:ASP:HB2	10	1.55	0.7	1.88
(4,143)	1:12:A:LEU:HD11	1:14:A:ASP:HB2	10	1.55	0.7	1.88
(4,143)	1:12:A:LEU:HD12	1:14:A:ASP:HB2	10	1.55	0.7	1.88
(4,143)	1:12:A:LEU:HD13	1:14:A:ASP:HB2	10	1.55	0.7	1.88
(2,506)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	10	1.53	0.43	1.81
(2,506)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	10	1.53	0.43	1.81
(2,506)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	10	1.53	0.43	1.81
(4,169)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	10	1.53	0.43	1.81
(4,169)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	10	1.53	0.43	1.81
(4,169)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	10	1.53	0.43	1.81
(2,382)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	10	1.53	1.03	1.27
(4,105)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	10	1.53	1.03	1.27
(2,317)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	10	1.53	0.05	1.52
(4,72)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	10	1.53	0.05	1.52
(2,413)	1:1:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD2	10	1.52	0.44	1.48
(2,413)	1:1:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD3	10	1.52	0.44	1.48
(2,413)	1:1:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD2	10	1.52	0.44	1.48
(4,122)	1:1:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD2	10	1.52	0.44	1.48
(4,122)	1:1:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD3	10	1.52	0.44	1.48
(4,122)	1:1:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD2	10	1.52	0.44	1.48
(1,186)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD21	10	1.49	0.03	1.48
(1,186)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD22	10	1.49	0.03	1.48
(1,186)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD23	10	1.49	0.03	1.48
(1,511)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HA	10	1.46	0.15	1.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(1,511)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HA	10	1.46	0.15	1.41
(1,511)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HA	10	1.46	0.15	1.41
(1,139)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB3	10	1.46	0.06	1.47
(2,340)	1:10:A:GLN:HG2	1:13:A:LYS:H	10	1.43	0.4	1.62
(2,340)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:H	10	1.43	0.4	1.62
(4,83)	1:10:A:GLN:HG2	1:13:A:LYS:H	10	1.43	0.4	1.62
(4,83)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:H	10	1.43	0.4	1.62
(1,307)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG2	10	1.41	0.41	1.2
(1,307)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG3	10	1.41	0.41	1.2
(2,420)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	10	1.41	0.49	1.12
(2,420)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	10	1.41	0.49	1.12
(2,420)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	10	1.41	0.49	1.12
(4,128)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	10	1.41	0.49	1.12
(4,128)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	10	1.41	0.49	1.12
(4,128)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	10	1.41	0.49	1.12
(2,396)	1:23:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HD3	10	1.4	0.5	1.6
(4,112)	1:23:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HD3	10	1.4	0.5	1.6
(2,237)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HB2	10	1.39	0.14	1.41
(2,237)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HB2	10	1.39	0.14	1.41
(4,43)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HB2	10	1.39	0.14	1.41
(4,43)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HB2	10	1.39	0.14	1.41
(2,366)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:H	10	1.38	0.27	1.36
(2,366)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:H	10	1.38	0.27	1.36
(2,366)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:H	10	1.38	0.27	1.36
(4,97)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:H	10	1.38	0.27	1.36
(4,97)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:H	10	1.38	0.27	1.36
(4,97)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:H	10	1.38	0.27	1.36
(1,318)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HA	10	1.38	0.19	1.36
(1,158)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG13	10	1.38	0.08	1.41
(1,337)	1:12:A:LEU:HA	1:16:A:GLY:H	10	1.32	0.08	1.35
(1,472)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HA	10	1.31	0.33	1.27
(1,472)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HA	10	1.31	0.33	1.27
(1,472)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HA	10	1.31	0.33	1.27
(2,411)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HG3	10	1.3	0.28	1.19
(3,291)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HG3	10	1.3	0.28	1.19
(2,298)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD21	10	1.3	0.1	1.3
(2,298)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD22	10	1.3	0.1	1.3
(2,298)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD23	10	1.3	0.1	1.3
(3,234)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD21	10	1.3	0.1	1.3
(3,234)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD22	10	1.3	0.1	1.3
(3,234)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD23	10	1.3	0.1	1.3
(2,507)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	10	1.29	0.37	1.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(2,507)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	10	1.29	0.37	1.5
(2,507)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	10	1.29	0.37	1.5
(4,170)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	10	1.29	0.37	1.5
(4,170)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	10	1.29	0.37	1.5
(4,170)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	10	1.29	0.37	1.5
(1,355)	1:9:A:ILE:HG12	1:11:A:TRP:H	10	1.28	0.09	1.29
(2,313)	1:11:A:TRP:HE3	1:24:A:PRO:HA	10	1.28	0.24	1.2
(4,70)	1:11:A:TRP:HE3	1:24:A:PRO:HA	10	1.28	0.24	1.2
(1,457)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HD2	10	1.24	0.1	1.25
(1,457)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HD2	10	1.24	0.1	1.25
(1,457)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HD2	10	1.24	0.1	1.25
(2,435)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:HG	10	1.23	0.2	1.19
(2,435)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:HG	10	1.23	0.2	1.19
(2,435)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:HG	10	1.23	0.2	1.19
(4,135)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:HG	10	1.23	0.2	1.19
(4,135)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:HG	10	1.23	0.2	1.19
(4,135)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:HG	10	1.23	0.2	1.19
(1,361)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:H	10	1.21	0.12	1.27
(1,455)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD21	10	1.21	0.05	1.23
(1,455)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD22	10	1.21	0.05	1.23
(1,455)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD23	10	1.21	0.05	1.23
(1,338)	1:8:A:TYR:HB3	1:9:A:ILE:H	10	1.19	0.28	1.04
(2,299)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD21	10	1.17	0.18	1.08
(2,299)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD22	10	1.17	0.18	1.08
(2,299)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD23	10	1.17	0.18	1.08
(4,65)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD21	10	1.17	0.18	1.08
(4,65)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD22	10	1.17	0.18	1.08
(4,65)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD23	10	1.17	0.18	1.08
(2,428)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	10	1.17	0.18	1.11
(2,428)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	10	1.17	0.18	1.11
(2,428)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	10	1.17	0.18	1.11
(2,428)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	10	1.17	0.18	1.11
(2,428)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	10	1.17	0.18	1.11
(2,428)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	10	1.17	0.18	1.11
(2,428)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	10	1.17	0.18	1.11
(2,428)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	10	1.17	0.18	1.11
(2,428)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	10	1.17	0.18	1.11
(4,132)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	10	1.17	0.18	1.11
(4,132)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	10	1.17	0.18	1.11
(4,132)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	10	1.17	0.18	1.11
(4,132)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	10	1.17	0.18	1.11
(4,132)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	10	1.17	0.18	1.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(4,132)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	10	1.17	0.18	1.11
(4,132)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	10	1.17	0.18	1.11
(4,132)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	10	1.17	0.18	1.11
(4,132)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	10	1.17	0.18	1.11
(2,369)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HB2	10	1.17	0.16	1.18
(4,98)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HB2	10	1.17	0.16	1.18
(1,132)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HG	10	1.16	0.04	1.15
(1,262)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	10	1.16	0.56	1.06
(1,262)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	10	1.16	0.56	1.06
(1,262)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	10	1.16	0.56	1.06
(1,262)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	10	1.16	0.56	1.06
(1,262)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	10	1.16	0.56	1.06
(1,262)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	10	1.16	0.56	1.06
(2,486)	1:24:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:HA	10	1.15	0.36	1.04
(4,162)	1:24:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:HA	10	1.15	0.36	1.04
(1,461)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD21	10	1.14	0.21	1.24
(1,461)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD22	10	1.14	0.21	1.24
(1,461)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD23	10	1.14	0.21	1.24
(1,288)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG3	10	1.13	0.04	1.13
(1,418)	1:7:A:LEU:HG	1:10:A:GLN:HG2	10	1.12	0.11	1.1
(1,418)	1:7:A:LEU:HG	1:10:A:GLN:HG3	10	1.12	0.11	1.1
(1,250)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG2	10	1.11	0.2	1.18
(1,250)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG2	10	1.11	0.2	1.18
(2,25)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	10	1.08	0.05	1.08
(2,25)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	10	1.08	0.05	1.08
(2,518)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HE1	10	1.08	0.54	1.22
(2,518)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HE2	10	1.08	0.54	1.22
(4,9)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	10	1.08	0.05	1.08
(4,9)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	10	1.08	0.05	1.08
(4,175)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HE1	10	1.08	0.54	1.22
(4,175)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HE2	10	1.08	0.54	1.22
(1,429)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG13	10	1.07	0.06	1.08
(1,429)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG13	10	1.07	0.06	1.08
(1,429)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG13	10	1.07	0.06	1.08
(2,16)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	10	1.05	0.03	1.04
(2,16)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	10	1.05	0.03	1.04
(2,16)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	10	1.05	0.03	1.04
(4,5)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	10	1.05	0.03	1.04
(4,5)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	10	1.05	0.03	1.04
(4,5)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	10	1.05	0.03	1.04
(2,345)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD11	10	1.04	0.1	1.04
(2,345)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD12	10	1.04	0.1	1.04

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(2,345)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD13	10	1.04	0.1	1.04
(3,259)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD11	10	1.04	0.1	1.04
(3,259)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD12	10	1.04	0.1	1.04
(3,259)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD13	10	1.04	0.1	1.04
(2,302)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD11	10	1.03	0.23	0.98
(2,302)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD12	10	1.03	0.23	0.98
(2,302)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD13	10	1.03	0.23	0.98
(4,66)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD11	10	1.03	0.23	0.98
(4,66)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD12	10	1.03	0.23	0.98
(4,66)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD13	10	1.03	0.23	0.98
(2,394)	1:23:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HD2	10	1.03	0.46	1.36
(4,111)	1:23:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HD2	10	1.03	0.46	1.36
(2,402)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	10	1.03	0.36	0.8
(2,402)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	10	1.03	0.36	0.8
(4,114)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	10	1.03	0.36	0.8
(4,114)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	10	1.03	0.36	0.8
(2,323)	1:11:A:TRP:HE1	1:11:A:TRP:HH2	10	1.02	0.05	1.04
(4,74)	1:11:A:TRP:HE1	1:11:A:TRP:HH2	10	1.02	0.05	1.04
(2,24)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	10	1.01	0.16	1.06
(2,24)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	10	1.01	0.16	1.06
(4,8)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	10	1.01	0.16	1.06
(4,8)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	10	1.01	0.16	1.06
(2,235)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HA	10	1.01	0.65	0.87
(2,235)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HA	10	1.01	0.65	0.87
(4,42)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HA	10	1.01	0.65	0.87
(4,42)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HA	10	1.01	0.65	0.87
(1,438)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG21	10	1.01	0.46	0.8
(1,438)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG22	10	1.01	0.46	0.8
(1,438)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG23	10	1.01	0.46	0.8
(1,295)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD21	10	1.0	0.02	1.0
(1,295)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD22	10	1.0	0.02	1.0
(1,295)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD23	10	1.0	0.02	1.0
(1,434)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB2	10	1.0	0.13	0.99
(1,434)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB2	10	1.0	0.13	0.99
(1,434)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB2	10	1.0	0.13	0.99
(1,434)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB3	10	1.0	0.13	0.99
(1,434)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB3	10	1.0	0.13	0.99
(1,434)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB3	10	1.0	0.13	0.99
(1,444)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HB2	10	1.0	0.27	1.08
(2,328)	1:11:A:TRP:HZ2	1:11:A:TRP:HZ3	10	1.0	0.02	1.0
(4,76)	1:11:A:TRP:HZ2	1:11:A:TRP:HZ3	10	1.0	0.02	1.0
(2,346)	1:12:A:LEU:HD11	1:14:A:ASP:H	10	0.99	0.18	0.98

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(2,346)	1:12:A:LEU:HD12	1:14:A:ASP:H	10	0.99	0.18	0.98
(2,346)	1:12:A:LEU:HD13	1:14:A:ASP:H	10	0.99	0.18	0.98
(4,87)	1:12:A:LEU:HD11	1:14:A:ASP:H	10	0.99	0.18	0.98
(4,87)	1:12:A:LEU:HD12	1:14:A:ASP:H	10	0.99	0.18	0.98
(4,87)	1:12:A:LEU:HD13	1:14:A:ASP:H	10	0.99	0.18	0.98
(1,230)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HA	10	0.98	0.21	1.04
(1,230)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HA	10	0.98	0.21	1.04
(1,475)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:HE3	10	0.97	0.13	1.02
(1,475)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:HE3	10	0.97	0.13	1.02
(2,427)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG11	10	0.97	0.27	1.02
(2,427)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG12	10	0.97	0.27	1.02
(2,427)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG13	10	0.97	0.27	1.02
(2,427)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG11	10	0.97	0.27	1.02
(2,427)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG12	10	0.97	0.27	1.02
(2,427)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG13	10	0.97	0.27	1.02
(2,427)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG11	10	0.97	0.27	1.02
(2,427)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG12	10	0.97	0.27	1.02
(2,427)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG13	10	0.97	0.27	1.02
(4,131)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG11	10	0.97	0.27	1.02
(4,131)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG12	10	0.97	0.27	1.02
(4,131)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG13	10	0.97	0.27	1.02
(4,131)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG11	10	0.97	0.27	1.02
(4,131)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG12	10	0.97	0.27	1.02
(4,131)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG13	10	0.97	0.27	1.02
(4,131)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG11	10	0.97	0.27	1.02
(4,131)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG12	10	0.97	0.27	1.02
(4,131)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG13	10	0.97	0.27	1.02
(1,467)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG11	10	0.97	0.24	0.97
(1,467)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG12	10	0.97	0.24	0.97
(1,467)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG13	10	0.97	0.24	0.97
(2,264)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	10	0.96	0.13	0.99
(2,264)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	10	0.96	0.13	0.99
(2,264)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	10	0.96	0.13	0.99
(2,264)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	10	0.96	0.13	0.99
(2,264)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	10	0.96	0.13	0.99
(2,264)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	10	0.96	0.13	0.99
(3,210)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	10	0.96	0.13	0.99
(3,210)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	10	0.96	0.13	0.99
(3,210)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	10	0.96	0.13	0.99
(3,210)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	10	0.96	0.13	0.99
(3,210)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	10	0.96	0.13	0.99
(3,210)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	10	0.96	0.13	0.99

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(2,303)	1:11:A:TRP:HZ3	1:23:A:PRO:HB2	10	0.95	0.38	0.94
(4,67)	1:11:A:TRP:HZ3	1:23:A:PRO:HB2	10	0.95	0.38	0.94
(2,168)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	10	0.93	0.04	0.92
(3,136)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	10	0.93	0.04	0.92
(2,441)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HB2	10	0.92	0.2	0.88
(2,441)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HB2	10	0.92	0.2	0.88
(2,441)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HB2	10	0.92	0.2	0.88
(2,441)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HB3	10	0.92	0.2	0.88
(2,441)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HB3	10	0.92	0.2	0.88
(2,441)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HB3	10	0.92	0.2	0.88
(4,139)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HB2	10	0.92	0.2	0.88
(4,139)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HB2	10	0.92	0.2	0.88
(4,139)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HB2	10	0.92	0.2	0.88
(4,139)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HB3	10	0.92	0.2	0.88
(4,139)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HB3	10	0.92	0.2	0.88
(4,139)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HB3	10	0.92	0.2	0.88
(1,324)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HZ3	10	0.92	0.16	0.93
(1,324)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HZ3	10	0.92	0.16	0.93
(2,263)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE1	10	0.91	0.58	0.84
(2,263)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE2	10	0.91	0.58	0.84
(2,263)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE1	10	0.91	0.58	0.84
(2,263)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE2	10	0.91	0.58	0.84
(2,263)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE1	10	0.91	0.58	0.84
(2,263)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE2	10	0.91	0.58	0.84
(4,54)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE1	10	0.91	0.58	0.84
(4,54)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE2	10	0.91	0.58	0.84
(4,54)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE1	10	0.91	0.58	0.84
(4,54)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE2	10	0.91	0.58	0.84
(4,54)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE1	10	0.91	0.58	0.84
(4,54)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE2	10	0.91	0.58	0.84
(2,371)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	10	0.91	0.08	0.9
(4,100)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	10	0.91	0.08	0.9
(1,437)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG2	10	0.91	0.23	1.04
(1,437)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG2	10	0.91	0.23	1.04
(1,437)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG2	10	0.91	0.23	1.04
(1,437)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG3	10	0.91	0.23	1.04
(1,437)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG3	10	0.91	0.23	1.04
(1,437)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG3	10	0.91	0.23	1.04
(2,373)	1:7:A:LEU:HG	1:24:A:PRO:HA	10	0.9	0.38	1.04
(4,102)	1:7:A:LEU:HG	1:24:A:PRO:HA	10	0.9	0.38	1.04
(2,84)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD2	10	0.9	0.02	0.89
(3,68)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD2	10	0.9	0.02	0.89

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(2,242)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HD1	10	0.9	0.52	0.62
(2,242)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HD2	10	0.9	0.52	0.62
(2,242)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HD1	10	0.9	0.52	0.62
(2,242)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HD2	10	0.9	0.52	0.62
(4,46)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HD1	10	0.9	0.52	0.62
(4,46)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HD2	10	0.9	0.52	0.62
(4,46)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HD1	10	0.9	0.52	0.62
(4,46)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HD2	10	0.9	0.52	0.62
(1,72)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HA	10	0.89	0.07	0.89
(1,14)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	10	0.89	0.02	0.88
(1,14)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	10	0.89	0.02	0.88
(1,14)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	10	0.89	0.02	0.88
(1,29)	1:14:A:ASP:H	1:14:A:ASP:HB2	10	0.88	0.2	0.78
(1,54)	1:16:A:GLY:HA2	1:16:A:GLY:HA3	10	0.88	0.01	0.88
(2,33)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD2	10	0.88	0.06	0.9
(2,33)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD3	10	0.88	0.06	0.9
(4,11)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD2	10	0.88	0.06	0.9
(4,11)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD3	10	0.88	0.06	0.9
(2,261)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	10	0.88	0.38	0.81
(2,261)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	10	0.88	0.38	0.81
(2,261)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	10	0.88	0.38	0.81
(2,261)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	10	0.88	0.38	0.81
(2,261)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	10	0.88	0.38	0.81
(2,261)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	10	0.88	0.38	0.81
(4,52)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	10	0.88	0.38	0.81
(4,52)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	10	0.88	0.38	0.81
(4,52)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	10	0.88	0.38	0.81
(4,52)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	10	0.88	0.38	0.81
(4,52)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	10	0.88	0.38	0.81
(4,52)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	10	0.88	0.38	0.81
(2,21)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE1	10	0.87	0.3	1.03
(2,21)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE2	10	0.87	0.3	1.03
(4,7)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE1	10	0.87	0.3	1.03
(4,7)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE2	10	0.87	0.3	1.03
(1,266)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD21	10	0.87	0.2	0.88
(1,266)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD22	10	0.87	0.2	0.88
(1,266)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD23	10	0.87	0.2	0.88
(1,266)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD21	10	0.87	0.2	0.88
(1,266)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD22	10	0.87	0.2	0.88
(1,266)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD23	10	0.87	0.2	0.88
(2,360)	1:21:A:ARG:H	1:22:A:PRO:HD2	10	0.87	0.23	0.85
(3,265)	1:21:A:ARG:H	1:22:A:PRO:HD2	10	0.87	0.23	0.85

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(1,305)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HG2	10	0.86	0.14	0.83
(2,254)	1:7:A:LEU:HG	1:8:A:TYR:HD1	10	0.86	0.29	0.88
(2,254)	1:7:A:LEU:HG	1:8:A:TYR:HD2	10	0.86	0.29	0.88
(4,50)	1:7:A:LEU:HG	1:8:A:TYR:HD1	10	0.86	0.29	0.88
(4,50)	1:7:A:LEU:HG	1:8:A:TYR:HD2	10	0.86	0.29	0.88
(1,163)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HE22	10	0.86	0.0	0.86
(2,409)	1:23:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	10	0.85	0.36	1.03
(4,119)	1:23:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	10	0.85	0.36	1.03
(2,401)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD2	10	0.84	0.32	0.64
(2,401)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD2	10	0.84	0.32	0.64
(4,113)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD2	10	0.84	0.32	0.64
(4,113)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD2	10	0.84	0.32	0.64
(1,294)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD21	10	0.83	0.08	0.84
(1,294)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD22	10	0.83	0.08	0.84
(1,294)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD23	10	0.83	0.08	0.84
(1,141)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:HB2	10	0.82	0.14	0.78
(2,528)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HB	10	0.82	0.16	0.74
(2,528)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HB	10	0.82	0.16	0.74
(2,528)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HB	10	0.82	0.16	0.74
(4,179)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HB	10	0.82	0.16	0.74
(4,179)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HB	10	0.82	0.16	0.74
(4,179)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HB	10	0.82	0.16	0.74
(1,271)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD3	10	0.81	0.3	0.66
(1,357)	1:11:A:TRP:H	1:24:A:PRO:HB3	10	0.81	0.24	0.86
(2,229)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HA	10	0.81	0.39	0.85
(2,229)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HA	10	0.81	0.39	0.85
(4,39)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HA	10	0.81	0.39	0.85
(4,39)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HA	10	0.81	0.39	0.85
(1,325)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HE3	10	0.81	0.15	0.76
(1,325)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HE3	10	0.81	0.15	0.76
(1,73)	1:15:A:GLY:HA2	1:15:A:GLY:HA3	10	0.81	0.0	0.81
(2,374)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	10	0.81	0.4	0.82
(2,374)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB3	10	0.81	0.4	0.82
(2,487)	1:8:A:TYR:HB2	1:24:A:PRO:HA	10	0.81	0.58	0.47
(4,103)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	10	0.81	0.4	0.82
(4,103)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB3	10	0.81	0.4	0.82
(4,163)	1:8:A:TYR:HB2	1:24:A:PRO:HA	10	0.81	0.58	0.47
(1,456)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA3	10	0.79	0.09	0.82
(1,456)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA3	10	0.79	0.09	0.82
(1,456)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA3	10	0.79	0.09	0.82
(1,529)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HB3	10	0.79	0.07	0.79
(1,386)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HB3	10	0.79	0.23	0.76

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(1,368)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD3	10	0.78	0.12	0.78
(2,415)	1:7:A:LEU:HB2	1:8:A:TYR:HB3	10	0.77	0.66	0.32
(4,124)	1:7:A:LEU:HB2	1:8:A:TYR:HB3	10	0.77	0.66	0.32
(1,424)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	10	0.76	0.3	0.64
(1,424)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	10	0.76	0.3	0.64
(1,424)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	10	0.76	0.3	0.64
(1,424)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB1	10	0.76	0.3	0.64
(1,424)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB2	10	0.76	0.3	0.64
(1,424)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB3	10	0.76	0.3	0.64
(2,370)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG2	10	0.76	0.15	0.8
(2,370)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG3	10	0.76	0.15	0.8
(4,99)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG2	10	0.76	0.15	0.8
(4,99)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG3	10	0.76	0.15	0.8
(1,510)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HD3	10	0.76	0.14	0.8
(1,510)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HD3	10	0.76	0.14	0.8
(1,510)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HD3	10	0.76	0.14	0.8
(2,352)	1:21:A:ARG:H	1:22:A:PRO:HB3	10	0.75	0.33	0.95
(4,91)	1:21:A:ARG:H	1:22:A:PRO:HB3	10	0.75	0.33	0.95
(1,520)	1:11:A:TRP:HZ3	1:24:A:PRO:HG3	10	0.75	0.03	0.74
(2,526)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HG3	10	0.74	0.14	0.74
(4,177)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HG3	10	0.74	0.14	0.74
(2,459)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	10	0.74	0.13	0.68
(2,459)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	10	0.74	0.13	0.68
(2,459)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	10	0.74	0.13	0.68
(4,148)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	10	0.74	0.13	0.68
(4,148)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	10	0.74	0.13	0.68
(4,148)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	10	0.74	0.13	0.68
(2,174)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD11	10	0.74	0.02	0.73
(2,174)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD12	10	0.74	0.02	0.73
(2,174)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD13	10	0.74	0.02	0.73
(4,33)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD11	10	0.74	0.02	0.73
(4,33)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD12	10	0.74	0.02	0.73
(4,33)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD13	10	0.74	0.02	0.73
(2,145)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG12	10	0.74	0.04	0.74
(3,117)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG12	10	0.74	0.04	0.74
(1,140)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:HB3	10	0.73	0.4	0.54
(1,87)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD3	10	0.73	0.09	0.76
(1,321)	1:11:A:TRP:HE3	1:24:A:PRO:HD2	10	0.72	0.08	0.73
(2,436)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA2	10	0.72	0.1	0.74
(2,436)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA2	10	0.72	0.1	0.74
(2,436)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA2	10	0.72	0.1	0.74
(4,136)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA2	10	0.72	0.1	0.74

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(4,136)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA2	10	0.72	0.1	0.74
(4,136)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA2	10	0.72	0.1	0.74
(1,172)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HB3	10	0.72	0.02	0.72
(1,41)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HB3	10	0.71	0.02	0.72
(1,252)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	10	0.71	0.17	0.78
(1,252)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	10	0.71	0.17	0.78
(1,330)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HG2	10	0.71	0.32	0.72
(1,48)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG3	10	0.7	0.03	0.7
(1,341)	1:10:A:GLN:HB2	1:13:A:LYS:H	10	0.68	0.18	0.62
(2,123)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HG	10	0.68	0.03	0.69
(4,22)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HG	10	0.68	0.03	0.69
(1,136)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD21	10	0.68	0.09	0.71
(1,136)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD22	10	0.68	0.09	0.71
(1,136)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD23	10	0.68	0.09	0.71
(1,320)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HE3	10	0.68	0.05	0.68
(1,74)	1:20:A:GLY:HA2	1:20:A:GLY:HA3	10	0.66	0.0	0.66
(1,3)	1:4:A:ALA:H	1:4:A:ALA:HA	10	0.66	0.2	0.76
(1,317)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	10	0.66	0.05	0.65
(1,88)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HB3	10	0.66	0.02	0.66
(2,248)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HB3	10	0.66	0.29	0.78
(2,248)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HB3	10	0.66	0.29	0.78
(3,201)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HB3	10	0.66	0.29	0.78
(3,201)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HB3	10	0.66	0.29	0.78
(1,36)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HB2	10	0.65	0.04	0.67
(1,272)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD3	10	0.65	0.09	0.66
(2,129)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD21	10	0.64	0.01	0.64
(2,129)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD22	10	0.64	0.01	0.64
(2,129)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD23	10	0.64	0.01	0.64
(4,24)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD21	10	0.64	0.01	0.64
(4,24)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD22	10	0.64	0.01	0.64
(4,24)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD23	10	0.64	0.01	0.64
(2,96)	1:24:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	10	0.64	0.07	0.64
(4,18)	1:24:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	10	0.64	0.07	0.64
(2,458)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HD2	10	0.63	0.26	0.74
(2,458)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HD2	10	0.63	0.26	0.74
(2,458)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HD2	10	0.63	0.26	0.74
(3,311)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HD2	10	0.63	0.26	0.74
(3,311)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HD2	10	0.63	0.26	0.74
(3,311)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HD2	10	0.63	0.26	0.74
(2,58)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG2	10	0.63	0.26	0.66
(2,58)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG3	10	0.63	0.26	0.66
(4,12)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG2	10	0.63	0.26	0.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(4,12)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG3	10	0.63	0.26	0.66
(1,71)	1:19:A:SER:HB2	1:19:A:SER:HB3	10	0.62	0.01	0.62
(1,55)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HD3	10	0.62	0.01	0.62
(2,31)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE2	10	0.61	0.21	0.65
(2,31)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE3	10	0.61	0.21	0.65
(4,10)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE2	10	0.61	0.21	0.65
(4,10)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE3	10	0.61	0.21	0.65
(2,99)	1:24:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD2	10	0.61	0.2	0.66
(3,81)	1:24:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD2	10	0.61	0.2	0.66
(2,354)	1:9:A:ILE:HB	1:11:A:TRP:H	10	0.6	0.15	0.56
(4,93)	1:9:A:ILE:HB	1:11:A:TRP:H	10	0.6	0.15	0.56
(2,56)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HD2	10	0.6	0.17	0.66
(3,45)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HD2	10	0.6	0.17	0.66
(2,498)	1:12:A:LEU:HG	1:16:A:GLY:HA2	10	0.6	0.21	0.46
(4,166)	1:12:A:LEU:HG	1:16:A:GLY:HA2	10	0.6	0.21	0.46
(2,274)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HD2	10	0.59	0.29	0.74
(2,380)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:HB2	10	0.59	0.28	0.45
(2,380)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:HB3	10	0.59	0.28	0.45
(3,218)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HD2	10	0.59	0.29	0.74
(4,104)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:HB2	10	0.59	0.28	0.45
(4,104)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:HB3	10	0.59	0.28	0.45
(1,201)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HG3	10	0.59	0.16	0.58
(1,406)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HB3	10	0.58	0.05	0.61
(1,296)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD11	10	0.58	0.04	0.6
(1,296)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD12	10	0.58	0.04	0.6
(1,296)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD13	10	0.58	0.04	0.6
(2,450)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HE2	10	0.58	0.43	0.38
(2,450)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HE2	10	0.58	0.43	0.38
(2,450)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HE2	10	0.58	0.43	0.38
(2,450)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HE3	10	0.58	0.43	0.38
(2,450)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HE3	10	0.58	0.43	0.38
(2,450)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HE3	10	0.58	0.43	0.38
(4,144)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HE2	10	0.58	0.43	0.38
(4,144)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HE2	10	0.58	0.43	0.38
(4,144)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HE2	10	0.58	0.43	0.38
(4,144)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HE3	10	0.58	0.43	0.38
(4,144)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HE3	10	0.58	0.43	0.38
(4,144)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HE3	10	0.58	0.43	0.38
(2,332)	1:11:A:TRP:HE1	1:22:A:PRO:HG2	10	0.57	0.36	0.43
(2,332)	1:11:A:TRP:HE1	1:22:A:PRO:HG3	10	0.57	0.36	0.43
(4,78)	1:11:A:TRP:HE1	1:22:A:PRO:HG2	10	0.57	0.36	0.43
(4,78)	1:11:A:TRP:HE1	1:22:A:PRO:HG3	10	0.57	0.36	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(1,205)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HB3	10	0.57	0.0	0.57
(1,267)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD21	10	0.56	0.34	0.47
(1,267)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD22	10	0.56	0.34	0.47
(1,267)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD23	10	0.56	0.34	0.47
(1,267)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD21	10	0.56	0.34	0.47
(1,267)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD22	10	0.56	0.34	0.47
(1,267)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD23	10	0.56	0.34	0.47
(1,420)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	10	0.56	0.49	0.28
(1,420)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	10	0.56	0.49	0.28
(1,420)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	10	0.56	0.49	0.28
(1,18)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD11	10	0.55	0.08	0.56
(1,18)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD12	10	0.55	0.08	0.56
(1,18)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD13	10	0.55	0.08	0.56
(1,268)	1:11:A:TRP:HZ2	1:22:A:PRO:HA	10	0.55	0.19	0.53
(1,164)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HG2	10	0.55	0.03	0.55
(1,164)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HG3	10	0.55	0.03	0.55
(1,283)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG3	10	0.55	0.33	0.5
(2,489)	1:21:A:ARG:HG2	1:22:A:PRO:HD3	10	0.54	0.17	0.48
(3,326)	1:21:A:ARG:HG2	1:22:A:PRO:HD3	10	0.54	0.17	0.48
(1,39)	1:11:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HB2	10	0.54	0.09	0.56
(2,363)	1:24:A:PRO:HG3	1:25:A:SER:H	10	0.53	0.11	0.5
(3,267)	1:24:A:PRO:HG3	1:25:A:SER:H	10	0.53	0.11	0.5
(2,502)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB2	10	0.53	0.46	0.28
(2,502)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB2	10	0.53	0.46	0.28
(2,502)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB2	10	0.53	0.46	0.28
(3,334)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB2	10	0.53	0.46	0.28
(3,334)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB2	10	0.53	0.46	0.28
(3,334)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB2	10	0.53	0.46	0.28
(1,505)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HD3	10	0.53	0.14	0.51
(1,505)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HD3	10	0.53	0.14	0.51
(1,505)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HD3	10	0.53	0.14	0.51
(2,81)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD3	10	0.52	0.04	0.52
(4,16)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD3	10	0.52	0.04	0.52
(1,237)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HB2	10	0.52	0.14	0.53
(1,237)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HB2	10	0.52	0.14	0.53
(1,202)	1:15:A:GLY:H	1:15:A:GLY:HA3	10	0.51	0.08	0.54
(1,400)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD2	10	0.51	0.19	0.55
(1,155)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HA	10	0.51	0.1	0.47
(2,293)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD11	10	0.5	0.09	0.48
(2,293)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD12	10	0.5	0.09	0.48
(2,293)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD13	10	0.5	0.09	0.48
(4,62)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD11	10	0.5	0.09	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(4,62)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD12	10	0.5	0.09	0.48
(4,62)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD13	10	0.5	0.09	0.48
(1,488)	1:22:A:PRO:HD2	1:22:A:PRO:HD3	10	0.5	0.01	0.5
(2,178)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD21	10	0.49	0.02	0.49
(2,178)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD22	10	0.49	0.02	0.49
(2,178)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD23	10	0.49	0.02	0.49
(4,34)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD21	10	0.49	0.02	0.49
(4,34)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD22	10	0.49	0.02	0.49
(4,34)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD23	10	0.49	0.02	0.49
(1,490)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HD3	10	0.49	0.01	0.49
(2,466)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HD11	10	0.49	0.14	0.45
(2,466)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HD12	10	0.49	0.14	0.45
(2,466)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HD13	10	0.49	0.14	0.45
(4,153)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HD11	10	0.49	0.14	0.45
(4,153)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HD12	10	0.49	0.14	0.45
(4,153)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HD13	10	0.49	0.14	0.45
(1,40)	1:11:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HB3	10	0.48	0.08	0.5
(1,112)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HA	10	0.47	0.03	0.47
(1,64)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG2	10	0.47	0.01	0.46
(1,64)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG3	10	0.47	0.01	0.46
(2,13)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	10	0.46	0.14	0.42
(2,13)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	10	0.46	0.14	0.42
(2,13)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	10	0.46	0.14	0.42
(4,2)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	10	0.46	0.14	0.42
(4,2)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	10	0.46	0.14	0.42
(4,2)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	10	0.46	0.14	0.42
(1,203)	1:15:A:GLY:H	1:15:A:GLY:HA2	10	0.46	0.15	0.4
(1,196)	1:13:A:LYS:HG2	1:13:A:LYS:HG3	10	0.46	0.0	0.46
(1,28)	1:14:A:ASP:HB2	1:14:A:ASP:HB3	10	0.45	0.0	0.45
(2,256)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB3	10	0.45	0.21	0.35
(2,256)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB3	10	0.45	0.21	0.35
(3,206)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB3	10	0.45	0.21	0.35
(3,206)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB3	10	0.45	0.21	0.35
(2,111)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	10	0.44	0.12	0.4
(4,21)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	10	0.44	0.12	0.4
(1,180)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HB3	10	0.44	0.0	0.44
(1,342)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:H	10	0.44	0.2	0.36
(1,342)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:H	10	0.44	0.2	0.36
(1,342)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:H	10	0.44	0.2	0.36
(1,126)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HB3	10	0.43	0.0	0.43
(2,19)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD21	10	0.43	0.08	0.43
(2,19)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD22	10	0.43	0.08	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(2,19)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD23	10	0.43	0.08	0.43
(3,13)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD21	10	0.43	0.08	0.43
(3,13)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD22	10	0.43	0.08	0.43
(3,13)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD23	10	0.43	0.08	0.43
(2,334)	1:11:A:TRP:HE1	1:24:A:PRO:HD2	10	0.42	0.22	0.33
(4,80)	1:11:A:TRP:HE1	1:24:A:PRO:HD2	10	0.42	0.22	0.33
(1,224)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HB2	10	0.42	0.01	0.42
(1,224)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HB3	10	0.42	0.01	0.42
(1,298)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD21	10	0.42	0.1	0.42
(1,298)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD22	10	0.42	0.1	0.42
(1,298)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD23	10	0.42	0.1	0.42
(2,385)	1:7:A:LEU:HG	1:8:A:TYR:HA	10	0.41	0.17	0.37
(4,108)	1:7:A:LEU:HG	1:8:A:TYR:HA	10	0.41	0.17	0.37
(2,454)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB3	10	0.41	0.15	0.32
(2,454)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB3	10	0.41	0.15	0.32
(2,454)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB3	10	0.41	0.15	0.32
(4,146)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB3	10	0.41	0.15	0.32
(4,146)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB3	10	0.41	0.15	0.32
(4,146)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB3	10	0.41	0.15	0.32
(2,333)	1:11:A:TRP:HE1	1:23:A:PRO:HA	10	0.4	0.26	0.32
(4,79)	1:11:A:TRP:HE1	1:23:A:PRO:HA	10	0.4	0.26	0.32
(1,339)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:H	10	0.4	0.19	0.41
(2,329)	1:11:A:TRP:HE1	1:12:A:LEU:HD11	10	0.4	0.18	0.36
(2,329)	1:11:A:TRP:HE1	1:12:A:LEU:HD12	10	0.4	0.18	0.36
(2,329)	1:11:A:TRP:HE1	1:12:A:LEU:HD13	10	0.4	0.18	0.36
(4,77)	1:11:A:TRP:HE1	1:12:A:LEU:HD11	10	0.4	0.18	0.36
(4,77)	1:11:A:TRP:HE1	1:12:A:LEU:HD12	10	0.4	0.18	0.36
(4,77)	1:11:A:TRP:HE1	1:12:A:LEU:HD13	10	0.4	0.18	0.36
(1,101)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HG2	10	0.39	0.03	0.4
(2,78)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG2	10	0.39	0.07	0.42
(2,78)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG3	10	0.39	0.07	0.42
(4,14)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG2	10	0.39	0.07	0.42
(4,14)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG3	10	0.39	0.07	0.42
(2,524)	1:2:A:GLU:HB2	1:2:A:GLU:HG2	10	0.39	0.01	0.4
(3,348)	1:2:A:GLU:HB2	1:2:A:GLU:HG2	10	0.39	0.01	0.4
(2,170)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HB2	10	0.38	0.01	0.38
(3,138)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HB2	10	0.38	0.01	0.38
(1,61)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG2	10	0.38	0.04	0.38
(1,61)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG3	10	0.38	0.04	0.38
(2,351)	1:13:A:LYS:HG3	1:14:A:ASP:H	10	0.38	0.1	0.36
(4,90)	1:13:A:LYS:HG3	1:14:A:ASP:H	10	0.38	0.1	0.36
(1,34)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HG2	10	0.38	0.12	0.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(1,198)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HB2	10	0.38	0.07	0.4
(1,198)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HB3	10	0.38	0.07	0.4
(1,473)	1:13:A:LYS:HB2	1:14:A:ASP:H	10	0.38	0.14	0.4
(1,473)	1:13:A:LYS:HB3	1:14:A:ASP:H	10	0.38	0.14	0.4
(1,493)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HB3	10	0.37	0.01	0.38
(1,435)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:HG	10	0.37	0.2	0.34
(1,435)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:HG	10	0.37	0.2	0.34
(1,435)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:HG	10	0.37	0.2	0.34
(2,257)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HG	10	0.37	0.14	0.29
(2,257)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HG	10	0.37	0.14	0.29
(3,207)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HG	10	0.37	0.14	0.29
(3,207)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HG	10	0.37	0.14	0.29
(1,6)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HB	10	0.36	0.05	0.36
(2,277)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD2	10	0.35	0.12	0.4
(3,220)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD2	10	0.35	0.12	0.4
(1,225)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HB3	10	0.35	0.01	0.35
(2,15)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	10	0.34	0.05	0.36
(2,15)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	10	0.34	0.05	0.36
(2,15)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	10	0.34	0.05	0.36
(4,4)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	10	0.34	0.05	0.36
(4,4)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	10	0.34	0.05	0.36
(4,4)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	10	0.34	0.05	0.36
(1,68)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HB2	10	0.34	0.11	0.4
(1,17)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG21	10	0.34	0.02	0.34
(1,17)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG22	10	0.34	0.02	0.34
(1,17)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG23	10	0.34	0.02	0.34
(1,173)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD21	10	0.34	0.05	0.35
(1,173)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD22	10	0.34	0.05	0.35
(1,173)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD23	10	0.34	0.05	0.35
(1,137)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HB3	10	0.34	0.02	0.35
(1,8)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG21	10	0.33	0.05	0.32
(1,8)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG22	10	0.33	0.05	0.32
(1,8)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG23	10	0.33	0.05	0.32
(2,135)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD11	10	0.32	0.02	0.34
(2,135)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD12	10	0.32	0.02	0.34
(2,135)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD13	10	0.32	0.02	0.34
(4,25)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD11	10	0.32	0.02	0.34
(4,25)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD12	10	0.32	0.02	0.34
(4,25)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD13	10	0.32	0.02	0.34
(1,98)	1:24:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HG3	10	0.32	0.07	0.33
(1,428)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	10	0.32	0.17	0.26
(1,428)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	10	0.32	0.17	0.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(1,428)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	10	0.32	0.17	0.26
(1,428)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	10	0.32	0.17	0.26
(1,428)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	10	0.32	0.17	0.26
(1,428)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	10	0.32	0.17	0.26
(1,428)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	10	0.32	0.17	0.26
(1,428)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	10	0.32	0.17	0.26
(1,428)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	10	0.32	0.17	0.26
(2,7)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	10	0.31	0.02	0.32
(2,7)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	10	0.31	0.02	0.32
(2,7)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	10	0.31	0.02	0.32
(4,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	10	0.31	0.02	0.32
(4,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	10	0.31	0.02	0.32
(4,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	10	0.31	0.02	0.32
(1,497)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HG3	10	0.31	0.03	0.31
(1,204)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HG2	10	0.29	0.02	0.3
(1,204)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HG3	10	0.29	0.02	0.3
(1,169)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HA	10	0.29	0.02	0.3
(1,66)	1:18:A:SER:HA	1:18:A:SER:HB2	10	0.29	0.08	0.26
(1,66)	1:18:A:SER:HA	1:18:A:SER:HB3	10	0.29	0.08	0.26
(1,182)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HB2	10	0.28	0.05	0.28
(1,148)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HG13	10	0.28	0.02	0.27
(1,105)	1:23:A:PRO:HD2	1:23:A:PRO:HG2	10	0.27	0.06	0.27
(1,219)	1:21:A:ARG:HG2	1:21:A:ARG:HG3	10	0.27	0.01	0.27
(2,442)	1:3:A:GLU:HB2	1:5:A:VAL:HG11	10	0.27	0.06	0.29
(2,442)	1:3:A:GLU:HB2	1:5:A:VAL:HG12	10	0.27	0.06	0.29
(2,442)	1:3:A:GLU:HB2	1:5:A:VAL:HG13	10	0.27	0.06	0.29
(2,442)	1:3:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG11	10	0.27	0.06	0.29
(2,442)	1:3:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG12	10	0.27	0.06	0.29
(2,442)	1:3:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG13	10	0.27	0.06	0.29
(4,140)	1:3:A:GLU:HB2	1:5:A:VAL:HG11	10	0.27	0.06	0.29
(4,140)	1:3:A:GLU:HB2	1:5:A:VAL:HG12	10	0.27	0.06	0.29
(4,140)	1:3:A:GLU:HB2	1:5:A:VAL:HG13	10	0.27	0.06	0.29
(4,140)	1:3:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG11	10	0.27	0.06	0.29
(4,140)	1:3:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG12	10	0.27	0.06	0.29
(4,140)	1:3:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG13	10	0.27	0.06	0.29
(2,125)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HG	10	0.25	0.02	0.26
(4,23)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HG	10	0.25	0.02	0.26
(1,5)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HA	10	0.25	0.06	0.24
(2,186)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD21	10	0.24	0.03	0.24
(2,186)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD22	10	0.24	0.03	0.24
(2,186)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD23	10	0.24	0.03	0.24
(3,151)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD21	10	0.24	0.03	0.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(3,151)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD22	10	0.24	0.03	0.24
(3,151)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD23	10	0.24	0.03	0.24
(1,16)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	10	0.24	0.03	0.22
(1,16)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	10	0.24	0.03	0.22
(1,16)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	10	0.24	0.03	0.22
(2,512)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HA	10	0.24	0.11	0.2
(2,512)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HA	10	0.24	0.11	0.2
(2,512)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HA	10	0.24	0.11	0.2
(4,174)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HA	10	0.24	0.11	0.2
(4,174)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HA	10	0.24	0.11	0.2
(4,174)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HA	10	0.24	0.11	0.2
(1,496)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HG2	10	0.23	0.05	0.25
(2,514)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HA	10	0.23	0.05	0.21
(2,514)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HA	10	0.23	0.05	0.21
(2,514)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HA	10	0.23	0.05	0.21
(3,340)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HA	10	0.23	0.05	0.21
(3,340)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HA	10	0.23	0.05	0.21
(3,340)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HA	10	0.23	0.05	0.21
(2,431)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HG3	10	0.22	0.04	0.22
(2,431)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HG3	10	0.22	0.04	0.22
(2,431)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HG3	10	0.22	0.04	0.22
(3,298)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HG3	10	0.22	0.04	0.22
(3,298)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HG3	10	0.22	0.04	0.22
(3,298)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HG3	10	0.22	0.04	0.22
(1,188)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HE2	10	0.22	0.03	0.24
(1,188)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HE3	10	0.22	0.03	0.24
(1,188)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HE2	10	0.22	0.03	0.24
(1,188)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HE3	10	0.22	0.03	0.24
(1,176)	1:12:A:LEU:HD21	1:12:A:LEU:HG	10	0.21	0.01	0.21
(1,176)	1:12:A:LEU:HD22	1:12:A:LEU:HG	10	0.21	0.01	0.21
(1,176)	1:12:A:LEU:HD23	1:12:A:LEU:HG	10	0.21	0.01	0.21
(2,147)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HG12	10	0.21	0.04	0.2
(4,29)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HG12	10	0.21	0.04	0.2
(2,102)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HG3	10	0.2	0.04	0.22
(3,83)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HG3	10	0.2	0.04	0.22
(1,49)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HD2	10	0.2	0.02	0.2
(1,49)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HD3	10	0.2	0.02	0.2
(1,49)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HD2	10	0.2	0.02	0.2
(1,49)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HD3	10	0.2	0.02	0.2
(1,44)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HB3	10	0.2	0.1	0.15
(1,25)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	10	0.2	0.05	0.2
(1,25)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	10	0.2	0.05	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(2,47)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG2	10	0.19	0.02	0.2
(3,36)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG2	10	0.19	0.02	0.2
(2,384)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HB	10	0.19	0.09	0.15
(4,107)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HB	10	0.19	0.09	0.15
(1,191)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HG2	10	0.17	0.04	0.17
(1,191)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HG2	10	0.17	0.04	0.17
(2,183)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HG	10	0.16	0.02	0.16
(3,148)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HG	10	0.16	0.02	0.16
(1,10)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG21	10	0.16	0.01	0.16
(1,10)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG22	10	0.16	0.01	0.16
(1,10)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG23	10	0.16	0.01	0.16
(1,9)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG11	10	0.15	0.01	0.15
(1,9)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG12	10	0.15	0.01	0.15
(1,9)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG13	10	0.15	0.01	0.15
(1,51)	1:6:A:ARG:HD2	1:6:A:ARG:HG3	10	0.14	0.02	0.15
(1,51)	1:6:A:ARG:HD3	1:6:A:ARG:HG3	10	0.14	0.02	0.15
(1,119)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HG2	10	0.14	0.01	0.14
(1,119)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HG2	10	0.14	0.01	0.14
(1,124)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HB3	10	0.13	0.01	0.14
(2,108)	1:22:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	9	1.16	0.12	1.19
(4,20)	1:22:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	9	1.16	0.12	1.19
(1,470)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	9	1.06	0.38	1.25
(1,470)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	9	1.06	0.38	1.25
(1,470)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	9	1.06	0.38	1.25
(1,142)	1:8:A:TYR:H	1:8:A:TYR:HB3	9	1.04	0.32	1.21
(1,187)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HE2	9	0.96	0.06	0.98
(1,187)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HE3	9	0.96	0.06	0.98
(1,187)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HE2	9	0.96	0.06	0.98
(1,187)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HE3	9	0.96	0.06	0.98
(1,232)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HD1	9	0.95	0.28	1.04
(1,232)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HD2	9	0.95	0.28	1.04
(1,347)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD11	9	0.95	0.08	0.97
(1,347)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD12	9	0.95	0.08	0.97
(1,347)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD13	9	0.95	0.08	0.97
(1,284)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB3	9	0.9	0.38	1.16
(1,258)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:HD1	9	0.84	0.12	0.84
(1,258)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:HD2	9	0.84	0.12	0.84
(1,258)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:HD1	9	0.84	0.12	0.84
(1,258)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:HD2	9	0.84	0.12	0.84
(1,258)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:HD1	9	0.84	0.12	0.84
(1,258)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:HD2	9	0.84	0.12	0.84
(1,11)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HB	9	0.7	0.1	0.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(2,485)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HA	9	0.61	0.49	0.39
(4,161)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HA	9	0.61	0.49	0.39
(2,392)	1:23:A:PRO:HG2	1:25:A:SER:HB2	9	0.6	0.35	0.39
(2,392)	1:23:A:PRO:HG2	1:25:A:SER:HB3	9	0.6	0.35	0.39
(4,110)	1:23:A:PRO:HG2	1:25:A:SER:HB2	9	0.6	0.35	0.39
(4,110)	1:23:A:PRO:HG2	1:25:A:SER:HB3	9	0.6	0.35	0.39
(1,365)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:H	9	0.59	0.25	0.68
(1,365)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:H	9	0.59	0.25	0.68
(1,365)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:H	9	0.59	0.25	0.68
(1,348)	1:8:A:TYR:H	1:9:A:ILE:HD11	9	0.58	0.18	0.61
(1,348)	1:8:A:TYR:H	1:9:A:ILE:HD12	9	0.58	0.18	0.61
(1,348)	1:8:A:TYR:H	1:9:A:ILE:HD13	9	0.58	0.18	0.61
(2,80)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD2	9	0.58	0.06	0.61
(4,15)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD2	9	0.58	0.06	0.61
(1,366)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:H	9	0.56	0.24	0.56
(1,366)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:H	9	0.56	0.24	0.56
(1,366)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:H	9	0.56	0.24	0.56
(2,422)	1:10:A:GLN:HG2	1:13:A:LYS:HD2	9	0.48	0.17	0.48
(2,422)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:HD2	9	0.48	0.17	0.48
(2,422)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:HD3	9	0.48	0.17	0.48
(3,294)	1:10:A:GLN:HG2	1:13:A:LYS:HD2	9	0.48	0.17	0.48
(3,294)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:HD2	9	0.48	0.17	0.48
(3,294)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:HD3	9	0.48	0.17	0.48
(1,440)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HB2	9	0.48	0.17	0.49
(1,440)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HB2	9	0.48	0.17	0.49
(1,440)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HB2	9	0.48	0.17	0.49
(1,440)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HB3	9	0.48	0.17	0.49
(1,440)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HB3	9	0.48	0.17	0.49
(1,440)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HB3	9	0.48	0.17	0.49
(1,313)	1:11:A:TRP:HE3	1:24:A:PRO:HA	9	0.46	0.22	0.37
(1,189)	1:13:A:LYS:HE2	1:13:A:LYS:HG2	9	0.37	0.25	0.28
(1,189)	1:13:A:LYS:HE3	1:13:A:LYS:HG2	9	0.37	0.25	0.28
(1,446)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD21	9	0.37	0.12	0.37
(1,446)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD22	9	0.37	0.12	0.37
(1,446)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD23	9	0.37	0.12	0.37
(1,446)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD21	9	0.37	0.12	0.37
(1,446)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD22	9	0.37	0.12	0.37
(1,446)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD23	9	0.37	0.12	0.37
(1,215)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HG3	9	0.36	0.07	0.38
(2,393)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HD3	9	0.36	0.23	0.3
(3,283)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HD3	9	0.36	0.23	0.3
(1,12)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG11	9	0.35	0.19	0.31

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(1,12)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG12	9	0.35	0.19	0.31
(1,12)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG13	9	0.35	0.19	0.31
(2,476)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:HZ3	9	0.33	0.17	0.29
(2,476)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:HZ3	9	0.33	0.17	0.29
(4,158)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:HZ3	9	0.33	0.17	0.29
(4,158)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:HZ3	9	0.33	0.17	0.29
(1,369)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HB2	9	0.33	0.14	0.4
(1,299)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD21	9	0.32	0.17	0.22
(1,299)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD22	9	0.32	0.17	0.22
(1,299)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD23	9	0.32	0.17	0.22
(1,45)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HD2	9	0.29	0.13	0.25
(1,45)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HD3	9	0.29	0.13	0.25
(2,364)	1:5:A:VAL:H	1:6:A:ARG:HB2	9	0.23	0.03	0.24
(3,268)	1:5:A:VAL:H	1:6:A:ARG:HB2	9	0.23	0.03	0.24
(2,177)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD11	9	0.23	0.08	0.21
(2,177)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD12	9	0.23	0.08	0.21
(2,177)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD13	9	0.23	0.08	0.21
(3,144)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD11	9	0.23	0.08	0.21
(3,144)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD12	9	0.23	0.08	0.21
(3,144)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD13	9	0.23	0.08	0.21
(2,104)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD3	9	0.22	0.03	0.22
(3,85)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD3	9	0.22	0.03	0.22
(2,383)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG2	9	0.22	0.08	0.18
(2,383)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG3	9	0.22	0.08	0.18
(4,106)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG2	9	0.22	0.08	0.18
(4,106)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG3	9	0.22	0.08	0.18
(2,139)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB3	9	0.2	0.04	0.2
(4,26)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB3	9	0.2	0.04	0.2
(1,57)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HB2	9	0.19	0.07	0.22
(2,443)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD11	9	0.18	0.03	0.18
(2,443)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD12	9	0.18	0.03	0.18
(2,443)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD13	9	0.18	0.03	0.18
(2,443)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	9	0.18	0.03	0.18
(2,443)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	9	0.18	0.03	0.18
(2,443)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	9	0.18	0.03	0.18
(3,303)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD11	9	0.18	0.03	0.18
(3,303)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD12	9	0.18	0.03	0.18
(3,303)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD13	9	0.18	0.03	0.18
(3,303)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	9	0.18	0.03	0.18
(3,303)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	9	0.18	0.03	0.18
(3,303)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	9	0.18	0.03	0.18
(1,194)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HG3	9	0.17	0.01	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(1,194)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HG3	9	0.17	0.01	0.17
(1,197)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HA	9	0.14	0.02	0.14
(1,328)	1:11:A:TRP:HZ2	1:11:A:TRP:HZ3	9	0.13	0.01	0.13
(1,152)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HG21	9	0.12	0.01	0.12
(1,152)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HG22	9	0.12	0.01	0.12
(1,152)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HG23	9	0.12	0.01	0.12
(1,117)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:H	8	1.57	0.03	1.58
(1,117)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:H	8	1.57	0.03	1.58
(1,118)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:H	8	1.09	0.24	1.17
(1,118)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:H	8	1.09	0.24	1.17
(2,292)	1:11:A:TRP:HZ3	1:23:A:PRO:HG2	8	1.04	0.15	1.07
(3,231)	1:11:A:TRP:HZ3	1:23:A:PRO:HG2	8	1.04	0.15	1.07
(1,362)	1:24:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	8	1.01	0.15	1.06
(1,506)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	8	0.82	0.34	1.0
(1,506)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	8	0.82	0.34	1.0
(1,506)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	8	0.82	0.34	1.0
(1,396)	1:8:A:TYR:HB3	1:23:A:PRO:HD3	8	0.74	0.22	0.84
(1,396)	1:23:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HD3	8	0.74	0.22	0.84
(1,245)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB2	8	0.66	0.38	0.61
(1,245)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB2	8	0.66	0.38	0.61
(2,403)	1:19:A:SER:HB3	1:21:A:ARG:HG2	8	0.64	0.45	0.38
(4,115)	1:19:A:SER:HB3	1:21:A:ARG:HG2	8	0.64	0.45	0.38
(2,283)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG2	8	0.63	0.28	0.8
(3,225)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG2	8	0.63	0.28	0.8
(1,507)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	8	0.61	0.2	0.68
(1,507)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	8	0.61	0.2	0.68
(1,507)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	8	0.61	0.2	0.68
(1,413)	1:1:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD2	8	0.59	0.34	0.51
(1,413)	1:1:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD3	8	0.59	0.34	0.51
(1,413)	1:1:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD2	8	0.59	0.34	0.51
(1,413)	1:1:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD3	8	0.59	0.34	0.51
(1,100)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HD2	8	0.58	0.21	0.57
(1,259)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:HE1	8	0.58	0.37	0.55
(1,259)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:HE2	8	0.58	0.37	0.55
(1,259)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:HE1	8	0.58	0.37	0.55
(1,259)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:HE2	8	0.58	0.37	0.55
(1,259)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:HE1	8	0.58	0.37	0.55
(1,259)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:HE2	8	0.58	0.37	0.55
(1,286)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG3	8	0.56	0.25	0.68
(2,210)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD3	8	0.45	0.22	0.42
(4,36)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD3	8	0.45	0.22	0.42
(1,223)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG3	8	0.41	0.15	0.38

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(1,273)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD3	8	0.39	0.15	0.38
(2,85)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD3	8	0.39	0.39	0.28
(4,17)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD3	8	0.39	0.39	0.28
(1,108)	1:22:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	8	0.35	0.09	0.37
(2,350)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:H	8	0.32	0.41	0.15
(2,350)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:H	8	0.32	0.41	0.15
(2,350)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:H	8	0.32	0.41	0.15
(3,261)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:H	8	0.32	0.41	0.15
(3,261)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:H	8	0.32	0.41	0.15
(3,261)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:H	8	0.32	0.41	0.15
(2,464)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD11	8	0.25	0.07	0.27
(2,464)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD12	8	0.25	0.07	0.27
(2,464)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD13	8	0.25	0.07	0.27
(3,313)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD11	8	0.25	0.07	0.27
(3,313)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD12	8	0.25	0.07	0.27
(3,313)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD13	8	0.25	0.07	0.27
(1,160)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD11	8	0.22	0.12	0.17
(1,160)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD12	8	0.22	0.12	0.17
(1,160)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD13	8	0.22	0.12	0.17
(2,508)	1:12:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HD2	8	0.21	0.09	0.21
(2,508)	1:12:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HD2	8	0.21	0.09	0.21
(2,508)	1:12:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HD2	8	0.21	0.09	0.21
(4,171)	1:12:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HD2	8	0.21	0.09	0.21
(4,171)	1:12:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HD2	8	0.21	0.09	0.21
(4,171)	1:12:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HD2	8	0.21	0.09	0.21
(2,516)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD11	8	0.2	0.04	0.18
(2,516)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD12	8	0.2	0.04	0.18
(2,516)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD13	8	0.2	0.04	0.18
(3,342)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD11	8	0.2	0.04	0.18
(3,342)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD12	8	0.2	0.04	0.18
(3,342)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD13	8	0.2	0.04	0.18
(1,92)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD2	8	0.19	0.05	0.17
(2,509)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HD3	8	0.19	0.04	0.2
(2,509)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HD3	8	0.19	0.04	0.2
(2,509)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HD3	8	0.19	0.04	0.2
(3,338)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HD3	8	0.19	0.04	0.2
(3,338)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HD3	8	0.19	0.04	0.2
(3,338)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HD3	8	0.19	0.04	0.2
(2,156)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HB	8	0.17	0.07	0.14
(4,30)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HB	8	0.17	0.07	0.14
(2,500)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD11	8	0.16	0.02	0.16
(2,500)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD12	8	0.16	0.02	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(2,500)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD13	8	0.16	0.02	0.16
(3,333)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD11	8	0.16	0.02	0.16
(3,333)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD12	8	0.16	0.02	0.16
(3,333)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD13	8	0.16	0.02	0.16
(2,455)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD21	8	0.15	0.02	0.15
(2,455)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD22	8	0.15	0.02	0.15
(2,455)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD23	8	0.15	0.02	0.15
(4,147)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD21	8	0.15	0.02	0.15
(4,147)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD22	8	0.15	0.02	0.15
(4,147)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD23	8	0.15	0.02	0.15
(2,158)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG13	8	0.15	0.02	0.15
(3,128)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG13	8	0.15	0.02	0.15
(2,501)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB3	7	1.27	0.01	1.27
(2,501)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB3	7	1.27	0.01	1.27
(2,501)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB3	7	1.27	0.01	1.27
(4,168)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB3	7	1.27	0.01	1.27
(4,168)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB3	7	1.27	0.01	1.27
(4,168)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB3	7	1.27	0.01	1.27
(2,397)	1:14:A:ASP:HB2	1:19:A:SER:HB3	7	1.18	0.22	1.27
(3,285)	1:14:A:ASP:HB2	1:19:A:SER:HB3	7	1.18	0.22	1.27
(1,382)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	7	1.13	0.87	0.41
(1,449)	1:12:A:LEU:HD11	1:14:A:ASP:HB2	7	1.12	0.2	1.16
(1,449)	1:12:A:LEU:HD12	1:14:A:ASP:HB2	7	1.12	0.2	1.16
(1,449)	1:12:A:LEU:HD13	1:14:A:ASP:HB2	7	1.12	0.2	1.16
(2,398)	1:14:A:ASP:HB2	1:19:A:SER:HB2	7	0.87	0.39	0.69
(3,286)	1:14:A:ASP:HB2	1:19:A:SER:HB2	7	0.87	0.39	0.69
(1,340)	1:10:A:GLN:HG2	1:13:A:LYS:H	7	0.81	0.11	0.86
(1,340)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:H	7	0.81	0.11	0.86
(1,491)	1:8:A:TYR:HB2	1:24:A:PRO:HB3	7	0.72	0.23	0.74
(1,445)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HG2	7	0.64	0.05	0.64
(1,445)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HG2	7	0.64	0.05	0.64
(1,445)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HG2	7	0.64	0.05	0.64
(1,445)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HG3	7	0.64	0.05	0.64
(1,445)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HG3	7	0.64	0.05	0.64
(1,445)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HG3	7	0.64	0.05	0.64
(1,30)	1:14:A:ASP:H	1:14:A:ASP:HB3	7	0.63	0.04	0.64
(1,518)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HE1	7	0.53	0.24	0.59
(1,518)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HE2	7	0.53	0.24	0.59
(1,143)	1:8:A:TYR:H	1:8:A:TYR:HB2	7	0.46	0.36	0.17
(1,501)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB3	7	0.43	0.01	0.43
(1,501)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB3	7	0.43	0.01	0.43
(1,501)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB3	7	0.43	0.01	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(1,69)	1:19:A:SER:HA	1:19:A:SER:HB2	7	0.36	0.04	0.36
(1,484)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HD1	7	0.34	0.22	0.33
(1,484)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HD2	7	0.34	0.22	0.33
(1,20)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HD1	7	0.31	0.1	0.29
(1,20)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HD2	7	0.31	0.1	0.29
(1,513)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD11	7	0.29	0.11	0.27
(1,513)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD12	7	0.29	0.11	0.27
(1,513)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD13	7	0.29	0.11	0.27
(2,530)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:HB2	7	0.29	0.03	0.29
(2,530)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:HB2	7	0.29	0.03	0.29
(2,530)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:HB2	7	0.29	0.03	0.29
(3,350)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:HB2	7	0.29	0.03	0.29
(3,350)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:HB2	7	0.29	0.03	0.29
(3,350)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:HB2	7	0.29	0.03	0.29
(2,291)	1:11:A:TRP:HZ3	1:23:A:PRO:HG3	7	0.28	0.07	0.32
(4,61)	1:11:A:TRP:HZ3	1:23:A:PRO:HG3	7	0.28	0.07	0.32
(1,301)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD11	7	0.27	0.12	0.3
(1,301)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD12	7	0.27	0.12	0.3
(1,301)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD13	7	0.27	0.12	0.3
(1,427)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG11	7	0.27	0.13	0.18
(1,427)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG12	7	0.27	0.13	0.18
(1,427)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG13	7	0.27	0.13	0.18
(1,427)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG11	7	0.27	0.13	0.18
(1,427)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG12	7	0.27	0.13	0.18
(1,427)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG13	7	0.27	0.13	0.18
(1,427)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG11	7	0.27	0.13	0.18
(1,427)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG12	7	0.27	0.13	0.18
(1,427)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG13	7	0.27	0.13	0.18
(1,26)	1:14:A:ASP:HA	1:14:A:ASP:HB2	7	0.27	0.02	0.26
(2,452)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD11	7	0.24	0.12	0.21
(2,452)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD12	7	0.24	0.12	0.21
(2,452)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD13	7	0.24	0.12	0.21
(4,145)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD11	7	0.24	0.12	0.21
(4,145)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD12	7	0.24	0.12	0.21
(4,145)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD13	7	0.24	0.12	0.21
(1,24)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	7	0.24	0.06	0.26
(1,24)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	7	0.24	0.06	0.26
(2,359)	1:10:A:GLN:HG2	1:11:A:TRP:H	7	0.23	0.05	0.24
(2,359)	1:10:A:GLN:HG3	1:11:A:TRP:H	7	0.23	0.05	0.24
(3,264)	1:10:A:GLN:HG2	1:11:A:TRP:H	7	0.23	0.05	0.24
(3,264)	1:10:A:GLN:HG3	1:11:A:TRP:H	7	0.23	0.05	0.24
(2,309)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HD2	7	0.22	0.07	0.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(3,241)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HD2	7	0.22	0.07	0.22
(2,447)	1:3:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG11	7	0.19	0.05	0.19
(2,447)	1:3:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG12	7	0.19	0.05	0.19
(2,447)	1:3:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG13	7	0.19	0.05	0.19
(2,447)	1:3:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG11	7	0.19	0.05	0.19
(2,447)	1:3:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG12	7	0.19	0.05	0.19
(2,447)	1:3:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG13	7	0.19	0.05	0.19
(4,142)	1:3:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG11	7	0.19	0.05	0.19
(4,142)	1:3:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG12	7	0.19	0.05	0.19
(4,142)	1:3:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG13	7	0.19	0.05	0.19
(4,142)	1:3:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG11	7	0.19	0.05	0.19
(4,142)	1:3:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG12	7	0.19	0.05	0.19
(4,142)	1:3:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG13	7	0.19	0.05	0.19
(1,323)	1:11:A:TRP:HE1	1:11:A:TRP:HH2	7	0.18	0.01	0.17
(2,297)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD11	7	0.17	0.02	0.16
(2,297)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD12	7	0.17	0.02	0.16
(2,297)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD13	7	0.17	0.02	0.16
(4,64)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD11	7	0.17	0.02	0.16
(4,64)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD12	7	0.17	0.02	0.16
(4,64)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD13	7	0.17	0.02	0.16
(2,280)	1:11:A:TRP:HH2	1:24:A:PRO:HD2	7	0.16	0.04	0.17
(3,223)	1:11:A:TRP:HH2	1:24:A:PRO:HD2	7	0.16	0.04	0.17
(1,89)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG2	7	0.15	0.03	0.14
(2,93)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD2	7	0.12	0.02	0.12
(3,76)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD2	7	0.12	0.02	0.12
(1,310)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HD3	6	0.88	0.05	0.88
(1,208)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HG3	6	0.77	0.08	0.74
(2,233)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HE1	6	0.58	0.52	0.3
(2,233)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HE2	6	0.58	0.52	0.3
(4,41)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HE1	6	0.58	0.52	0.3
(4,41)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HE2	6	0.58	0.52	0.3
(1,394)	1:23:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HD2	6	0.52	0.03	0.52
(1,331)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB2	6	0.41	0.12	0.42
(2,270)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD2	6	0.4	0.04	0.41
(3,215)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD2	6	0.4	0.04	0.41
(1,397)	1:14:A:ASP:HB2	1:19:A:SER:HB3	6	0.38	0.13	0.42
(1,373)	1:7:A:LEU:HG	1:24:A:PRO:HA	6	0.3	0.11	0.35
(1,211)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD2	6	0.29	0.12	0.32
(1,211)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HD2	6	0.29	0.12	0.32
(1,399)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	6	0.29	0.07	0.32
(2,416)	1:10:A:GLN:HG2	1:13:A:LYS:HE2	6	0.28	0.33	0.15
(2,416)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:HE2	6	0.28	0.33	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(2,416)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:HE3	6	0.28	0.33	0.15
(3,292)	1:10:A:GLN:HG2	1:13:A:LYS:HE2	6	0.28	0.33	0.15
(3,292)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:HE2	6	0.28	0.33	0.15
(3,292)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:HE3	6	0.28	0.33	0.15
(2,462)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HA	6	0.27	0.11	0.28
(2,462)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HA	6	0.27	0.11	0.28
(2,462)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HA	6	0.27	0.11	0.28
(4,150)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HA	6	0.27	0.11	0.28
(4,150)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HA	6	0.27	0.11	0.28
(4,150)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HA	6	0.27	0.11	0.28
(1,292)	1:11:A:TRP:HZ3	1:23:A:PRO:HG2	6	0.25	0.08	0.25
(2,361)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:H	6	0.24	0.03	0.24
(3,266)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:H	6	0.24	0.03	0.24
(1,345)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD11	6	0.24	0.07	0.2
(1,345)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD12	6	0.24	0.07	0.2
(1,345)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD13	6	0.24	0.07	0.2
(1,264)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	6	0.22	0.06	0.24
(1,264)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	6	0.22	0.06	0.24
(1,264)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	6	0.22	0.06	0.24
(1,264)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	6	0.22	0.06	0.24
(1,264)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	6	0.22	0.06	0.24
(1,264)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	6	0.22	0.06	0.24
(1,21)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE1	6	0.22	0.07	0.22
(1,21)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE2	6	0.22	0.07	0.22
(1,343)	1:12:A:LEU:HD21	1:13:A:LYS:H	6	0.22	0.08	0.22
(1,343)	1:12:A:LEU:HD22	1:13:A:LYS:H	6	0.22	0.08	0.22
(1,343)	1:12:A:LEU:HD23	1:13:A:LYS:H	6	0.22	0.08	0.22
(1,409)	1:23:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	6	0.22	0.1	0.18
(2,234)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HA	6	0.17	0.05	0.16
(2,234)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HA	6	0.17	0.05	0.16
(3,193)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HA	6	0.17	0.05	0.16
(3,193)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HA	6	0.17	0.05	0.16
(2,308)	1:11:A:TRP:HD1	1:24:A:PRO:HD3	6	0.15	0.03	0.14
(3,240)	1:11:A:TRP:HD1	1:24:A:PRO:HD3	6	0.15	0.03	0.14
(2,86)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD2	6	0.15	0.02	0.15
(3,69)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD2	6	0.15	0.02	0.15
(1,38)	1:11:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HA	6	0.11	0.01	0.11
(2,483)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HE1	5	0.83	0.61	0.71
(2,483)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HE2	5	0.83	0.61	0.71
(4,160)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HE1	5	0.83	0.61	0.71
(4,160)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HE2	5	0.83	0.61	0.71
(1,235)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HA	5	0.73	0.35	0.79

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(1,235)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HA	5	0.73	0.35	0.79
(1,247)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB3	5	0.66	0.27	0.76
(1,247)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB3	5	0.66	0.27	0.76
(1,486)	1:24:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:HA	5	0.57	0.31	0.43
(1,263)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE1	5	0.56	0.31	0.43
(1,263)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE2	5	0.56	0.31	0.43
(1,263)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE1	5	0.56	0.31	0.43
(1,263)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE2	5	0.56	0.31	0.43
(1,263)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE1	5	0.56	0.31	0.43
(1,263)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE2	5	0.56	0.31	0.43
(1,448)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG11	5	0.54	0.2	0.57
(1,448)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG12	5	0.54	0.2	0.57
(1,448)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG13	5	0.54	0.2	0.57
(1,448)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG11	5	0.54	0.2	0.57
(1,448)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG12	5	0.54	0.2	0.57
(1,448)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG13	5	0.54	0.2	0.57
(1,391)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HD2	5	0.48	0.23	0.34
(2,265)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD11	5	0.44	0.16	0.54
(2,265)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD12	5	0.44	0.16	0.54
(2,265)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD13	5	0.44	0.16	0.54
(2,265)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD11	5	0.44	0.16	0.54
(2,265)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD12	5	0.44	0.16	0.54
(2,265)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD13	5	0.44	0.16	0.54
(3,211)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD11	5	0.44	0.16	0.54
(3,211)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD12	5	0.44	0.16	0.54
(3,211)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD13	5	0.44	0.16	0.54
(3,211)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD11	5	0.44	0.16	0.54
(3,211)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD12	5	0.44	0.16	0.54
(3,211)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD13	5	0.44	0.16	0.54
(1,303)	1:11:A:TRP:HZ3	1:23:A:PRO:HB2	5	0.42	0.18	0.35
(1,255)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HG	5	0.41	0.16	0.45
(1,255)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HG	5	0.41	0.16	0.45
(1,358)	1:10:A:GLN:HB2	1:11:A:TRP:H	5	0.41	0.09	0.46
(1,302)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD11	5	0.35	0.17	0.31
(1,302)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD12	5	0.35	0.17	0.31
(1,302)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD13	5	0.35	0.17	0.31
(1,521)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HB3	5	0.34	0.03	0.33
(2,407)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:HB3	5	0.3	0.15	0.26
(2,407)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:HB3	5	0.3	0.15	0.26
(2,407)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:HB3	5	0.3	0.15	0.26
(4,117)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:HB3	5	0.3	0.15	0.26
(4,117)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:HB3	5	0.3	0.15	0.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(4,117)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:HB3	5	0.3	0.15	0.26
(2,251)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG3	5	0.28	0.09	0.31
(2,251)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG3	5	0.28	0.09	0.31
(3,203)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG3	5	0.28	0.09	0.31
(3,203)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG3	5	0.28	0.09	0.31
(1,346)	1:12:A:LEU:HD11	1:14:A:ASP:H	5	0.26	0.08	0.27
(1,346)	1:12:A:LEU:HD12	1:14:A:ASP:H	5	0.26	0.08	0.27
(1,346)	1:12:A:LEU:HD13	1:14:A:ASP:H	5	0.26	0.08	0.27
(2,492)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG3	5	0.23	0.11	0.19
(4,165)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG3	5	0.23	0.11	0.19
(2,240)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HD2	5	0.22	0.08	0.19
(2,240)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HD2	5	0.22	0.08	0.19
(3,196)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HD2	5	0.22	0.08	0.19
(3,196)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HD2	5	0.22	0.08	0.19
(1,206)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HB2	5	0.22	0.06	0.25
(1,206)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HB3	5	0.22	0.06	0.25
(1,367)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD2	5	0.22	0.05	0.22
(1,375)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HB2	5	0.19	0.02	0.2
(1,114)	1:25:A:SER:HA	1:25:A:SER:HB2	5	0.18	0.07	0.16
(1,114)	1:25:A:SER:HA	1:25:A:SER:HB3	5	0.18	0.07	0.16
(2,63)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD2	5	0.16	0.02	0.16
(3,50)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD2	5	0.16	0.02	0.16
(2,209)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD2	5	0.15	0.04	0.14
(2,300)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD21	5	0.15	0.08	0.11
(2,300)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD22	5	0.15	0.08	0.11
(2,300)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD23	5	0.15	0.08	0.11
(3,174)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD2	5	0.15	0.04	0.14
(3,235)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD21	5	0.15	0.08	0.11
(3,235)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD22	5	0.15	0.08	0.11
(3,235)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD23	5	0.15	0.08	0.11
(2,388)	1:3:A:GLU:HA	1:6:A:ARG:HB2	5	0.14	0.03	0.15
(3,279)	1:3:A:GLU:HA	1:6:A:ARG:HB2	5	0.14	0.03	0.15
(1,269)	1:11:A:TRP:HE1	1:11:A:TRP:HZ2	5	0.14	0.03	0.16
(1,138)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB2	4	1.31	0.01	1.31
(2,331)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB3	4	1.24	0.07	1.23
(3,254)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB3	4	1.24	0.07	1.23
(1,304)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HG3	4	1.1	0.02	1.1
(2,306)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB3	4	1.08	0.01	1.08
(3,239)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB3	4	1.08	0.01	1.08
(1,379)	1:11:A:TRP:HA	1:14:A:ASP:HB2	4	0.96	0.2	1.04
(1,453)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HB3	4	0.72	0.07	0.7
(1,453)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HB3	4	0.72	0.07	0.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(1,453)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HB3	4	0.72	0.07	0.7
(1,415)	1:7:A:LEU:HB2	1:8:A:TYR:HB3	4	0.68	0.2	0.72
(1,487)	1:8:A:TYR:HB2	1:24:A:PRO:HA	4	0.63	0.17	0.64
(1,242)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HD1	4	0.62	0.29	0.5
(1,242)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HD2	4	0.62	0.29	0.5
(1,242)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HD1	4	0.62	0.29	0.5
(1,242)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HD2	4	0.62	0.29	0.5
(1,402)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	4	0.59	0.12	0.55
(1,402)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	4	0.59	0.12	0.55
(2,211)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD2	4	0.58	0.22	0.46
(3,175)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD2	4	0.58	0.22	0.46
(1,519)	1:8:A:TYR:HE1	1:25:A:SER:HA	4	0.47	0.29	0.45
(1,519)	1:8:A:TYR:HE2	1:25:A:SER:HA	4	0.47	0.29	0.45
(1,531)	1:7:A:LEU:HB2	1:24:A:PRO:HA	4	0.45	0.16	0.44
(1,275)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HD3	4	0.42	0.21	0.34
(2,519)	1:8:A:TYR:HE1	1:25:A:SER:HA	4	0.4	0.06	0.39
(2,519)	1:8:A:TYR:HE2	1:25:A:SER:HA	4	0.4	0.06	0.39
(3,344)	1:8:A:TYR:HE1	1:25:A:SER:HA	4	0.4	0.06	0.39
(3,344)	1:8:A:TYR:HE2	1:25:A:SER:HA	4	0.4	0.06	0.39
(1,22)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HD1	4	0.38	0.16	0.44
(1,22)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HD2	4	0.38	0.16	0.44
(2,260)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HD1	4	0.38	0.13	0.34
(2,260)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HD2	4	0.38	0.13	0.34
(2,260)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HD1	4	0.38	0.13	0.34
(2,260)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HD2	4	0.38	0.13	0.34
(2,260)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HD1	4	0.38	0.13	0.34
(2,260)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HD2	4	0.38	0.13	0.34
(4,51)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HD1	4	0.38	0.13	0.34
(4,51)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HD2	4	0.38	0.13	0.34
(4,51)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HD1	4	0.38	0.13	0.34
(4,51)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HD2	4	0.38	0.13	0.34
(4,51)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HD1	4	0.38	0.13	0.34
(4,51)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HD2	4	0.38	0.13	0.34
(1,374)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	4	0.36	0.12	0.33
(1,374)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB3	4	0.36	0.12	0.33
(1,229)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HA	4	0.33	0.11	0.38
(1,229)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HA	4	0.33	0.11	0.38
(1,218)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG3	4	0.27	0.0	0.27
(1,218)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HG3	4	0.27	0.0	0.27
(2,404)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HD3	4	0.24	0.01	0.24
(3,289)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HD3	4	0.24	0.01	0.24
(1,360)	1:21:A:ARG:H	1:22:A:PRO:HD2	4	0.22	0.01	0.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(1,246)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HB2	4	0.22	0.1	0.21
(1,246)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HB2	4	0.22	0.1	0.21
(1,23)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HD1	4	0.21	0.05	0.24
(1,23)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HD2	4	0.21	0.05	0.24
(2,62)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD3	4	0.21	0.05	0.22
(4,13)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD3	4	0.21	0.05	0.22
(2,222)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG2	4	0.2	0.06	0.22
(3,185)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG2	4	0.2	0.06	0.22
(2,276)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	4	0.19	0.05	0.18
(3,219)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	4	0.19	0.05	0.18
(1,352)	1:21:A:ARG:H	1:22:A:PRO:HB3	4	0.18	0.02	0.18
(2,338)	1:8:A:TYR:HB3	1:9:A:ILE:H	4	0.18	0.03	0.18
(4,82)	1:8:A:TYR:HB3	1:9:A:ILE:H	4	0.18	0.03	0.18
(2,281)	1:11:A:TRP:HZ2	1:24:A:PRO:HD2	4	0.18	0.07	0.16
(3,224)	1:11:A:TRP:HZ2	1:24:A:PRO:HD2	4	0.18	0.07	0.16
(2,250)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG2	4	0.18	0.06	0.16
(2,250)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG2	4	0.18	0.06	0.16
(3,202)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG2	4	0.18	0.06	0.16
(3,202)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG2	4	0.18	0.06	0.16
(2,231)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HD1	4	0.17	0.04	0.18
(2,231)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HD2	4	0.17	0.04	0.18
(3,191)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HD1	4	0.17	0.04	0.18
(3,191)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HD2	4	0.17	0.04	0.18
(2,433)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HD2	4	0.15	0.04	0.14
(2,433)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HD2	4	0.15	0.04	0.14
(2,433)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HD2	4	0.15	0.04	0.14
(2,433)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HD3	4	0.15	0.04	0.14
(2,433)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HD3	4	0.15	0.04	0.14
(2,433)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HD3	4	0.15	0.04	0.14
(2,453)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HB3	4	0.15	0.03	0.15
(2,453)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HB3	4	0.15	0.03	0.15
(2,453)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HB3	4	0.15	0.03	0.15
(3,300)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HD2	4	0.15	0.04	0.14
(3,300)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HD2	4	0.15	0.04	0.14
(3,300)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HD2	4	0.15	0.04	0.14
(3,300)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HD3	4	0.15	0.04	0.14
(3,300)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HD3	4	0.15	0.04	0.14
(3,300)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HD3	4	0.15	0.04	0.14
(3,308)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HB3	4	0.15	0.03	0.15
(3,308)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HB3	4	0.15	0.03	0.15
(3,308)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HB3	4	0.15	0.03	0.15
(2,138)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB2	4	0.15	0.01	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(3,113)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB2	4	0.15	0.01	0.15
(2,304)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HG3	4	0.14	0.01	0.14
(3,237)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HG3	4	0.14	0.01	0.14
(2,236)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:HB2	4	0.13	0.02	0.14
(2,236)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:HB2	4	0.13	0.02	0.14
(3,194)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:HB2	4	0.13	0.02	0.14
(3,194)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:HB2	4	0.13	0.02	0.14
(2,217)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG2	4	0.12	0.01	0.12
(2,217)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HG2	4	0.12	0.01	0.12
(3,181)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG2	4	0.12	0.01	0.12
(3,181)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HG2	4	0.12	0.01	0.12
(1,359)	1:10:A:GLN:HG2	1:11:A:TRP:H	3	1.07	0.12	1.04
(1,359)	1:10:A:GLN:HG3	1:11:A:TRP:H	3	1.07	0.12	1.04
(2,311)	1:11:A:TRP:HD1	1:19:A:SER:HB3	3	0.85	0.55	0.96
(3,243)	1:11:A:TRP:HD1	1:19:A:SER:HB3	3	0.85	0.55	0.96
(1,261)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	3	0.49	0.32	0.47
(1,261)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	3	0.49	0.32	0.47
(1,261)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	3	0.49	0.32	0.47
(1,261)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	3	0.49	0.32	0.47
(1,261)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	3	0.49	0.32	0.47
(1,261)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	3	0.49	0.32	0.47
(1,483)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HE1	3	0.47	0.31	0.44
(1,483)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HE2	3	0.47	0.31	0.44
(1,401)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD2	3	0.45	0.12	0.43
(1,401)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD2	3	0.45	0.12	0.43
(1,485)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HA	3	0.4	0.13	0.39
(1,502)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB2	3	0.38	0.06	0.36
(1,502)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB2	3	0.38	0.06	0.36
(1,502)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB2	3	0.38	0.06	0.36
(2,389)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HA	3	0.36	0.33	0.12
(2,389)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HA	3	0.36	0.33	0.12
(2,389)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HA	3	0.36	0.33	0.12
(3,280)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HA	3	0.36	0.33	0.12
(3,280)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HA	3	0.36	0.33	0.12
(3,280)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HA	3	0.36	0.33	0.12
(1,254)	1:7:A:LEU:HG	1:8:A:TYR:HD1	3	0.35	0.03	0.37
(1,254)	1:7:A:LEU:HG	1:8:A:TYR:HD2	3	0.35	0.03	0.37
(2,358)	1:10:A:GLN:HB2	1:11:A:TRP:H	3	0.34	0.11	0.3
(3,263)	1:10:A:GLN:HB2	1:11:A:TRP:H	3	0.34	0.11	0.3
(1,492)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG3	3	0.32	0.14	0.4
(2,42)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG2	3	0.3	0.01	0.3
(2,42)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG3	3	0.3	0.01	0.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(3,31)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG2	3	0.3	0.01	0.3
(3,31)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG3	3	0.3	0.01	0.3
(1,322)	1:11:A:TRP:HZ3	1:24:A:PRO:HD2	3	0.3	0.04	0.32
(2,399)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	3	0.3	0.18	0.2
(3,287)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	3	0.3	0.18	0.2
(1,70)	1:19:A:SER:HA	1:19:A:SER:HB3	3	0.28	0.06	0.31
(2,212)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD3	3	0.24	0.15	0.16
(2,212)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HD3	3	0.24	0.15	0.16
(3,176)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD3	3	0.24	0.15	0.16
(3,176)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HD3	3	0.24	0.15	0.16
(1,376)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG2	3	0.2	0.01	0.19
(1,377)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG3	3	0.2	0.04	0.2
(1,392)	1:23:A:PRO:HG2	1:25:A:SER:HB2	3	0.19	0.11	0.12
(1,392)	1:23:A:PRO:HG2	1:25:A:SER:HB3	3	0.19	0.11	0.12
(2,161)	1:10:A:GLN:HB2	1:10:A:GLN:HG2	3	0.17	0.01	0.17
(2,161)	1:10:A:GLN:HB2	1:10:A:GLN:HG3	3	0.17	0.01	0.17
(3,130)	1:10:A:GLN:HB2	1:10:A:GLN:HG2	3	0.17	0.01	0.17
(3,130)	1:10:A:GLN:HB2	1:10:A:GLN:HG3	3	0.17	0.01	0.17
(1,528)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HB	3	0.16	0.04	0.17
(1,528)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HB	3	0.16	0.04	0.17
(1,528)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HB	3	0.16	0.04	0.17
(2,451)	1:8:A:TYR:HB3	1:9:A:ILE:HD11	3	0.15	0.05	0.13
(2,451)	1:8:A:TYR:HB3	1:9:A:ILE:HD12	3	0.15	0.05	0.13
(2,451)	1:8:A:TYR:HB3	1:9:A:ILE:HD13	3	0.15	0.05	0.13
(3,307)	1:8:A:TYR:HB3	1:9:A:ILE:HD11	3	0.15	0.05	0.13
(3,307)	1:8:A:TYR:HB3	1:9:A:ILE:HD12	3	0.15	0.05	0.13
(3,307)	1:8:A:TYR:HB3	1:9:A:ILE:HD13	3	0.15	0.05	0.13
(1,279)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HA	3	0.15	0.02	0.15
(2,410)	1:3:A:GLU:HB2	1:6:A:ARG:HD3	3	0.15	0.04	0.14
(2,410)	1:3:A:GLU:HB3	1:6:A:ARG:HD3	3	0.15	0.04	0.14
(4,120)	1:3:A:GLU:HB2	1:6:A:ARG:HD3	3	0.15	0.04	0.14
(4,120)	1:3:A:GLU:HB3	1:6:A:ARG:HD3	3	0.15	0.04	0.14
(2,469)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG11	3	0.15	0.02	0.14
(2,469)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG12	3	0.15	0.02	0.14
(2,469)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG13	3	0.15	0.02	0.14
(3,314)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG11	3	0.15	0.02	0.14
(3,314)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG12	3	0.15	0.02	0.14
(3,314)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG13	3	0.15	0.02	0.14
(1,162)	1:10:A:GLN:HB3	1:10:A:GLN:HG2	3	0.14	0.0	0.14
(1,162)	1:10:A:GLN:HB3	1:10:A:GLN:HG3	3	0.14	0.0	0.14
(2,117)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:H	3	0.14	0.02	0.13
(3,96)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:H	3	0.14	0.02	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(1,121)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HA	3	0.13	0.02	0.12
(1,106)	1:23:A:PRO:HD3	1:23:A:PRO:HG3	3	0.12	0.01	0.12
(1,168)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	3	0.12	0.01	0.13
(2,522)	1:1:A:GLU:HG2	1:2:A:GLU:HA	3	0.12	0.01	0.12
(2,522)	1:1:A:GLU:HG3	1:2:A:GLU:HA	3	0.12	0.01	0.12
(3,347)	1:1:A:GLU:HG2	1:2:A:GLU:HA	3	0.12	0.01	0.12
(3,347)	1:1:A:GLU:HG3	1:2:A:GLU:HA	3	0.12	0.01	0.12
(2,481)	1:24:A:PRO:HD2	1:25:A:SER:H	3	0.12	0.02	0.11
(3,323)	1:24:A:PRO:HD2	1:25:A:SER:H	3	0.12	0.02	0.11
(1,150)	1:9:A:ILE:HD11	1:9:A:ILE:HG13	3	0.12	0.0	0.12
(1,150)	1:9:A:ILE:HD12	1:9:A:ILE:HG13	3	0.12	0.0	0.12
(1,150)	1:9:A:ILE:HD13	1:9:A:ILE:HG13	3	0.12	0.0	0.12
(1,371)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	3	0.11	0.01	0.12
(2,190)	1:13:A:LYS:HE2	1:13:A:LYS:HG3	3	0.11	0.0	0.11
(2,190)	1:13:A:LYS:HE3	1:13:A:LYS:HG3	3	0.11	0.0	0.11
(3,155)	1:13:A:LYS:HE2	1:13:A:LYS:HG3	3	0.11	0.0	0.11
(3,155)	1:13:A:LYS:HE3	1:13:A:LYS:HG3	3	0.11	0.0	0.11
(2,316)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HE3	3	0.11	0.01	0.11
(3,245)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HE3	3	0.11	0.01	0.11
(2,213)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HG2	3	0.11	0.01	0.1
(2,362)	1:24:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	3	0.11	0.0	0.11
(2,471)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HA	3	0.11	0.0	0.11
(2,471)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HA	3	0.11	0.0	0.11
(2,471)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HA	3	0.11	0.0	0.11
(3,177)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HG2	3	0.11	0.01	0.1
(3,315)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HA	3	0.11	0.0	0.11
(3,315)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HA	3	0.11	0.0	0.11
(3,315)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HA	3	0.11	0.0	0.11
(4,96)	1:24:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	3	0.11	0.0	0.11
(2,356)	1:11:A:TRP:H	1:13:A:LYS:HB2	3	0.1	0.0	0.1
(2,356)	1:11:A:TRP:H	1:13:A:LYS:HB3	3	0.1	0.0	0.1
(3,262)	1:11:A:TRP:H	1:13:A:LYS:HB2	3	0.1	0.0	0.1
(3,262)	1:11:A:TRP:H	1:13:A:LYS:HB3	3	0.1	0.0	0.1
(1,2)	1:4:A:ALA:H	1:4:A:ALA:HB1	2	0.73	0.0	0.73
(1,2)	1:4:A:ALA:H	1:4:A:ALA:HB2	2	0.73	0.0	0.73
(1,2)	1:4:A:ALA:H	1:4:A:ALA:HB3	2	0.73	0.0	0.73
(1,289)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	2	0.61	0.02	0.61
(1,398)	1:14:A:ASP:HB2	1:19:A:SER:HB2	2	0.56	0.04	0.56
(2,395)	1:19:A:SER:HB3	1:21:A:ARG:HD2	2	0.55	0.22	0.55
(3,284)	1:19:A:SER:HB3	1:21:A:ARG:HD2	2	0.55	0.22	0.55
(1,450)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HE2	2	0.52	0.01	0.52
(1,450)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HE2	2	0.52	0.01	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(1,450)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HE2	2	0.52	0.01	0.52
(1,450)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HE3	2	0.52	0.01	0.52
(1,450)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HE3	2	0.52	0.01	0.52
(1,450)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HE3	2	0.52	0.01	0.52
(2,287)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	2	0.52	0.03	0.52
(3,228)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	2	0.52	0.03	0.52
(2,414)	1:23:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HB2	2	0.5	0.04	0.5
(4,123)	1:23:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HB2	2	0.5	0.04	0.5
(1,403)	1:19:A:SER:HB3	1:21:A:ARG:HG2	2	0.43	0.33	0.43
(1,233)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HE1	2	0.42	0.1	0.42
(1,233)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HE2	2	0.42	0.1	0.42
(1,311)	1:11:A:TRP:HD1	1:19:A:SER:HB3	2	0.41	0.19	0.41
(2,430)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG13	2	0.38	0.04	0.38
(2,430)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG13	2	0.38	0.04	0.38
(2,430)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG13	2	0.38	0.04	0.38
(4,133)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG13	2	0.38	0.04	0.38
(4,133)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG13	2	0.38	0.04	0.38
(4,133)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG13	2	0.38	0.04	0.38
(1,441)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HB2	2	0.36	0.22	0.36
(1,441)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HB2	2	0.36	0.22	0.36
(1,441)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HB2	2	0.36	0.22	0.36
(1,441)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HB3	2	0.36	0.22	0.36
(1,441)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HB3	2	0.36	0.22	0.36
(1,441)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HB3	2	0.36	0.22	0.36
(1,332)	1:11:A:TRP:HE1	1:22:A:PRO:HG2	2	0.34	0.09	0.34
(1,332)	1:11:A:TRP:HE1	1:22:A:PRO:HG3	2	0.34	0.09	0.34
(2,118)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:H	2	0.3	0.04	0.3
(2,349)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:H	2	0.3	0.15	0.3
(2,349)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:H	2	0.3	0.15	0.3
(2,349)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:H	2	0.3	0.15	0.3
(3,97)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:H	2	0.3	0.04	0.3
(4,89)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:H	2	0.3	0.15	0.3
(4,89)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:H	2	0.3	0.15	0.3
(4,89)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:H	2	0.3	0.15	0.3
(2,239)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HD2	2	0.24	0.12	0.24
(2,239)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HD2	2	0.24	0.12	0.24
(3,195)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HD2	2	0.24	0.12	0.24
(3,195)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HD2	2	0.24	0.12	0.24
(2,267)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD21	2	0.22	0.04	0.22
(2,267)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD22	2	0.22	0.04	0.22
(2,267)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD23	2	0.22	0.04	0.22
(2,267)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD21	2	0.22	0.04	0.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(2,267)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD22	2	0.22	0.04	0.22
(2,267)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD23	2	0.22	0.04	0.22
(4,55)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD21	2	0.22	0.04	0.22
(4,55)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD22	2	0.22	0.04	0.22
(4,55)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD23	2	0.22	0.04	0.22
(4,55)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD21	2	0.22	0.04	0.22
(4,55)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD22	2	0.22	0.04	0.22
(4,55)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD23	2	0.22	0.04	0.22
(1,422)	1:10:A:GLN:HG2	1:13:A:LYS:HD2	2	0.2	0.1	0.2
(1,422)	1:10:A:GLN:HG2	1:13:A:LYS:HD3	2	0.2	0.1	0.2
(1,422)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:HD2	2	0.2	0.1	0.2
(1,422)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:HD3	2	0.2	0.1	0.2
(2,285)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HB3	2	0.18	0.04	0.18
(3,227)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HB3	2	0.18	0.04	0.18
(2,421)	1:1:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	2	0.18	0.0	0.18
(2,421)	1:1:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	2	0.18	0.0	0.18
(2,421)	1:1:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	2	0.18	0.0	0.18
(2,421)	1:1:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB1	2	0.18	0.0	0.18
(2,421)	1:1:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB2	2	0.18	0.0	0.18
(2,421)	1:1:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB3	2	0.18	0.0	0.18
(3,293)	1:1:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	2	0.18	0.0	0.18
(3,293)	1:1:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	2	0.18	0.0	0.18
(3,293)	1:1:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	2	0.18	0.0	0.18
(3,293)	1:1:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB1	2	0.18	0.0	0.18
(3,293)	1:1:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB2	2	0.18	0.0	0.18
(3,293)	1:1:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB3	2	0.18	0.0	0.18
(1,207)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HG2	2	0.17	0.03	0.17
(1,146)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG13	2	0.16	0.01	0.16
(2,157)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG12	2	0.16	0.01	0.16
(3,127)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG12	2	0.16	0.01	0.16
(1,291)	1:11:A:TRP:HZ3	1:23:A:PRO:HG3	2	0.15	0.01	0.15
(1,477)	1:15:A:GLY:HA3	1:16:A:GLY:H	2	0.15	0.02	0.15
(1,43)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HB2	2	0.14	0.02	0.14
(2,132)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HG	2	0.14	0.02	0.14
(3,108)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HG	2	0.14	0.02	0.14
(2,417)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HG	2	0.13	0.02	0.13
(2,417)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HG	2	0.13	0.02	0.13
(2,504)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HD2	2	0.13	0.01	0.13
(2,504)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HD2	2	0.13	0.01	0.13
(2,504)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HD2	2	0.13	0.01	0.13
(3,336)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HD2	2	0.13	0.01	0.13
(3,336)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HD2	2	0.13	0.01	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

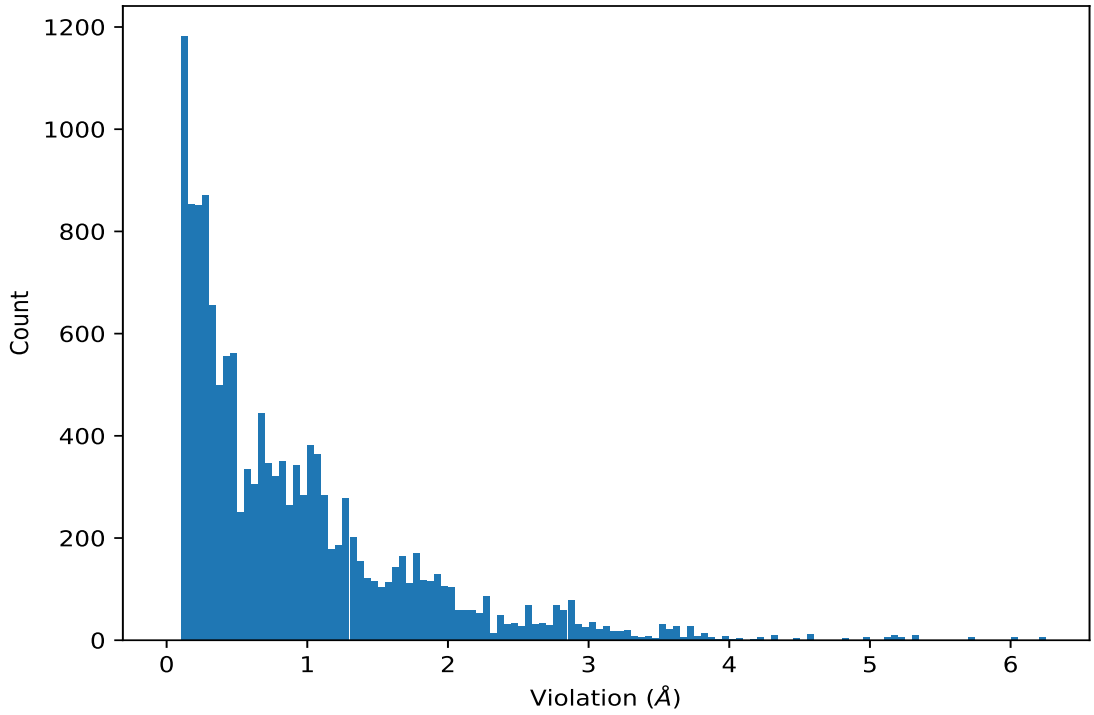
Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(3,336)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HD2	2	0.13	0.01	0.13
(4,125)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HG	2	0.13	0.02	0.13
(4,125)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HG	2	0.13	0.02	0.13
(2,337)	1:12:A:LEU:HA	1:16:A:GLY:H	2	0.12	0.01	0.12
(4,81)	1:12:A:LEU:HA	1:16:A:GLY:H	2	0.12	0.01	0.12
(2,310)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HD3	2	0.12	0.0	0.12
(3,242)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HD3	2	0.12	0.0	0.12
(1,278)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HA	2	0.11	0.0	0.11
(2,319)	1:11:A:TRP:HZ3	1:23:A:PRO:HA	2	0.11	0.0	0.11
(3,246)	1:11:A:TRP:HZ3	1:23:A:PRO:HA	2	0.11	0.0	0.11

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

9.5 All violated distance restraints

9.5.1 Histogram : Distribution of distance violations

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)
(4,152)	1:12:A:LEU:HD21	1:18:A:SER:HB2	7	6.21
(4,152)	1:12:A:LEU:HD22	1:18:A:SER:HB2	7	6.21
(4,152)	1:12:A:LEU:HD23	1:18:A:SER:HB2	7	6.21
(2,465)	1:12:A:LEU:HD21	1:18:A:SER:HB2	7	6.21
(2,465)	1:12:A:LEU:HD22	1:18:A:SER:HB2	7	6.21
(2,465)	1:12:A:LEU:HD23	1:18:A:SER:HB2	7	6.21
(4,152)	1:12:A:LEU:HD21	1:18:A:SER:HB2	3	6.02
(4,152)	1:12:A:LEU:HD22	1:18:A:SER:HB2	3	6.02
(4,152)	1:12:A:LEU:HD23	1:18:A:SER:HB2	3	6.02
(2,465)	1:12:A:LEU:HD21	1:18:A:SER:HB2	3	6.02
(2,465)	1:12:A:LEU:HD22	1:18:A:SER:HB2	3	6.02
(2,465)	1:12:A:LEU:HD23	1:18:A:SER:HB2	3	6.02
(4,152)	1:12:A:LEU:HD21	1:18:A:SER:HB2	8	5.7
(4,152)	1:12:A:LEU:HD22	1:18:A:SER:HB2	8	5.7
(4,152)	1:12:A:LEU:HD23	1:18:A:SER:HB2	8	5.7
(2,465)	1:12:A:LEU:HD21	1:18:A:SER:HB2	8	5.7
(2,465)	1:12:A:LEU:HD22	1:18:A:SER:HB2	8	5.7
(2,465)	1:12:A:LEU:HD23	1:18:A:SER:HB2	8	5.7
(4,152)	1:12:A:LEU:HD21	1:18:A:SER:HB2	9	5.34
(4,152)	1:12:A:LEU:HD22	1:18:A:SER:HB2	9	5.34
(4,152)	1:12:A:LEU:HD23	1:18:A:SER:HB2	9	5.34
(2,465)	1:12:A:LEU:HD21	1:18:A:SER:HB2	9	5.34
(2,465)	1:12:A:LEU:HD22	1:18:A:SER:HB2	9	5.34
(2,465)	1:12:A:LEU:HD23	1:18:A:SER:HB2	9	5.34
(1,465)	1:12:A:LEU:HD21	1:18:A:SER:HB2	7	5.33
(1,465)	1:12:A:LEU:HD22	1:18:A:SER:HB2	7	5.33
(1,465)	1:12:A:LEU:HD23	1:18:A:SER:HB2	7	5.33
(4,152)	1:12:A:LEU:HD21	1:18:A:SER:HB2	5	5.2
(4,152)	1:12:A:LEU:HD22	1:18:A:SER:HB2	5	5.2
(4,152)	1:12:A:LEU:HD23	1:18:A:SER:HB2	5	5.2
(2,465)	1:12:A:LEU:HD21	1:18:A:SER:HB2	5	5.2
(2,465)	1:12:A:LEU:HD22	1:18:A:SER:HB2	5	5.2
(2,465)	1:12:A:LEU:HD23	1:18:A:SER:HB2	5	5.2
(4,152)	1:12:A:LEU:HD21	1:18:A:SER:HB2	4	5.18
(4,152)	1:12:A:LEU:HD22	1:18:A:SER:HB2	4	5.18
(4,152)	1:12:A:LEU:HD23	1:18:A:SER:HB2	4	5.18
(2,465)	1:12:A:LEU:HD21	1:18:A:SER:HB2	4	5.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,465)	1:12:A:LEU:HD22	1:18:A:SER:HB2	4	5.18
(2,465)	1:12:A:LEU:HD23	1:18:A:SER:HB2	4	5.18
(1,465)	1:12:A:LEU:HD21	1:18:A:SER:HB2	3	5.15
(1,465)	1:12:A:LEU:HD22	1:18:A:SER:HB2	3	5.15
(1,465)	1:12:A:LEU:HD23	1:18:A:SER:HB2	3	5.15
(4,152)	1:12:A:LEU:HD21	1:18:A:SER:HB2	2	5.11
(4,152)	1:12:A:LEU:HD22	1:18:A:SER:HB2	2	5.11
(4,152)	1:12:A:LEU:HD23	1:18:A:SER:HB2	2	5.11
(2,465)	1:12:A:LEU:HD21	1:18:A:SER:HB2	2	5.11
(2,465)	1:12:A:LEU:HD22	1:18:A:SER:HB2	2	5.11
(2,465)	1:12:A:LEU:HD23	1:18:A:SER:HB2	2	5.11
(4,152)	1:12:A:LEU:HD21	1:18:A:SER:HB2	10	4.98
(4,152)	1:12:A:LEU:HD22	1:18:A:SER:HB2	10	4.98
(4,152)	1:12:A:LEU:HD23	1:18:A:SER:HB2	10	4.98
(2,465)	1:12:A:LEU:HD21	1:18:A:SER:HB2	10	4.98
(2,465)	1:12:A:LEU:HD22	1:18:A:SER:HB2	10	4.98
(2,465)	1:12:A:LEU:HD23	1:18:A:SER:HB2	10	4.98
(1,465)	1:12:A:LEU:HD21	1:18:A:SER:HB2	8	4.83
(1,465)	1:12:A:LEU:HD22	1:18:A:SER:HB2	8	4.83
(1,465)	1:12:A:LEU:HD23	1:18:A:SER:HB2	8	4.83
(4,152)	1:12:A:LEU:HD21	1:18:A:SER:HB2	1	4.58
(4,152)	1:12:A:LEU:HD22	1:18:A:SER:HB2	1	4.58
(4,152)	1:12:A:LEU:HD23	1:18:A:SER:HB2	1	4.58
(2,465)	1:12:A:LEU:HD21	1:18:A:SER:HB2	1	4.58
(2,465)	1:12:A:LEU:HD22	1:18:A:SER:HB2	1	4.58
(2,465)	1:12:A:LEU:HD23	1:18:A:SER:HB2	1	4.58
(4,152)	1:12:A:LEU:HD21	1:18:A:SER:HB2	6	4.57
(4,152)	1:12:A:LEU:HD22	1:18:A:SER:HB2	6	4.57
(4,152)	1:12:A:LEU:HD23	1:18:A:SER:HB2	6	4.57
(2,465)	1:12:A:LEU:HD21	1:18:A:SER:HB2	6	4.57
(2,465)	1:12:A:LEU:HD22	1:18:A:SER:HB2	6	4.57
(2,465)	1:12:A:LEU:HD23	1:18:A:SER:HB2	6	4.57
(1,465)	1:12:A:LEU:HD21	1:18:A:SER:HB2	9	4.46
(1,465)	1:12:A:LEU:HD22	1:18:A:SER:HB2	9	4.46
(1,465)	1:12:A:LEU:HD23	1:18:A:SER:HB2	9	4.46
(1,465)	1:12:A:LEU:HD21	1:18:A:SER:HB2	5	4.32
(1,465)	1:12:A:LEU:HD22	1:18:A:SER:HB2	5	4.32
(1,465)	1:12:A:LEU:HD23	1:18:A:SER:HB2	5	4.32
(4,116)	1:17:A:PRO:HG2	1:19:A:SER:HB3	9	4.31
(4,116)	1:17:A:PRO:HG3	1:19:A:SER:HB3	9	4.31
(2,405)	1:17:A:PRO:HG2	1:19:A:SER:HB3	9	4.31
(2,405)	1:17:A:PRO:HG3	1:19:A:SER:HB3	9	4.31

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,465)	1:12:A:LEU:HD21	1:18:A:SER:HB2	4	4.3
(1,465)	1:12:A:LEU:HD22	1:18:A:SER:HB2	4	4.3
(1,465)	1:12:A:LEU:HD23	1:18:A:SER:HB2	4	4.3
(1,465)	1:12:A:LEU:HD21	1:18:A:SER:HB2	2	4.23
(1,465)	1:12:A:LEU:HD22	1:18:A:SER:HB2	2	4.23
(1,465)	1:12:A:LEU:HD23	1:18:A:SER:HB2	2	4.23
(4,92)	1:14:A:ASP:H	1:21:A:ARG:HG2	7	4.21
(2,353)	1:14:A:ASP:H	1:21:A:ARG:HG2	7	4.21
(4,92)	1:14:A:ASP:H	1:21:A:ARG:HG2	8	4.19
(2,353)	1:14:A:ASP:H	1:21:A:ARG:HG2	8	4.19
(1,465)	1:12:A:LEU:HD21	1:18:A:SER:HB2	10	4.1
(1,465)	1:12:A:LEU:HD22	1:18:A:SER:HB2	10	4.1
(1,465)	1:12:A:LEU:HD23	1:18:A:SER:HB2	10	4.1
(4,92)	1:14:A:ASP:H	1:21:A:ARG:HG2	3	4.04
(2,353)	1:14:A:ASP:H	1:21:A:ARG:HG2	3	4.04
(4,45)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HE1	5	3.98
(4,45)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HE2	5	3.98
(4,45)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HE1	5	3.98
(4,45)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HE2	5	3.98
(2,241)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HE1	5	3.98
(2,241)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HE2	5	3.98
(2,241)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HE1	5	3.98
(2,241)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HE2	5	3.98
(4,92)	1:14:A:ASP:H	1:21:A:ARG:HG2	1	3.91
(2,353)	1:14:A:ASP:H	1:21:A:ARG:HG2	1	3.91
(4,167)	1:12:A:LEU:HB3	1:13:A:LYS:HG2	7	3.89
(4,44)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HD2	3	3.89
(4,44)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HD2	3	3.89
(2,499)	1:12:A:LEU:HB3	1:13:A:LYS:HG2	7	3.89
(2,238)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HD2	3	3.89
(2,238)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HD2	3	3.89
(4,167)	1:12:A:LEU:HB3	1:13:A:LYS:HG2	3	3.84
(2,499)	1:12:A:LEU:HB3	1:13:A:LYS:HG2	3	3.84
(4,44)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HD2	10	3.82
(4,44)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HD2	10	3.82
(2,238)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HD2	10	3.82
(2,238)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HD2	10	3.82
(4,138)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD21	8	3.81
(4,138)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD22	8	3.81
(4,138)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD23	8	3.81
(4,71)	1:11:A:TRP:HE3	1:23:A:PRO:HD2	1	3.81
(2,439)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD21	8	3.81

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,439)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD22	8	3.81
(2,439)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD23	8	3.81
(2,315)	1:11:A:TRP:HE3	1:23:A:PRO:HD2	1	3.81
(4,92)	1:14:A:ASP:H	1:21:A:ARG:HG2	4	3.8
(2,353)	1:14:A:ASP:H	1:21:A:ARG:HG2	4	3.8
(4,92)	1:14:A:ASP:H	1:21:A:ARG:HG2	2	3.79
(2,353)	1:14:A:ASP:H	1:21:A:ARG:HG2	2	3.79
(4,92)	1:14:A:ASP:H	1:21:A:ARG:HG2	10	3.78
(4,71)	1:11:A:TRP:HE3	1:23:A:PRO:HD2	5	3.78
(2,353)	1:14:A:ASP:H	1:21:A:ARG:HG2	10	3.78
(2,315)	1:11:A:TRP:HE3	1:23:A:PRO:HD2	5	3.78
(4,151)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HA	7	3.74
(4,151)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HA	7	3.74
(4,151)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HA	7	3.74
(2,463)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HA	7	3.74
(2,463)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HA	7	3.74
(2,463)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HA	7	3.74
(4,151)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HA	1	3.73
(4,151)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HA	1	3.73
(4,151)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HA	1	3.73
(2,463)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HA	1	3.73
(2,463)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HA	1	3.73
(2,463)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HA	1	3.73
(4,116)	1:17:A:PRO:HG2	1:19:A:SER:HB3	6	3.72
(4,116)	1:17:A:PRO:HG3	1:19:A:SER:HB3	6	3.72
(4,116)	1:17:A:PRO:HG2	1:19:A:SER:HB3	10	3.72
(4,116)	1:17:A:PRO:HG3	1:19:A:SER:HB3	10	3.72
(4,71)	1:11:A:TRP:HE3	1:23:A:PRO:HD2	9	3.72
(4,71)	1:11:A:TRP:HE3	1:23:A:PRO:HD2	10	3.72
(2,405)	1:17:A:PRO:HG2	1:19:A:SER:HB3	6	3.72
(2,405)	1:17:A:PRO:HG3	1:19:A:SER:HB3	6	3.72
(2,405)	1:17:A:PRO:HG2	1:19:A:SER:HB3	10	3.72
(2,405)	1:17:A:PRO:HG3	1:19:A:SER:HB3	10	3.72
(2,315)	1:11:A:TRP:HE3	1:23:A:PRO:HD2	9	3.72
(2,315)	1:11:A:TRP:HE3	1:23:A:PRO:HD2	10	3.72
(1,465)	1:12:A:LEU:HD21	1:18:A:SER:HB2	1	3.7
(1,465)	1:12:A:LEU:HD22	1:18:A:SER:HB2	1	3.7
(1,465)	1:12:A:LEU:HD23	1:18:A:SER:HB2	1	3.7
(4,167)	1:12:A:LEU:HB3	1:13:A:LYS:HG2	2	3.69
(2,499)	1:12:A:LEU:HB3	1:13:A:LYS:HG2	2	3.69
(1,465)	1:12:A:LEU:HD21	1:18:A:SER:HB2	6	3.69
(1,465)	1:12:A:LEU:HD22	1:18:A:SER:HB2	6	3.69

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,465)	1:12:A:LEU:HD23	1:18:A:SER:HB2	6	3.69
(4,151)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HA	2	3.65
(4,151)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HA	2	3.65
(4,151)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HA	2	3.65
(4,71)	1:11:A:TRP:HE3	1:23:A:PRO:HD2	2	3.65
(2,463)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HA	2	3.65
(2,463)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HA	2	3.65
(2,463)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HA	2	3.65
(2,315)	1:11:A:TRP:HE3	1:23:A:PRO:HD2	2	3.65
(4,151)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HA	4	3.63
(4,151)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HA	4	3.63
(4,151)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HA	4	3.63
(4,101)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB1	4	3.63
(4,101)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB2	4	3.63
(4,101)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB3	4	3.63
(4,71)	1:11:A:TRP:HE3	1:23:A:PRO:HD2	3	3.63
(2,463)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HA	4	3.63
(2,463)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HA	4	3.63
(2,463)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HA	4	3.63
(2,372)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB1	4	3.63
(2,372)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB2	4	3.63
(2,372)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB3	4	3.63
(2,315)	1:11:A:TRP:HE3	1:23:A:PRO:HD2	3	3.63
(4,167)	1:12:A:LEU:HB3	1:13:A:LYS:HG2	1	3.62
(2,499)	1:12:A:LEU:HB3	1:13:A:LYS:HG2	1	3.62
(4,92)	1:14:A:ASP:H	1:21:A:ARG:HG2	6	3.6
(4,92)	1:14:A:ASP:H	1:21:A:ARG:HG2	9	3.6
(2,353)	1:14:A:ASP:H	1:21:A:ARG:HG2	6	3.6
(2,353)	1:14:A:ASP:H	1:21:A:ARG:HG2	9	3.6
(4,151)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HA	5	3.59
(4,151)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HA	5	3.59
(4,151)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HA	5	3.59
(2,463)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HA	5	3.59
(2,463)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HA	5	3.59
(2,463)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HA	5	3.59
(4,167)	1:12:A:LEU:HB3	1:13:A:LYS:HG2	5	3.58
(4,44)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HD2	4	3.58
(4,44)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HD2	4	3.58
(2,499)	1:12:A:LEU:HB3	1:13:A:LYS:HG2	5	3.58
(2,238)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HD2	4	3.58
(2,238)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HD2	4	3.58
(4,151)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HA	3	3.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,151)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HA	3	3.56
(4,151)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HA	3	3.56
(4,44)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HD2	9	3.56
(4,44)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HD2	9	3.56
(2,463)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HA	3	3.56
(2,463)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HA	3	3.56
(2,463)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HA	3	3.56
(2,238)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HD2	9	3.56
(2,238)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HD2	9	3.56
(4,151)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HA	6	3.55
(4,151)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HA	6	3.55
(4,151)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HA	6	3.55
(4,151)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HA	10	3.55
(4,151)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HA	10	3.55
(4,151)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HA	10	3.55
(2,463)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HA	6	3.55
(2,463)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HA	6	3.55
(2,463)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HA	6	3.55
(2,463)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HA	10	3.55
(2,463)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HA	10	3.55
(2,463)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HA	10	3.55
(4,44)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HD2	2	3.52
(4,44)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HD2	2	3.52
(2,238)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HD2	2	3.52
(2,238)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HD2	2	3.52
(4,151)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HA	8	3.51
(4,151)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HA	8	3.51
(4,151)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HA	8	3.51
(4,151)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HA	9	3.51
(4,151)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HA	9	3.51
(4,151)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HA	9	3.51
(4,44)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HD2	5	3.51
(4,44)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HD2	5	3.51
(2,463)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HA	8	3.51
(2,463)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HA	8	3.51
(2,463)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HA	8	3.51
(2,463)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HA	9	3.51
(2,463)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HA	9	3.51
(2,463)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HA	9	3.51
(2,238)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HD2	5	3.51
(2,238)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HD2	5	3.51
(4,44)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HD2	1	3.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,44)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HD2	1	3.47
(2,238)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HD2	1	3.47
(2,238)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HD2	1	3.47
(4,167)	1:12:A:LEU:HB3	1:13:A:LYS:HG2	8	3.44
(2,499)	1:12:A:LEU:HB3	1:13:A:LYS:HG2	8	3.44
(4,167)	1:12:A:LEU:HB3	1:13:A:LYS:HG2	4	3.43
(4,71)	1:11:A:TRP:HE3	1:23:A:PRO:HD2	4	3.43
(2,499)	1:12:A:LEU:HB3	1:13:A:LYS:HG2	4	3.43
(2,315)	1:11:A:TRP:HE3	1:23:A:PRO:HD2	4	3.43
(1,405)	1:17:A:PRO:HG2	1:19:A:SER:HB3	9	3.43
(1,405)	1:17:A:PRO:HG3	1:19:A:SER:HB3	9	3.43
(4,71)	1:11:A:TRP:HE3	1:23:A:PRO:HD2	7	3.37
(2,315)	1:11:A:TRP:HE3	1:23:A:PRO:HD2	7	3.37
(4,44)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HD2	8	3.35
(4,44)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HD2	8	3.35
(2,238)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HD2	8	3.35
(2,238)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HD2	8	3.35
(4,71)	1:11:A:TRP:HE3	1:23:A:PRO:HD2	8	3.34
(2,315)	1:11:A:TRP:HE3	1:23:A:PRO:HD2	8	3.34
(1,353)	1:14:A:ASP:H	1:21:A:ARG:HG2	7	3.34
(4,49)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HG2	3	3.32
(4,49)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HG2	3	3.32
(2,253)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HG2	3	3.32
(2,253)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HG2	3	3.32
(1,353)	1:14:A:ASP:H	1:21:A:ARG:HG2	8	3.32
(4,167)	1:12:A:LEU:HB3	1:13:A:LYS:HG2	6	3.3
(4,127)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HG2	4	3.3
(4,127)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HG2	4	3.3
(2,499)	1:12:A:LEU:HB3	1:13:A:LYS:HG2	6	3.3
(2,419)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HG2	4	3.3
(2,419)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HG2	4	3.3
(4,71)	1:11:A:TRP:HE3	1:23:A:PRO:HD2	6	3.29
(2,315)	1:11:A:TRP:HE3	1:23:A:PRO:HD2	6	3.29
(4,92)	1:14:A:ASP:H	1:21:A:ARG:HG2	5	3.27
(4,49)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HG2	10	3.27
(4,49)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HG2	10	3.27
(2,353)	1:14:A:ASP:H	1:21:A:ARG:HG2	5	3.27
(2,253)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HG2	10	3.27
(2,253)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HG2	10	3.27
(4,138)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD21	2	3.25
(4,138)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD22	2	3.25
(4,138)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD23	2	3.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,439)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD21	2	3.25
(2,439)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD22	2	3.25
(2,439)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD23	2	3.25
(4,45)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HE1	4	3.24
(4,45)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HE2	4	3.24
(4,45)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HE1	4	3.24
(4,45)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HE2	4	3.24
(2,241)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HE1	4	3.24
(2,241)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HE2	4	3.24
(2,241)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HE1	4	3.24
(2,241)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HE2	4	3.24
(4,167)	1:12:A:LEU:HB3	1:13:A:LYS:HG2	10	3.23
(2,499)	1:12:A:LEU:HB3	1:13:A:LYS:HG2	10	3.23
(4,167)	1:12:A:LEU:HB3	1:13:A:LYS:HG2	9	3.22
(4,49)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HG2	4	3.22
(4,49)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HG2	4	3.22
(2,499)	1:12:A:LEU:HB3	1:13:A:LYS:HG2	9	3.22
(2,253)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HG2	4	3.22
(2,253)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HG2	4	3.22
(4,130)	1:7:A:LEU:HG	1:9:A:ILE:HG13	5	3.21
(2,425)	1:7:A:LEU:HG	1:9:A:ILE:HG13	5	3.21
(4,53)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	5	3.18
(4,53)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	5	3.18
(4,53)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	5	3.18
(4,53)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	5	3.18
(4,53)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	5	3.18
(4,53)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	5	3.18
(2,262)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	5	3.18
(2,262)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	5	3.18
(2,262)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	5	3.18
(2,262)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	5	3.18
(2,262)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	5	3.18
(2,262)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	5	3.18
(4,127)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HG2	8	3.17
(4,127)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HG2	8	3.17
(2,419)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HG2	8	3.17
(2,419)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HG2	8	3.17
(1,353)	1:14:A:ASP:H	1:21:A:ARG:HG2	3	3.17
(4,138)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD21	10	3.15
(4,138)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD22	10	3.15
(4,138)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD23	10	3.15
(4,116)	1:17:A:PRO:HG2	1:19:A:SER:HB3	2	3.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,116)	1:17:A:PRO:HG3	1:19:A:SER:HB3	2	3.15
(2,439)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD21	10	3.15
(2,439)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD22	10	3.15
(2,439)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD23	10	3.15
(2,405)	1:17:A:PRO:HG2	1:19:A:SER:HB3	2	3.15
(2,405)	1:17:A:PRO:HG3	1:19:A:SER:HB3	2	3.15
(4,138)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD21	4	3.14
(4,138)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD22	4	3.14
(4,138)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD23	4	3.14
(2,439)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD21	4	3.14
(2,439)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD22	4	3.14
(2,439)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD23	4	3.14
(4,101)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB1	2	3.12
(4,101)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB2	2	3.12
(4,101)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB3	2	3.12
(2,372)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB1	2	3.12
(2,372)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB2	2	3.12
(2,372)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB3	2	3.12
(1,241)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HE1	5	3.11
(1,241)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HE2	5	3.11
(1,241)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HE1	5	3.11
(1,241)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HE2	5	3.11
(4,105)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	8	3.1
(2,382)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	8	3.1
(4,138)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD21	9	3.09
(4,138)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD22	9	3.09
(4,138)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD23	9	3.09
(4,130)	1:7:A:LEU:HG	1:9:A:ILE:HG13	6	3.09
(2,439)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD21	9	3.09
(2,439)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD22	9	3.09
(2,439)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD23	9	3.09
(2,425)	1:7:A:LEU:HG	1:9:A:ILE:HG13	6	3.09
(4,138)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD21	5	3.08
(4,138)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD22	5	3.08
(4,138)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD23	5	3.08
(4,109)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HG12	6	3.08
(2,439)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD21	5	3.08
(2,439)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD22	5	3.08
(2,439)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD23	5	3.08
(2,387)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HG12	6	3.08
(4,127)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HG2	7	3.07
(4,127)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HG2	7	3.07

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,419)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HG2	7	3.07
(2,419)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HG2	7	3.07
(1,499)	1:12:A:LEU:HB3	1:13:A:LYS:HG2	7	3.07
(4,138)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD21	3	3.05
(4,138)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD22	3	3.05
(4,138)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD23	3	3.05
(4,109)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HG12	5	3.05
(4,105)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	3	3.05
(2,439)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD21	3	3.05
(2,439)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD22	3	3.05
(2,439)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD23	3	3.05
(2,387)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HG12	5	3.05
(2,382)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	3	3.05
(4,49)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HG2	5	3.04
(4,49)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HG2	5	3.04
(2,253)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HG2	5	3.04
(2,253)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HG2	5	3.04
(4,129)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	7	3.03
(4,129)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	7	3.03
(4,129)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	7	3.03
(4,45)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HE1	6	3.03
(4,45)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HE2	6	3.03
(4,45)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HE1	6	3.03
(4,45)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HE2	6	3.03
(2,424)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	7	3.03
(2,424)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	7	3.03
(2,424)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	7	3.03
(2,241)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HE1	6	3.03
(2,241)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HE2	6	3.03
(2,241)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HE1	6	3.03
(2,241)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HE2	6	3.03
(1,353)	1:14:A:ASP:H	1:21:A:ARG:HG2	1	3.03
(1,238)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HD2	3	3.03
(1,238)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HD2	3	3.03
(1,499)	1:12:A:LEU:HB3	1:13:A:LYS:HG2	3	3.01
(4,68)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG2	8	3.0
(4,68)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG3	8	3.0
(2,307)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG2	8	3.0
(2,307)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG3	8	3.0
(4,129)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	5	2.99
(4,129)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	5	2.99
(4,129)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	5	2.99

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,49)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HG2	9	2.99
(4,49)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HG2	9	2.99
(2,424)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	5	2.99
(2,424)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	5	2.99
(2,424)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	5	2.99
(2,253)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HG2	9	2.99
(2,253)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HG2	9	2.99
(4,178)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HB	1	2.97
(4,178)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HB	1	2.97
(4,178)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HB	1	2.97
(2,527)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HB	1	2.97
(2,527)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HB	1	2.97
(2,527)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HB	1	2.97
(1,439)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD21	8	2.96
(1,439)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD22	8	2.96
(1,439)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD23	8	2.96
(4,116)	1:17:A:PRO:HG2	1:19:A:SER:HB3	4	2.95
(4,116)	1:17:A:PRO:HG3	1:19:A:SER:HB3	4	2.95
(2,405)	1:17:A:PRO:HG2	1:19:A:SER:HB3	4	2.95
(2,405)	1:17:A:PRO:HG3	1:19:A:SER:HB3	4	2.95
(1,238)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HD2	10	2.95
(1,238)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HD2	10	2.95
(4,118)	1:23:A:PRO:HG2	1:24:A:PRO:HD3	3	2.94
(4,109)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HG12	8	2.94
(2,408)	1:23:A:PRO:HG2	1:24:A:PRO:HD3	3	2.94
(2,387)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HG12	8	2.94
(4,118)	1:23:A:PRO:HG2	1:24:A:PRO:HD3	9	2.93
(4,45)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HE1	7	2.93
(4,45)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HE2	7	2.93
(4,45)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HE1	7	2.93
(4,45)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HE2	7	2.93
(2,408)	1:23:A:PRO:HG2	1:24:A:PRO:HD3	9	2.93
(2,241)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HE1	7	2.93
(2,241)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HE2	7	2.93
(2,241)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HE1	7	2.93
(2,241)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HE2	7	2.93
(1,353)	1:14:A:ASP:H	1:21:A:ARG:HG2	4	2.93
(1,315)	1:11:A:TRP:HE3	1:23:A:PRO:HD2	1	2.93
(4,138)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD21	1	2.92
(4,138)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD22	1	2.92
(4,138)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD23	1	2.92
(4,118)	1:23:A:PRO:HG2	1:24:A:PRO:HD3	2	2.92

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,118)	1:23:A:PRO:HG2	1:24:A:PRO:HD3	10	2.92
(2,439)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD21	1	2.92
(2,439)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD22	1	2.92
(2,439)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD23	1	2.92
(2,408)	1:23:A:PRO:HG2	1:24:A:PRO:HD3	2	2.92
(2,408)	1:23:A:PRO:HG2	1:24:A:PRO:HD3	10	2.92
(1,353)	1:14:A:ASP:H	1:21:A:ARG:HG2	2	2.92
(4,116)	1:17:A:PRO:HG2	1:19:A:SER:HB3	8	2.91
(4,116)	1:17:A:PRO:HG3	1:19:A:SER:HB3	8	2.91
(2,405)	1:17:A:PRO:HG2	1:19:A:SER:HB3	8	2.91
(2,405)	1:17:A:PRO:HG3	1:19:A:SER:HB3	8	2.91
(1,315)	1:11:A:TRP:HE3	1:23:A:PRO:HD2	5	2.91
(4,178)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HB	5	2.9
(4,178)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HB	5	2.9
(4,178)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HB	5	2.9
(4,178)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HB	6	2.9
(4,178)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HB	6	2.9
(4,178)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HB	6	2.9
(4,178)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HB	7	2.9
(4,178)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HB	7	2.9
(4,178)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HB	7	2.9
(4,116)	1:17:A:PRO:HG2	1:19:A:SER:HB3	7	2.9
(4,116)	1:17:A:PRO:HG3	1:19:A:SER:HB3	7	2.9
(2,527)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HB	5	2.9
(2,527)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HB	5	2.9
(2,527)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HB	5	2.9
(2,527)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HB	6	2.9
(2,527)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HB	6	2.9
(2,527)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HB	6	2.9
(2,527)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HB	7	2.9
(2,527)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HB	7	2.9
(2,527)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HB	7	2.9
(2,405)	1:17:A:PRO:HG2	1:19:A:SER:HB3	7	2.9
(2,405)	1:17:A:PRO:HG3	1:19:A:SER:HB3	7	2.9
(1,463)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HA	7	2.9
(1,463)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HA	7	2.9
(1,463)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HA	7	2.9
(1,353)	1:14:A:ASP:H	1:21:A:ARG:HG2	10	2.9
(4,118)	1:23:A:PRO:HG2	1:24:A:PRO:HD3	5	2.89
(4,68)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG2	7	2.89
(4,68)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG3	7	2.89
(2,408)	1:23:A:PRO:HG2	1:24:A:PRO:HD3	5	2.89

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,307)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG2	7	2.89
(2,307)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG3	7	2.89
(4,138)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD21	6	2.88
(4,138)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD22	6	2.88
(4,138)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD23	6	2.88
(4,109)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HG12	2	2.88
(2,439)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD21	6	2.88
(2,439)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD22	6	2.88
(2,439)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD23	6	2.88
(2,387)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HG12	2	2.88
(1,463)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HA	1	2.88
(1,463)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HA	1	2.88
(1,463)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HA	1	2.88
(4,178)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HB	8	2.87
(4,178)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HB	8	2.87
(4,178)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HB	8	2.87
(4,155)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG21	2	2.87
(4,155)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG22	2	2.87
(4,155)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG23	2	2.87
(4,109)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HG12	3	2.87
(4,49)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HG2	2	2.87
(4,49)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HG2	2	2.87
(2,527)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HB	8	2.87
(2,527)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HB	8	2.87
(2,527)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HB	8	2.87
(2,468)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG21	2	2.87
(2,468)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG22	2	2.87
(2,468)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG23	2	2.87
(2,387)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HG12	3	2.87
(2,253)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HG2	2	2.87
(2,253)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HG2	2	2.87
(4,130)	1:7:A:LEU:HG	1:9:A:ILE:HG13	8	2.86
(4,118)	1:23:A:PRO:HG2	1:24:A:PRO:HD3	4	2.86
(4,109)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HG12	4	2.86
(4,109)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HG12	9	2.86
(2,425)	1:7:A:LEU:HG	1:9:A:ILE:HG13	8	2.86
(2,408)	1:23:A:PRO:HG2	1:24:A:PRO:HD3	4	2.86
(2,387)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HG12	4	2.86
(2,387)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HG12	9	2.86
(1,499)	1:12:A:LEU:HB3	1:13:A:LYS:HG2	2	2.86
(4,155)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG21	3	2.85
(4,155)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG22	3	2.85

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,155)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG23	3	2.85
(2,468)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG21	3	2.85
(2,468)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG22	3	2.85
(2,468)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG23	3	2.85
(1,405)	1:17:A:PRO:HG2	1:19:A:SER:HB3	10	2.85
(1,405)	1:17:A:PRO:HG3	1:19:A:SER:HB3	10	2.85
(1,315)	1:11:A:TRP:HE3	1:23:A:PRO:HD2	9	2.85
(4,101)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB1	9	2.84
(4,101)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB2	9	2.84
(4,101)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB3	9	2.84
(2,372)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB1	9	2.84
(2,372)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB2	9	2.84
(2,372)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB3	9	2.84
(1,405)	1:17:A:PRO:HG2	1:19:A:SER:HB3	6	2.84
(1,405)	1:17:A:PRO:HG3	1:19:A:SER:HB3	6	2.84
(1,315)	1:11:A:TRP:HE3	1:23:A:PRO:HD2	10	2.84
(4,178)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HB	2	2.83
(4,178)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HB	2	2.83
(4,178)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HB	2	2.83
(4,155)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG21	10	2.83
(4,155)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG22	10	2.83
(4,155)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG23	10	2.83
(4,109)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HG12	10	2.83
(4,68)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG2	4	2.83
(4,68)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG3	4	2.83
(2,527)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HB	2	2.83
(2,527)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HB	2	2.83
(2,527)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HB	2	2.83
(2,468)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG21	10	2.83
(2,468)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG22	10	2.83
(2,468)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG23	10	2.83
(2,387)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HG12	10	2.83
(2,307)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG2	4	2.83
(2,307)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG3	4	2.83
(4,178)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HB	4	2.82
(4,178)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HB	4	2.82
(4,178)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HB	4	2.82
(4,138)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD21	7	2.82
(4,138)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD22	7	2.82
(4,138)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD23	7	2.82
(4,105)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	7	2.82
(4,53)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	6	2.82

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,53)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	6	2.82
(4,53)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	6	2.82
(4,53)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	6	2.82
(4,53)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	6	2.82
(4,53)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	6	2.82
(2,527)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HB	4	2.82
(2,527)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HB	4	2.82
(2,527)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HB	4	2.82
(2,439)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD21	7	2.82
(2,439)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD22	7	2.82
(2,439)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD23	7	2.82
(2,382)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	7	2.82
(2,262)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	6	2.82
(2,262)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	6	2.82
(2,262)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	6	2.82
(2,262)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	6	2.82
(2,262)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	6	2.82
(2,262)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	6	2.82
(4,178)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HB	3	2.81
(4,178)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HB	3	2.81
(4,178)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HB	3	2.81
(2,527)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HB	3	2.81
(2,527)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HB	3	2.81
(2,527)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HB	3	2.81
(4,178)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HB	9	2.8
(4,178)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HB	9	2.8
(4,178)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HB	9	2.8
(4,130)	1:7:A:LEU:HG	1:9:A:ILE:HG13	7	2.8
(4,118)	1:23:A:PRO:HG2	1:24:A:PRO:HD3	6	2.8
(2,527)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HB	9	2.8
(2,527)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HB	9	2.8
(2,527)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HB	9	2.8
(2,425)	1:7:A:LEU:HG	1:9:A:ILE:HG13	7	2.8
(2,408)	1:23:A:PRO:HG2	1:24:A:PRO:HD3	6	2.8
(1,499)	1:12:A:LEU:HB3	1:13:A:LYS:HG2	1	2.8
(1,463)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HA	2	2.8
(1,463)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HA	2	2.8
(1,463)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HA	2	2.8
(4,155)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG21	9	2.79
(4,155)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG22	9	2.79
(4,155)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG23	9	2.79
(4,116)	1:17:A:PRO:HG2	1:19:A:SER:HB3	3	2.79

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,116)	1:17:A:PRO:HG3	1:19:A:SER:HB3	3	2.79
(4,69)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:HD1	10	2.79
(4,44)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HD2	7	2.79
(4,44)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HD2	7	2.79
(2,468)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG21	9	2.79
(2,468)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG22	9	2.79
(2,468)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG23	9	2.79
(2,405)	1:17:A:PRO:HG2	1:19:A:SER:HB3	3	2.79
(2,405)	1:17:A:PRO:HG3	1:19:A:SER:HB3	3	2.79
(2,312)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:HD1	10	2.79
(2,238)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HD2	7	2.79
(2,238)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HD2	7	2.79
(1,463)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HA	4	2.78
(1,463)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HA	4	2.78
(1,463)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HA	4	2.78
(4,69)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:HD1	3	2.77
(4,49)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HG2	1	2.77
(4,49)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HG2	1	2.77
(2,312)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:HD1	3	2.77
(2,253)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HG2	1	2.77
(2,253)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HG2	1	2.77
(1,315)	1:11:A:TRP:HE3	1:23:A:PRO:HD2	2	2.77
(4,178)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HB	10	2.76
(4,178)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HB	10	2.76
(4,178)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HB	10	2.76
(4,155)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG21	1	2.76
(4,155)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG22	1	2.76
(4,155)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG23	1	2.76
(4,155)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG21	8	2.76
(4,155)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG22	8	2.76
(4,155)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG23	8	2.76
(4,116)	1:17:A:PRO:HG2	1:19:A:SER:HB3	1	2.76
(4,116)	1:17:A:PRO:HG3	1:19:A:SER:HB3	1	2.76
(4,69)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:HD1	4	2.76
(2,527)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HB	10	2.76
(2,527)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HB	10	2.76
(2,527)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HB	10	2.76
(2,468)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG21	1	2.76
(2,468)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG22	1	2.76
(2,468)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG23	1	2.76
(2,468)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG21	8	2.76
(2,468)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG22	8	2.76

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,468)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG23	8	2.76
(2,405)	1:17:A:PRO:HG2	1:19:A:SER:HB3	1	2.76
(2,405)	1:17:A:PRO:HG3	1:19:A:SER:HB3	1	2.76
(2,312)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:HD1	4	2.76
(1,499)	1:12:A:LEU:HB3	1:13:A:LYS:HG2	5	2.75
(1,372)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB1	4	2.75
(1,372)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB2	4	2.75
(1,372)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB3	4	2.75
(1,315)	1:11:A:TRP:HE3	1:23:A:PRO:HD2	3	2.75
(4,129)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	4	2.74
(4,129)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	4	2.74
(4,129)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	4	2.74
(2,424)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	4	2.74
(2,424)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	4	2.74
(2,424)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	4	2.74
(1,463)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HA	5	2.74
(1,463)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HA	5	2.74
(1,463)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HA	5	2.74
(4,127)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HG2	6	2.73
(4,127)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HG2	6	2.73
(2,419)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HG2	6	2.73
(2,419)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HG2	6	2.73
(1,353)	1:14:A:ASP:H	1:21:A:ARG:HG2	6	2.73
(1,353)	1:14:A:ASP:H	1:21:A:ARG:HG2	9	2.73
(4,69)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:HD1	8	2.72
(2,312)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:HD1	8	2.72
(1,463)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HA	3	2.71
(1,463)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HA	3	2.71
(1,463)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HA	3	2.71
(1,463)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HA	6	2.71
(1,463)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HA	6	2.71
(1,463)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HA	6	2.71
(1,238)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HD2	4	2.71
(1,238)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HD2	4	2.71
(1,463)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HA	10	2.7
(1,463)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HA	10	2.7
(1,463)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HA	10	2.7
(1,238)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HD2	9	2.7
(1,238)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HD2	9	2.7
(4,130)	1:7:A:LEU:HG	1:9:A:ILE:HG13	1	2.69
(4,69)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:HD1	9	2.69
(2,425)	1:7:A:LEU:HG	1:9:A:ILE:HG13	1	2.69

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,312)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:HD1	9	2.69
(4,155)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG21	7	2.68
(4,155)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG22	7	2.68
(4,155)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG23	7	2.68
(4,101)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB1	1	2.68
(4,101)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB2	1	2.68
(4,101)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB3	1	2.68
(2,468)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG21	7	2.68
(2,468)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG22	7	2.68
(2,468)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG23	7	2.68
(2,372)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB1	1	2.68
(2,372)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB2	1	2.68
(2,372)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB3	1	2.68
(4,157)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HA	9	2.67
(4,157)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HA	9	2.67
(4,157)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HA	9	2.67
(4,155)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG21	6	2.67
(4,155)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG22	6	2.67
(4,155)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG23	6	2.67
(2,472)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HA	9	2.67
(2,472)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HA	9	2.67
(2,472)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HA	9	2.67
(2,468)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG21	6	2.67
(2,468)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG22	6	2.67
(2,468)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG23	6	2.67
(1,463)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HA	8	2.66
(1,463)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HA	8	2.66
(1,463)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HA	8	2.66
(1,463)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HA	9	2.66
(1,463)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HA	9	2.66
(1,463)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HA	9	2.66
(4,101)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB1	8	2.65
(4,101)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB2	8	2.65
(4,101)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB3	8	2.65
(2,372)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB1	8	2.65
(2,372)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB2	8	2.65
(2,372)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB3	8	2.65
(1,238)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HD2	2	2.65
(1,238)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HD2	2	2.65
(1,238)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HD2	5	2.64
(1,238)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HD2	5	2.64
(4,127)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HG2	5	2.63

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,127)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HG2	5	2.63
(2,419)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HG2	5	2.63
(2,419)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HG2	5	2.63
(4,157)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HA	10	2.62
(4,157)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HA	10	2.62
(4,157)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HA	10	2.62
(4,127)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HG2	9	2.62
(4,127)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HG2	9	2.62
(4,127)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HG2	10	2.62
(4,127)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HG2	10	2.62
(2,472)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HA	10	2.62
(2,472)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HA	10	2.62
(2,472)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HA	10	2.62
(2,419)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HG2	9	2.62
(2,419)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HG2	9	2.62
(2,419)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HG2	10	2.62
(2,419)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HG2	10	2.62
(1,499)	1:12:A:LEU:HB3	1:13:A:LYS:HG2	8	2.61
(1,499)	1:12:A:LEU:HB3	1:13:A:LYS:HG2	4	2.6
(1,238)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HD2	1	2.6
(1,238)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HD2	1	2.6
(4,173)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HA	1	2.59
(4,173)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HA	1	2.59
(4,173)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HA	1	2.59
(4,69)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:HD1	2	2.59
(2,511)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HA	1	2.59
(2,511)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HA	1	2.59
(2,511)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HA	1	2.59
(2,312)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:HD1	2	2.59
(4,157)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HA	3	2.58
(4,157)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HA	3	2.58
(4,157)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HA	3	2.58
(4,155)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG21	5	2.58
(4,155)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG22	5	2.58
(4,155)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG23	5	2.58
(4,137)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG21	5	2.58
(4,137)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG22	5	2.58
(4,137)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG23	5	2.58
(4,45)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HE1	3	2.58
(4,45)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HE2	3	2.58
(4,45)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HE1	3	2.58
(4,45)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HE2	3	2.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,472)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HA	3	2.58
(2,472)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HA	3	2.58
(2,472)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HA	3	2.58
(2,468)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG21	5	2.58
(2,468)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG22	5	2.58
(2,468)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG23	5	2.58
(2,438)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG21	5	2.58
(2,438)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG22	5	2.58
(2,438)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG23	5	2.58
(2,241)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HE1	3	2.58
(2,241)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HE2	3	2.58
(2,241)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HE1	3	2.58
(2,241)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HE2	3	2.58
(4,173)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HA	7	2.57
(4,173)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HA	7	2.57
(4,173)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HA	7	2.57
(4,130)	1:7:A:LEU:HG	1:9:A:ILE:HG13	2	2.57
(4,129)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	2	2.57
(4,129)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	2	2.57
(4,129)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	2	2.57
(4,116)	1:17:A:PRO:HG2	1:19:A:SER:HB3	5	2.57
(4,116)	1:17:A:PRO:HG3	1:19:A:SER:HB3	5	2.57
(4,109)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HG12	7	2.57
(4,45)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HE1	8	2.57
(4,45)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HE2	8	2.57
(4,45)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HE1	8	2.57
(4,45)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HE2	8	2.57
(2,511)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HA	7	2.57
(2,511)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HA	7	2.57
(2,511)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HA	7	2.57
(2,425)	1:7:A:LEU:HG	1:9:A:ILE:HG13	2	2.57
(2,424)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	2	2.57
(2,424)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	2	2.57
(2,424)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	2	2.57
(2,405)	1:17:A:PRO:HG2	1:19:A:SER:HB3	5	2.57
(2,405)	1:17:A:PRO:HG3	1:19:A:SER:HB3	5	2.57
(2,387)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HG12	7	2.57
(2,241)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HE1	8	2.57
(2,241)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HE2	8	2.57
(2,241)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HE1	8	2.57
(2,241)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HE2	8	2.57
(4,129)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	3	2.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,129)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	3	2.56
(4,129)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	3	2.56
(2,424)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	3	2.56
(2,424)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	3	2.56
(2,424)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	3	2.56
(4,127)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HG2	1	2.55
(4,127)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HG2	1	2.55
(2,419)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HG2	1	2.55
(2,419)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HG2	1	2.55
(1,315)	1:11:A:TRP:HE3	1:23:A:PRO:HD2	4	2.55
(4,127)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HG2	3	2.53
(4,127)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HG2	3	2.53
(4,44)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HD2	6	2.53
(4,44)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HD2	6	2.53
(2,419)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HG2	3	2.53
(2,419)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HG2	3	2.53
(2,238)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HD2	6	2.53
(2,238)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HD2	6	2.53
(4,45)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HE1	10	2.51
(4,45)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HE2	10	2.51
(4,45)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HE1	10	2.51
(4,45)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HE2	10	2.51
(2,241)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HE1	10	2.51
(2,241)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HE2	10	2.51
(2,241)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HE1	10	2.51
(2,241)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HE2	10	2.51
(4,130)	1:7:A:LEU:HG	1:9:A:ILE:HG13	3	2.5
(4,127)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HG2	2	2.5
(4,127)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HG2	2	2.5
(2,425)	1:7:A:LEU:HG	1:9:A:ILE:HG13	3	2.5
(2,419)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HG2	2	2.5
(2,419)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HG2	2	2.5
(4,73)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HA	3	2.49
(4,73)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HA	4	2.49
(2,318)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HA	3	2.49
(2,318)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HA	4	2.49
(1,315)	1:11:A:TRP:HE3	1:23:A:PRO:HD2	7	2.49
(4,73)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HA	2	2.48
(2,318)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HA	2	2.48
(1,238)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HD2	8	2.48
(1,238)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HD2	8	2.48
(4,129)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	1	2.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,129)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	1	2.47
(4,129)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	1	2.47
(4,129)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	9	2.47
(4,129)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	9	2.47
(4,129)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	9	2.47
(4,129)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	10	2.47
(4,129)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	10	2.47
(4,129)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	10	2.47
(2,424)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	1	2.47
(2,424)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	1	2.47
(2,424)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	1	2.47
(2,424)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	9	2.47
(2,424)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	9	2.47
(2,424)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	9	2.47
(2,424)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	10	2.47
(2,424)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	10	2.47
(2,424)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	10	2.47
(1,499)	1:12:A:LEU:HB3	1:13:A:LYS:HG2	6	2.47
(4,109)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HG12	1	2.46
(2,387)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HG12	1	2.46
(1,315)	1:11:A:TRP:HE3	1:23:A:PRO:HD2	8	2.46
(1,419)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HG2	4	2.45
(1,419)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HG2	4	2.45
(4,137)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG21	7	2.44
(4,137)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG22	7	2.44
(4,137)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG23	7	2.44
(4,69)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:HD1	6	2.44
(4,69)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:HD1	7	2.44
(2,438)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG21	7	2.44
(2,438)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG22	7	2.44
(2,438)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG23	7	2.44
(2,312)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:HD1	6	2.44
(2,312)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:HD1	7	2.44
(1,253)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HG2	3	2.44
(1,253)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HG2	3	2.44
(4,173)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HA	5	2.43
(4,173)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HA	5	2.43
(4,173)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HA	5	2.43
(2,511)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HA	5	2.43
(2,511)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HA	5	2.43
(2,511)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HA	5	2.43
(1,315)	1:11:A:TRP:HE3	1:23:A:PRO:HD2	6	2.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,129)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	8	2.41
(4,129)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	8	2.41
(4,129)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	8	2.41
(4,101)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB1	3	2.41
(4,101)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB2	3	2.41
(4,101)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB3	3	2.41
(2,424)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	8	2.41
(2,424)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	8	2.41
(2,424)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	8	2.41
(2,372)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB1	3	2.41
(2,372)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB2	3	2.41
(2,372)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB3	3	2.41
(4,128)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	5	2.4
(4,128)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	5	2.4
(4,128)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	5	2.4
(2,420)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	5	2.4
(2,420)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	5	2.4
(2,420)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	5	2.4
(1,499)	1:12:A:LEU:HB3	1:13:A:LYS:HG2	10	2.4
(1,353)	1:14:A:ASP:H	1:21:A:ARG:HG2	5	2.4
(4,173)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HA	6	2.39
(4,173)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HA	6	2.39
(4,173)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HA	6	2.39
(4,73)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HA	1	2.39
(2,511)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HA	6	2.39
(2,511)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HA	6	2.39
(2,511)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HA	6	2.39
(2,318)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HA	1	2.39
(1,499)	1:12:A:LEU:HB3	1:13:A:LYS:HG2	9	2.39
(1,439)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD21	2	2.39
(1,439)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD22	2	2.39
(1,439)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD23	2	2.39
(1,253)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HG2	10	2.39
(1,253)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HG2	10	2.39
(4,118)	1:23:A:PRO:HG2	1:24:A:PRO:HD3	1	2.38
(4,45)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HE1	9	2.38
(4,45)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HE2	9	2.38
(4,45)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HE1	9	2.38
(4,45)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HE2	9	2.38
(2,408)	1:23:A:PRO:HG2	1:24:A:PRO:HD3	1	2.38
(2,241)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HE1	9	2.38
(2,241)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HE2	9	2.38

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,241)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HE1	9	2.38
(2,241)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HE2	9	2.38
(4,101)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB1	10	2.37
(4,101)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB2	10	2.37
(4,101)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB3	10	2.37
(2,372)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB1	10	2.37
(2,372)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB2	10	2.37
(2,372)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB3	10	2.37
(1,241)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HE1	4	2.37
(1,241)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HE2	4	2.37
(1,241)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HE1	4	2.37
(1,241)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HE2	4	2.37
(1,425)	1:7:A:LEU:HG	1:9:A:ILE:HG13	5	2.36
(4,129)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	6	2.35
(4,129)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	6	2.35
(4,129)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	6	2.35
(2,424)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	6	2.35
(2,424)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	6	2.35
(2,424)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	6	2.35
(1,253)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HG2	4	2.34
(1,253)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HG2	4	2.34
(4,130)	1:7:A:LEU:HG	1:9:A:ILE:HG13	9	2.33
(2,425)	1:7:A:LEU:HG	1:9:A:ILE:HG13	9	2.33
(1,419)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HG2	8	2.32
(1,419)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HG2	8	2.32
(4,73)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HA	7	2.31
(2,318)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HA	7	2.31
(1,262)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	5	2.31
(1,262)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	5	2.31
(1,262)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	5	2.31
(1,262)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	5	2.31
(1,262)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	5	2.31
(1,262)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	5	2.31
(4,173)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HA	10	2.3
(4,173)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HA	10	2.3
(4,173)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HA	10	2.3
(4,53)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	7	2.3
(4,53)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	7	2.3
(4,53)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	7	2.3
(4,53)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	7	2.3
(4,53)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	7	2.3
(4,53)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	7	2.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,511)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HA	10	2.3
(2,511)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HA	10	2.3
(2,511)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HA	10	2.3
(2,262)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	7	2.3
(2,262)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	7	2.3
(2,262)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	7	2.3
(2,262)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	7	2.3
(2,262)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	7	2.3
(2,262)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	7	2.3
(1,439)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD21	10	2.3
(1,439)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD22	10	2.3
(1,439)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD23	10	2.3
(4,143)	1:12:A:LEU:HD11	1:14:A:ASP:HB2	5	2.29
(4,143)	1:12:A:LEU:HD12	1:14:A:ASP:HB2	5	2.29
(4,143)	1:12:A:LEU:HD13	1:14:A:ASP:HB2	5	2.29
(4,137)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG21	6	2.29
(4,137)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG22	6	2.29
(4,137)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG23	6	2.29
(2,449)	1:12:A:LEU:HD11	1:14:A:ASP:HB2	5	2.29
(2,449)	1:12:A:LEU:HD12	1:14:A:ASP:HB2	5	2.29
(2,449)	1:12:A:LEU:HD13	1:14:A:ASP:HB2	5	2.29
(2,438)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG21	6	2.29
(2,438)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG22	6	2.29
(2,438)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG23	6	2.29
(1,439)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD21	4	2.29
(1,439)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD22	4	2.29
(1,439)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD23	4	2.29
(4,137)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG21	1	2.28
(4,137)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG22	1	2.28
(4,137)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG23	1	2.28
(4,130)	1:7:A:LEU:HG	1:9:A:ILE:HG13	10	2.28
(4,94)	1:9:A:ILE:HG12	1:11:A:TRP:H	4	2.28
(2,438)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG21	1	2.28
(2,438)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG22	1	2.28
(2,438)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG23	1	2.28
(2,425)	1:7:A:LEU:HG	1:9:A:ILE:HG13	10	2.28
(2,355)	1:9:A:ILE:HG12	1:11:A:TRP:H	4	2.28
(1,405)	1:17:A:PRO:HG2	1:19:A:SER:HB3	2	2.28
(1,405)	1:17:A:PRO:HG3	1:19:A:SER:HB3	2	2.28
(4,173)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HA	9	2.27
(4,173)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HA	9	2.27
(4,173)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HA	9	2.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,156)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	1	2.27
(4,156)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	1	2.27
(4,156)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	1	2.27
(4,156)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	8	2.27
(4,156)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	8	2.27
(4,156)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	8	2.27
(2,511)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HA	9	2.27
(2,511)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HA	9	2.27
(2,511)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HA	9	2.27
(2,470)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	1	2.27
(2,470)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	1	2.27
(2,470)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	1	2.27
(2,470)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	8	2.27
(2,470)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	8	2.27
(2,470)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	8	2.27
(4,173)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HA	2	2.26
(4,173)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HA	2	2.26
(4,173)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HA	2	2.26
(4,156)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	7	2.26
(4,156)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	7	2.26
(4,156)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	7	2.26
(4,94)	1:9:A:ILE:HG12	1:11:A:TRP:H	2	2.26
(4,94)	1:9:A:ILE:HG12	1:11:A:TRP:H	5	2.26
(2,511)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HA	2	2.26
(2,511)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HA	2	2.26
(2,511)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HA	2	2.26
(2,470)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	7	2.26
(2,470)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	7	2.26
(2,470)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	7	2.26
(2,355)	1:9:A:ILE:HG12	1:11:A:TRP:H	2	2.26
(2,355)	1:9:A:ILE:HG12	1:11:A:TRP:H	5	2.26
(1,425)	1:7:A:LEU:HG	1:9:A:ILE:HG13	6	2.25
(1,372)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB1	2	2.25
(1,372)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB2	2	2.25
(1,372)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB3	2	2.25
(4,156)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	9	2.24
(4,156)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	9	2.24
(4,156)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	9	2.24
(4,27)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:HB3	6	2.24
(2,470)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	9	2.24
(2,470)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	9	2.24
(2,470)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	9	2.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,140)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:HB3	6	2.24
(1,439)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD21	9	2.24
(1,439)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD22	9	2.24
(1,439)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD23	9	2.24
(4,130)	1:7:A:LEU:HG	1:9:A:ILE:HG13	4	2.23
(4,69)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:HD1	1	2.23
(2,425)	1:7:A:LEU:HG	1:9:A:ILE:HG13	4	2.23
(2,312)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:HD1	1	2.23
(1,439)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD21	5	2.23
(1,439)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD22	5	2.23
(1,439)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD23	5	2.23
(1,382)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	8	2.23
(4,128)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	7	2.22
(4,128)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	7	2.22
(4,128)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	7	2.22
(4,94)	1:9:A:ILE:HG12	1:11:A:TRP:H	3	2.22
(4,45)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HE1	2	2.22
(4,45)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HE2	2	2.22
(4,45)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HE1	2	2.22
(4,45)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HE2	2	2.22
(4,40)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HA	3	2.22
(4,40)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HA	3	2.22
(2,420)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	7	2.22
(2,420)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	7	2.22
(2,420)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	7	2.22
(2,355)	1:9:A:ILE:HG12	1:11:A:TRP:H	3	2.22
(2,241)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HE1	2	2.22
(2,241)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HE2	2	2.22
(2,241)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HE1	2	2.22
(2,241)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HE2	2	2.22
(2,230)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HA	3	2.22
(2,230)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HA	3	2.22
(1,419)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HG2	7	2.22
(1,419)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HG2	7	2.22
(4,173)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HA	3	2.21
(4,173)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HA	3	2.21
(4,173)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HA	3	2.21
(4,94)	1:9:A:ILE:HG12	1:11:A:TRP:H	6	2.21
(2,511)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HA	3	2.21
(2,511)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HA	3	2.21
(2,511)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HA	3	2.21
(2,355)	1:9:A:ILE:HG12	1:11:A:TRP:H	6	2.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,387)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HG12	6	2.21
(1,439)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD21	3	2.2
(1,439)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD22	3	2.2
(1,439)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD23	3	2.2
(4,157)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HA	2	2.19
(4,157)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HA	2	2.19
(4,157)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HA	2	2.19
(4,154)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG11	6	2.19
(4,154)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG12	6	2.19
(4,154)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG13	6	2.19
(4,126)	1:7:A:LEU:HG	1:10:A:GLN:HG2	1	2.19
(4,126)	1:7:A:LEU:HG	1:10:A:GLN:HG3	1	2.19
(2,472)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HA	2	2.19
(2,472)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HA	2	2.19
(2,472)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HA	2	2.19
(2,467)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG11	6	2.19
(2,467)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG12	6	2.19
(2,467)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG13	6	2.19
(2,418)	1:7:A:LEU:HG	1:10:A:GLN:HG2	1	2.19
(2,418)	1:7:A:LEU:HG	1:10:A:GLN:HG3	1	2.19
(4,126)	1:7:A:LEU:HG	1:10:A:GLN:HG2	5	2.18
(4,126)	1:7:A:LEU:HG	1:10:A:GLN:HG3	5	2.18
(4,69)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:HD1	5	2.18
(2,418)	1:7:A:LEU:HG	1:10:A:GLN:HG2	5	2.18
(2,418)	1:7:A:LEU:HG	1:10:A:GLN:HG3	5	2.18
(2,312)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:HD1	5	2.18
(1,387)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HG12	5	2.18
(1,382)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	3	2.18
(4,173)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HA	4	2.17
(4,173)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HA	4	2.17
(4,173)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HA	4	2.17
(2,511)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HA	4	2.17
(2,511)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HA	4	2.17
(2,511)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HA	4	2.17
(1,253)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HG2	5	2.17
(1,253)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HG2	5	2.17
(4,173)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HA	8	2.16
(4,173)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HA	8	2.16
(4,173)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HA	8	2.16
(4,143)	1:12:A:LEU:HD11	1:14:A:ASP:HB2	6	2.16
(4,143)	1:12:A:LEU:HD12	1:14:A:ASP:HB2	6	2.16
(4,143)	1:12:A:LEU:HD13	1:14:A:ASP:HB2	6	2.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,73)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HA	5	2.16
(2,511)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HA	8	2.16
(2,511)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HA	8	2.16
(2,511)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HA	8	2.16
(2,449)	1:12:A:LEU:HD11	1:14:A:ASP:HB2	6	2.16
(2,449)	1:12:A:LEU:HD12	1:14:A:ASP:HB2	6	2.16
(2,449)	1:12:A:LEU:HD13	1:14:A:ASP:HB2	6	2.16
(2,318)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HA	5	2.16
(4,157)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HA	4	2.15
(4,157)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HA	4	2.15
(4,157)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HA	4	2.15
(4,141)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HB2	4	2.15
(2,472)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HA	4	2.15
(2,472)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HA	4	2.15
(2,472)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HA	4	2.15
(2,444)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HB2	4	2.15
(1,241)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HE1	6	2.15
(1,241)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HE2	6	2.15
(1,241)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HE1	6	2.15
(1,241)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HE2	6	2.15
(4,27)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:HB3	5	2.14
(2,140)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:HB3	5	2.14
(4,49)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HG2	8	2.13
(4,49)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HG2	8	2.13
(4,42)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HA	6	2.13
(4,42)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HA	6	2.13
(2,253)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HG2	8	2.13
(2,253)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HG2	8	2.13
(2,235)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HA	6	2.13
(2,235)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HA	6	2.13
(1,307)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG2	8	2.13
(1,307)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG3	8	2.13
(4,157)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HA	8	2.12
(4,157)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HA	8	2.12
(4,157)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HA	8	2.12
(4,156)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	3	2.12
(4,156)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	3	2.12
(4,156)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	3	2.12
(4,94)	1:9:A:ILE:HG12	1:11:A:TRP:H	8	2.12
(4,73)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HA	8	2.12
(4,45)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HE1	1	2.12
(4,45)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HE2	1	2.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,45)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HE1	1	2.12
(4,45)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HE2	1	2.12
(2,472)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HA	8	2.12
(2,472)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HA	8	2.12
(2,472)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HA	8	2.12
(2,470)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	3	2.12
(2,470)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	3	2.12
(2,470)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	3	2.12
(2,355)	1:9:A:ILE:HG12	1:11:A:TRP:H	8	2.12
(2,318)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HA	8	2.12
(2,241)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HE1	1	2.12
(2,241)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HE2	1	2.12
(2,241)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HE1	1	2.12
(2,241)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HE2	1	2.12
(1,253)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HG2	9	2.12
(1,253)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HG2	9	2.12
(4,122)	1:1:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD2	5	2.11
(4,122)	1:1:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD3	5	2.11
(4,122)	1:1:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD2	5	2.11
(4,122)	1:1:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD2	6	2.11
(4,122)	1:1:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD3	6	2.11
(4,122)	1:1:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD2	6	2.11
(4,68)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG2	3	2.11
(4,68)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG3	3	2.11
(2,413)	1:1:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD2	5	2.11
(2,413)	1:1:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD3	5	2.11
(2,413)	1:1:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD2	5	2.11
(2,413)	1:1:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD2	6	2.11
(2,413)	1:1:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD3	6	2.11
(2,413)	1:1:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD2	6	2.11
(2,307)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG2	3	2.11
(2,307)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG3	3	2.11
(1,527)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HB	1	2.11
(1,527)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HB	1	2.11
(1,527)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HB	1	2.11
(4,141)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HB2	10	2.1
(2,444)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HB2	10	2.1
(4,154)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG11	5	2.09
(4,154)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG12	5	2.09
(4,154)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG13	5	2.09
(4,141)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HB2	9	2.09
(4,126)	1:7:A:LEU:HG	1:10:A:GLN:HG2	6	2.09

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,126)	1:7:A:LEU:HG	1:10:A:GLN:HG3	6	2.09
(4,68)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG2	6	2.09
(4,68)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG3	6	2.09
(2,467)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG11	5	2.09
(2,467)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG12	5	2.09
(2,467)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG13	5	2.09
(2,444)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HB2	9	2.09
(2,418)	1:7:A:LEU:HG	1:10:A:GLN:HG2	6	2.09
(2,418)	1:7:A:LEU:HG	1:10:A:GLN:HG3	6	2.09
(2,307)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG2	6	2.09
(2,307)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG3	6	2.09
(4,94)	1:9:A:ILE:HG12	1:11:A:TRP:H	9	2.08
(4,94)	1:9:A:ILE:HG12	1:11:A:TRP:H	10	2.08
(2,355)	1:9:A:ILE:HG12	1:11:A:TRP:H	9	2.08
(2,355)	1:9:A:ILE:HG12	1:11:A:TRP:H	10	2.08
(1,405)	1:17:A:PRO:HG2	1:19:A:SER:HB3	4	2.08
(1,405)	1:17:A:PRO:HG3	1:19:A:SER:HB3	4	2.08
(4,155)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG21	4	2.07
(4,155)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG22	4	2.07
(4,155)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG23	4	2.07
(4,73)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HA	9	2.07
(4,68)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG2	2	2.07
(4,68)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG3	2	2.07
(2,468)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG21	4	2.07
(2,468)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG22	4	2.07
(2,468)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG23	4	2.07
(2,318)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HA	9	2.07
(2,307)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG2	2	2.07
(2,307)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG3	2	2.07
(1,408)	1:23:A:PRO:HG2	1:24:A:PRO:HD3	3	2.07
(1,387)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HG12	8	2.07
(4,143)	1:12:A:LEU:HD11	1:14:A:ASP:HB2	7	2.06
(4,143)	1:12:A:LEU:HD12	1:14:A:ASP:HB2	7	2.06
(4,143)	1:12:A:LEU:HD13	1:14:A:ASP:HB2	7	2.06
(4,101)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB1	7	2.06
(4,101)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB2	7	2.06
(4,101)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB3	7	2.06
(4,94)	1:9:A:ILE:HG12	1:11:A:TRP:H	7	2.06
(2,449)	1:12:A:LEU:HD11	1:14:A:ASP:HB2	7	2.06
(2,449)	1:12:A:LEU:HD12	1:14:A:ASP:HB2	7	2.06
(2,449)	1:12:A:LEU:HD13	1:14:A:ASP:HB2	7	2.06
(2,372)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB1	7	2.06

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,372)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB2	7	2.06
(2,372)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB3	7	2.06
(2,355)	1:9:A:ILE:HG12	1:11:A:TRP:H	7	2.06
(1,439)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD21	1	2.06
(1,439)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD22	1	2.06
(1,439)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD23	1	2.06
(1,408)	1:23:A:PRO:HG2	1:24:A:PRO:HD3	9	2.06
(1,241)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HE1	7	2.06
(1,241)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HE2	7	2.06
(1,241)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HE1	7	2.06
(1,241)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HE2	7	2.06
(4,157)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HA	5	2.05
(4,157)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HA	5	2.05
(4,157)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HA	5	2.05
(4,95)	1:11:A:TRP:H	1:24:A:PRO:HB3	1	2.05
(2,472)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HA	5	2.05
(2,472)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HA	5	2.05
(2,472)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HA	5	2.05
(2,357)	1:11:A:TRP:H	1:24:A:PRO:HB3	1	2.05
(4,134)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB2	1	2.04
(4,134)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB2	1	2.04
(4,134)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB2	1	2.04
(4,134)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB3	1	2.04
(4,134)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB3	1	2.04
(4,134)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB3	1	2.04
(2,434)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB2	1	2.04
(2,434)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB2	1	2.04
(2,434)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB2	1	2.04
(2,434)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB3	1	2.04
(2,434)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB3	1	2.04
(2,434)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB3	1	2.04
(1,527)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HB	5	2.04
(1,527)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HB	5	2.04
(1,527)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HB	5	2.04
(1,527)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HB	6	2.04
(1,527)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HB	6	2.04
(1,527)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HB	6	2.04
(1,527)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HB	7	2.04
(1,527)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HB	7	2.04
(1,527)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HB	7	2.04
(1,408)	1:23:A:PRO:HG2	1:24:A:PRO:HD3	2	2.04
(1,408)	1:23:A:PRO:HG2	1:24:A:PRO:HD3	10	2.04

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,405)	1:17:A:PRO:HG2	1:19:A:SER:HB3	8	2.04
(1,405)	1:17:A:PRO:HG3	1:19:A:SER:HB3	8	2.04
(4,143)	1:12:A:LEU:HD11	1:14:A:ASP:HB2	8	2.03
(4,143)	1:12:A:LEU:HD12	1:14:A:ASP:HB2	8	2.03
(4,143)	1:12:A:LEU:HD13	1:14:A:ASP:HB2	8	2.03
(4,141)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HB2	3	2.03
(4,134)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB2	7	2.03
(4,134)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB2	7	2.03
(4,134)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB2	7	2.03
(4,134)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB3	7	2.03
(4,134)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB3	7	2.03
(4,134)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB3	7	2.03
(4,122)	1:1:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD2	10	2.03
(4,122)	1:1:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD3	10	2.03
(4,122)	1:1:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD2	10	2.03
(4,97)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:H	5	2.03
(4,97)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:H	5	2.03
(4,97)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:H	5	2.03
(2,449)	1:12:A:LEU:HD11	1:14:A:ASP:HB2	8	2.03
(2,449)	1:12:A:LEU:HD12	1:14:A:ASP:HB2	8	2.03
(2,449)	1:12:A:LEU:HD13	1:14:A:ASP:HB2	8	2.03
(2,444)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HB2	3	2.03
(2,434)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB2	7	2.03
(2,434)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB2	7	2.03
(2,434)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB2	7	2.03
(2,434)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB3	7	2.03
(2,434)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB3	7	2.03
(2,434)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB3	7	2.03
(2,413)	1:1:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD2	10	2.03
(2,413)	1:1:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD3	10	2.03
(2,413)	1:1:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD2	10	2.03
(2,366)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:H	5	2.03
(2,366)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:H	5	2.03
(2,366)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:H	5	2.03
(1,439)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD21	6	2.03
(1,439)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD22	6	2.03
(1,439)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD23	6	2.03
(1,405)	1:17:A:PRO:HG2	1:19:A:SER:HB3	7	2.03
(1,405)	1:17:A:PRO:HG3	1:19:A:SER:HB3	7	2.03
(4,126)	1:7:A:LEU:HG	1:10:A:GLN:HG2	4	2.02
(4,126)	1:7:A:LEU:HG	1:10:A:GLN:HG3	4	2.02
(4,68)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG2	10	2.02

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,68)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG3	10	2.02
(4,40)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HA	4	2.02
(4,40)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HA	4	2.02
(2,418)	1:7:A:LEU:HG	1:10:A:GLN:HG2	4	2.02
(2,418)	1:7:A:LEU:HG	1:10:A:GLN:HG3	4	2.02
(2,307)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG2	10	2.02
(2,307)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG3	10	2.02
(2,230)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HA	4	2.02
(2,230)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HA	4	2.02
(1,408)	1:23:A:PRO:HG2	1:24:A:PRO:HD3	5	2.02
(4,94)	1:9:A:ILE:HG12	1:11:A:TRP:H	1	2.01
(2,355)	1:9:A:ILE:HG12	1:11:A:TRP:H	1	2.01
(1,527)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HB	8	2.01
(1,527)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HB	8	2.01
(1,527)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HB	8	2.01
(1,425)	1:7:A:LEU:HG	1:9:A:ILE:HG13	8	2.01
(1,387)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HG12	2	2.01
(1,307)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG2	7	2.01
(1,307)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG3	7	2.01
(4,126)	1:7:A:LEU:HG	1:10:A:GLN:HG2	8	2.0
(4,126)	1:7:A:LEU:HG	1:10:A:GLN:HG3	8	2.0
(4,73)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HA	10	2.0
(2,418)	1:7:A:LEU:HG	1:10:A:GLN:HG2	8	2.0
(2,418)	1:7:A:LEU:HG	1:10:A:GLN:HG3	8	2.0
(2,318)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HA	10	2.0
(1,468)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG21	2	2.0
(1,468)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG22	2	2.0
(1,468)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG23	2	2.0
(1,387)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HG12	3	2.0
(1,253)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HG2	2	2.0
(1,253)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HG2	2	2.0
(4,73)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HA	6	1.99
(4,68)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG2	9	1.99
(4,68)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG3	9	1.99
(4,53)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	1	1.99
(4,53)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	1	1.99
(4,53)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	1	1.99
(4,53)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	1	1.99
(4,53)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	1	1.99
(4,53)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	1	1.99
(4,53)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	4	1.99
(4,53)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	4	1.99

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,53)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	4	1.99
(4,53)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	4	1.99
(4,53)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	4	1.99
(4,53)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	4	1.99
(4,27)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:HB3	7	1.99
(2,318)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HA	6	1.99
(2,307)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG2	9	1.99
(2,307)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG3	9	1.99
(2,262)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	1	1.99
(2,262)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	1	1.99
(2,262)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	1	1.99
(2,262)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	1	1.99
(2,262)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	1	1.99
(2,262)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	1	1.99
(2,262)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	4	1.99
(2,262)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	4	1.99
(2,262)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	4	1.99
(2,262)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	4	1.99
(2,262)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	4	1.99
(2,262)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	4	1.99
(2,140)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:HB3	7	1.99
(1,408)	1:23:A:PRO:HG2	1:24:A:PRO:HD3	4	1.99
(4,154)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG11	1	1.98
(4,154)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG12	1	1.98
(4,154)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG13	1	1.98
(4,143)	1:12:A:LEU:HD11	1:14:A:ASP:HB2	1	1.98
(4,143)	1:12:A:LEU:HD12	1:14:A:ASP:HB2	1	1.98
(4,143)	1:12:A:LEU:HD13	1:14:A:ASP:HB2	1	1.98
(4,46)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HD1	5	1.98
(4,46)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HD2	5	1.98
(4,46)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HD1	5	1.98
(4,46)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HD2	5	1.98
(3,301)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG2	2	1.98
(3,301)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG2	2	1.98
(3,301)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG2	2	1.98
(3,301)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG3	2	1.98
(3,301)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG3	2	1.98
(3,301)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG3	2	1.98
(2,467)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG11	1	1.98
(2,467)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG12	1	1.98
(2,467)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG13	1	1.98
(2,449)	1:12:A:LEU:HD11	1:14:A:ASP:HB2	1	1.98

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,449)	1:12:A:LEU:HD12	1:14:A:ASP:HB2	1	1.98
(2,449)	1:12:A:LEU:HD13	1:14:A:ASP:HB2	1	1.98
(2,437)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG2	2	1.98
(2,437)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG2	2	1.98
(2,437)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG2	2	1.98
(2,437)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG3	2	1.98
(2,437)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG3	2	1.98
(2,437)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG3	2	1.98
(2,242)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HD1	5	1.98
(2,242)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HD2	5	1.98
(2,242)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HD1	5	1.98
(2,242)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HD2	5	1.98
(1,468)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG21	3	1.98
(1,468)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG22	3	1.98
(1,468)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG23	3	1.98
(1,387)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HG12	4	1.98
(1,387)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HG12	9	1.98
(4,141)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HB2	1	1.97
(4,95)	1:11:A:TRP:H	1:24:A:PRO:HB3	7	1.97
(4,68)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG2	1	1.97
(4,68)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG3	1	1.97
(2,444)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HB2	1	1.97
(2,357)	1:11:A:TRP:H	1:24:A:PRO:HB3	7	1.97
(2,307)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG2	1	1.97
(2,307)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG3	1	1.97
(1,527)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HB	2	1.97
(1,527)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HB	2	1.97
(1,527)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HB	2	1.97
(1,439)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD21	7	1.97
(1,439)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD22	7	1.97
(1,439)	1:5:A:VAL:HB	1:7:A:LEU:HD23	7	1.97
(1,372)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB1	9	1.97
(1,372)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB2	9	1.97
(1,372)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB3	9	1.97
(3,301)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG2	3	1.96
(3,301)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG2	3	1.96
(3,301)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG2	3	1.96
(3,301)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG3	3	1.96
(3,301)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG3	3	1.96
(3,301)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG3	3	1.96
(2,437)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG2	3	1.96
(2,437)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG2	3	1.96

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,437)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG2	3	1.96
(2,437)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG3	3	1.96
(2,437)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG3	3	1.96
(2,437)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG3	3	1.96
(1,527)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HB	4	1.96
(1,527)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HB	4	1.96
(1,527)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HB	4	1.96
(1,468)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG21	10	1.96
(1,468)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG22	10	1.96
(1,468)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG23	10	1.96
(1,387)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HG12	10	1.96
(4,169)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	9	1.95
(4,169)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	9	1.95
(4,169)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	9	1.95
(4,154)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG11	7	1.95
(4,154)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG12	7	1.95
(4,154)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG13	7	1.95
(4,40)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HA	2	1.95
(4,40)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HA	2	1.95
(4,40)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HA	8	1.95
(4,40)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HA	8	1.95
(2,506)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	9	1.95
(2,506)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	9	1.95
(2,506)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	9	1.95
(2,467)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG11	7	1.95
(2,467)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG12	7	1.95
(2,467)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG13	7	1.95
(2,230)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HA	2	1.95
(2,230)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HA	2	1.95
(2,230)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HA	8	1.95
(2,230)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HA	8	1.95
(1,527)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HB	3	1.95
(1,527)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HB	3	1.95
(1,527)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HB	3	1.95
(1,425)	1:7:A:LEU:HG	1:9:A:ILE:HG13	7	1.95
(1,382)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	7	1.95
(1,307)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG2	4	1.95
(1,307)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG3	4	1.95
(1,262)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	6	1.95
(1,262)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	6	1.95
(1,262)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	6	1.95
(1,262)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	6	1.95

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,262)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	6	1.95
(1,262)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	6	1.95
(4,162)	1:24:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:HA	5	1.94
(4,126)	1:7:A:LEU:HG	1:10:A:GLN:HG2	9	1.94
(4,126)	1:7:A:LEU:HG	1:10:A:GLN:HG3	9	1.94
(4,84)	1:10:A:GLN:HB2	1:13:A:LYS:H	10	1.94
(4,40)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HA	10	1.94
(4,40)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HA	10	1.94
(4,28)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:HB2	4	1.94
(3,291)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HG3	10	1.94
(2,486)	1:24:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:HA	5	1.94
(2,418)	1:7:A:LEU:HG	1:10:A:GLN:HG2	9	1.94
(2,418)	1:7:A:LEU:HG	1:10:A:GLN:HG3	9	1.94
(2,411)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HG3	10	1.94
(2,341)	1:10:A:GLN:HB2	1:13:A:LYS:H	10	1.94
(2,230)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HA	10	1.94
(2,230)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HA	10	1.94
(2,141)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:HB2	4	1.94
(1,527)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HB	9	1.94
(1,527)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HB	9	1.94
(1,527)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HB	9	1.94
(4,126)	1:7:A:LEU:HG	1:10:A:GLN:HG2	2	1.93
(4,126)	1:7:A:LEU:HG	1:10:A:GLN:HG3	2	1.93
(4,27)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:HB3	1	1.93
(3,301)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG2	4	1.93
(3,301)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG2	4	1.93
(3,301)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG2	4	1.93
(3,301)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG3	4	1.93
(3,301)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG3	4	1.93
(3,301)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG3	4	1.93
(3,301)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG2	6	1.93
(3,301)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG2	6	1.93
(3,301)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG2	6	1.93
(3,301)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG3	6	1.93
(3,301)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG3	6	1.93
(3,301)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG3	6	1.93
(2,437)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG2	4	1.93
(2,437)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG2	4	1.93
(2,437)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG2	4	1.93
(2,437)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG3	4	1.93
(2,437)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG3	4	1.93
(2,437)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG3	4	1.93

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,437)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG2	6	1.93
(2,437)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG2	6	1.93
(2,437)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG2	6	1.93
(2,437)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG3	6	1.93
(2,437)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG3	6	1.93
(2,437)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG3	6	1.93
(2,418)	1:7:A:LEU:HG	1:10:A:GLN:HG2	2	1.93
(2,418)	1:7:A:LEU:HG	1:10:A:GLN:HG3	2	1.93
(2,140)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:HB3	1	1.93
(1,408)	1:23:A:PRO:HG2	1:24:A:PRO:HD3	6	1.93
(4,169)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	3	1.92
(4,169)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	3	1.92
(4,169)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	3	1.92
(4,68)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG2	5	1.92
(4,68)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG3	5	1.92
(3,301)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG2	1	1.92
(3,301)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG2	1	1.92
(3,301)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG2	1	1.92
(3,301)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG3	1	1.92
(3,301)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG3	1	1.92
(3,301)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG3	1	1.92
(2,506)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	3	1.92
(2,506)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	3	1.92
(2,506)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	3	1.92
(2,437)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG2	1	1.92
(2,437)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG2	1	1.92
(2,437)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG2	1	1.92
(2,437)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG3	1	1.92
(2,437)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG3	1	1.92
(2,437)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG3	1	1.92
(2,307)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG2	5	1.92
(2,307)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG3	5	1.92
(1,468)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG21	9	1.92
(1,468)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG22	9	1.92
(1,468)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG23	9	1.92
(1,312)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:HD1	10	1.92
(1,238)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HD2	7	1.92
(1,238)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HD2	7	1.92
(4,126)	1:7:A:LEU:HG	1:10:A:GLN:HG2	10	1.91
(4,126)	1:7:A:LEU:HG	1:10:A:GLN:HG3	10	1.91
(3,301)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG2	5	1.91
(3,301)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG2	5	1.91

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,301)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG2	5	1.91
(3,301)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG3	5	1.91
(3,301)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG3	5	1.91
(3,301)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG3	5	1.91
(2,437)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG2	5	1.91
(2,437)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG2	5	1.91
(2,437)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG2	5	1.91
(2,437)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG3	5	1.91
(2,437)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG3	5	1.91
(2,437)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG3	5	1.91
(2,418)	1:7:A:LEU:HG	1:10:A:GLN:HG2	10	1.91
(2,418)	1:7:A:LEU:HG	1:10:A:GLN:HG3	10	1.91
(1,405)	1:17:A:PRO:HG2	1:19:A:SER:HB3	3	1.91
(1,405)	1:17:A:PRO:HG3	1:19:A:SER:HB3	3	1.91
(4,169)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	10	1.9
(4,169)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	10	1.9
(4,169)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	10	1.9
(4,141)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HB2	5	1.9
(4,112)	1:23:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HD3	3	1.9
(4,88)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD11	3	1.9
(4,88)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD12	3	1.9
(4,88)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD13	3	1.9
(4,40)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HA	5	1.9
(4,40)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HA	5	1.9
(2,506)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	10	1.9
(2,506)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	10	1.9
(2,506)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	10	1.9
(2,444)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HB2	5	1.9
(2,396)	1:23:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HD3	3	1.9
(2,347)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD11	3	1.9
(2,347)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD12	3	1.9
(2,347)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD13	3	1.9
(2,230)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HA	5	1.9
(2,230)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HA	5	1.9
(1,527)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HB	10	1.9
(1,527)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HB	10	1.9
(1,527)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HB	10	1.9
(4,126)	1:7:A:LEU:HG	1:10:A:GLN:HG2	3	1.89
(4,126)	1:7:A:LEU:HG	1:10:A:GLN:HG3	3	1.89
(4,88)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD11	10	1.89
(4,88)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD12	10	1.89
(4,88)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD13	10	1.89

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,49)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HG2	6	1.89
(4,49)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HG2	6	1.89
(2,418)	1:7:A:LEU:HG	1:10:A:GLN:HG2	3	1.89
(2,418)	1:7:A:LEU:HG	1:10:A:GLN:HG3	3	1.89
(2,347)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD11	10	1.89
(2,347)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD12	10	1.89
(2,347)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD13	10	1.89
(2,253)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HG2	6	1.89
(2,253)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HG2	6	1.89
(1,468)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG21	1	1.89
(1,468)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG22	1	1.89
(1,468)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG23	1	1.89
(1,468)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG21	8	1.89
(1,468)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG22	8	1.89
(1,468)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG23	8	1.89
(1,405)	1:17:A:PRO:HG2	1:19:A:SER:HB3	1	1.89
(1,405)	1:17:A:PRO:HG3	1:19:A:SER:HB3	1	1.89
(1,312)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:HD1	3	1.89
(1,253)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HG2	1	1.89
(1,253)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HG2	1	1.89
(4,169)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	4	1.88
(4,169)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	4	1.88
(4,169)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	4	1.88
(4,88)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD11	2	1.88
(4,88)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD12	2	1.88
(4,88)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD13	2	1.88
(4,53)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	2	1.88
(4,53)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	2	1.88
(4,53)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	2	1.88
(4,53)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	2	1.88
(4,53)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	2	1.88
(4,53)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	2	1.88
(2,506)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	4	1.88
(2,506)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	4	1.88
(2,506)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	4	1.88
(2,347)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD11	2	1.88
(2,347)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD12	2	1.88
(2,347)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD13	2	1.88
(2,262)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	2	1.88
(2,262)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	2	1.88
(2,262)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	2	1.88
(2,262)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	2	1.88

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,262)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	2	1.88
(2,262)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	2	1.88
(1,419)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HG2	6	1.88
(1,419)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HG2	6	1.88
(1,312)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:HD1	4	1.88
(4,156)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	5	1.87
(4,156)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	5	1.87
(4,156)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	5	1.87
(2,470)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	5	1.87
(2,470)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	5	1.87
(2,470)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	5	1.87
(4,169)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	8	1.86
(4,169)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	8	1.86
(4,169)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	8	1.86
(4,118)	1:23:A:PRO:HG2	1:24:A:PRO:HD3	8	1.86
(4,88)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD11	9	1.86
(4,88)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD12	9	1.86
(4,88)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD13	9	1.86
(2,506)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	8	1.86
(2,506)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	8	1.86
(2,506)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	8	1.86
(2,408)	1:23:A:PRO:HG2	1:24:A:PRO:HD3	8	1.86
(2,347)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD11	9	1.86
(2,347)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD12	9	1.86
(2,347)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD13	9	1.86
(4,126)	1:7:A:LEU:HG	1:10:A:GLN:HG2	7	1.85
(4,126)	1:7:A:LEU:HG	1:10:A:GLN:HG3	7	1.85
(4,83)	1:10:A:GLN:HG2	1:13:A:LYS:H	10	1.85
(4,83)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:H	10	1.85
(4,54)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE1	6	1.85
(4,54)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE2	6	1.85
(4,54)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE1	6	1.85
(4,54)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE2	6	1.85
(4,54)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE1	6	1.85
(4,54)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE2	6	1.85
(2,418)	1:7:A:LEU:HG	1:10:A:GLN:HG2	7	1.85
(2,418)	1:7:A:LEU:HG	1:10:A:GLN:HG3	7	1.85
(2,340)	1:10:A:GLN:HG2	1:13:A:LYS:H	10	1.85
(2,340)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:H	10	1.85
(2,263)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE1	6	1.85
(2,263)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE2	6	1.85
(2,263)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE1	6	1.85

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,263)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE2	6	1.85
(2,263)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE1	6	1.85
(2,263)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE2	6	1.85
(4,154)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG11	3	1.84
(4,154)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG12	3	1.84
(4,154)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG13	3	1.84
(4,134)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB2	3	1.84
(4,134)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB2	3	1.84
(4,134)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB2	3	1.84
(4,134)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB3	3	1.84
(4,134)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB3	3	1.84
(4,134)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB3	3	1.84
(4,134)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB2	8	1.84
(4,134)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB2	8	1.84
(4,134)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB2	8	1.84
(4,134)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB3	8	1.84
(4,134)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB3	8	1.84
(4,134)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB3	8	1.84
(4,88)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD11	1	1.84
(4,88)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD12	1	1.84
(4,88)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD13	1	1.84
(4,84)	1:10:A:GLN:HB2	1:13:A:LYS:H	9	1.84
(4,28)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:HB2	9	1.84
(2,467)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG11	3	1.84
(2,467)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG12	3	1.84
(2,467)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG13	3	1.84
(2,434)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB2	3	1.84
(2,434)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB2	3	1.84
(2,434)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB2	3	1.84
(2,434)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB3	3	1.84
(2,434)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB3	3	1.84
(2,434)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB3	3	1.84
(2,434)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB2	8	1.84
(2,434)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB2	8	1.84
(2,434)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB2	8	1.84
(2,434)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB3	8	1.84
(2,434)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB3	8	1.84
(2,434)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB3	8	1.84
(2,347)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD11	1	1.84
(2,347)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD12	1	1.84
(2,347)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD13	1	1.84
(2,341)	1:10:A:GLN:HB2	1:13:A:LYS:H	9	1.84

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,141)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:HB2	9	1.84
(1,425)	1:7:A:LEU:HG	1:9:A:ILE:HG13	1	1.84
(1,312)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:HD1	8	1.84
(4,134)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB2	5	1.83
(4,134)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB2	5	1.83
(4,134)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB2	5	1.83
(4,134)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB3	5	1.83
(4,134)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB3	5	1.83
(4,134)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB3	5	1.83
(4,28)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:HB2	6	1.83
(3,301)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG2	7	1.83
(3,301)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG2	7	1.83
(3,301)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG2	7	1.83
(3,301)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG3	7	1.83
(3,301)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG3	7	1.83
(3,301)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG3	7	1.83
(2,437)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG2	7	1.83
(2,437)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG2	7	1.83
(2,437)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG2	7	1.83
(2,437)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG3	7	1.83
(2,437)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG3	7	1.83
(2,437)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG3	7	1.83
(2,434)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB2	5	1.83
(2,434)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB2	5	1.83
(2,434)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB2	5	1.83
(2,434)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB3	5	1.83
(2,434)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB3	5	1.83
(2,434)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB3	5	1.83
(2,141)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:HB2	6	1.83
(4,154)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG11	10	1.82
(4,154)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG12	10	1.82
(4,154)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG13	10	1.82
(4,95)	1:11:A:TRP:H	1:24:A:PRO:HB3	5	1.82
(4,88)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD11	6	1.82
(4,88)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD12	6	1.82
(4,88)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD13	6	1.82
(4,88)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD11	7	1.82
(4,88)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD12	7	1.82
(4,88)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD13	7	1.82
(4,40)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HA	1	1.82
(4,40)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HA	1	1.82
(2,467)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG11	10	1.82

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,467)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG12	10	1.82
(2,467)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG13	10	1.82
(2,357)	1:11:A:TRP:H	1:24:A:PRO:HB3	5	1.82
(2,347)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD11	6	1.82
(2,347)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD12	6	1.82
(2,347)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD13	6	1.82
(2,347)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD11	7	1.82
(2,347)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD12	7	1.82
(2,347)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD13	7	1.82
(2,230)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HA	1	1.82
(2,230)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HA	1	1.82
(1,312)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:HD1	9	1.82
(4,28)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:HB2	10	1.81
(2,141)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:HB2	10	1.81
(1,472)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HA	9	1.81
(1,472)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HA	9	1.81
(1,472)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HA	9	1.81
(1,468)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG21	7	1.81
(1,468)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG22	7	1.81
(1,468)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG23	7	1.81
(4,157)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HA	7	1.8
(4,157)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HA	7	1.8
(4,157)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HA	7	1.8
(4,141)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HB2	2	1.8
(4,124)	1:7:A:LEU:HB2	1:8:A:TYR:HB3	6	1.8
(2,472)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HA	7	1.8
(2,472)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HA	7	1.8
(2,472)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HA	7	1.8
(2,444)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HB2	2	1.8
(2,415)	1:7:A:LEU:HB2	1:8:A:TYR:HB3	6	1.8
(1,468)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG21	6	1.8
(1,468)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG22	6	1.8
(1,468)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG23	6	1.8
(1,372)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB1	1	1.8
(1,372)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB2	1	1.8
(1,372)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB3	1	1.8
(4,180)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HB3	9	1.79
(4,143)	1:12:A:LEU:HD11	1:14:A:ASP:HB2	3	1.79
(4,143)	1:12:A:LEU:HD12	1:14:A:ASP:HB2	3	1.79
(4,143)	1:12:A:LEU:HD13	1:14:A:ASP:HB2	3	1.79
(4,112)	1:23:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HD3	2	1.79
(4,63)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD21	4	1.79

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,63)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD22	4	1.79
(4,63)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD23	4	1.79
(4,53)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	3	1.79
(4,53)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	3	1.79
(4,53)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	3	1.79
(4,53)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	3	1.79
(4,53)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	3	1.79
(4,53)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	3	1.79
(3,291)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HG3	9	1.79
(2,529)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HB3	9	1.79
(2,449)	1:12:A:LEU:HD11	1:14:A:ASP:HB2	3	1.79
(2,449)	1:12:A:LEU:HD12	1:14:A:ASP:HB2	3	1.79
(2,449)	1:12:A:LEU:HD13	1:14:A:ASP:HB2	3	1.79
(2,411)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HG3	9	1.79
(2,396)	1:23:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HD3	2	1.79
(2,294)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD21	4	1.79
(2,294)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD22	4	1.79
(2,294)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD23	4	1.79
(2,262)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	3	1.79
(2,262)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	3	1.79
(2,262)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	3	1.79
(2,262)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	3	1.79
(2,262)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	3	1.79
(2,262)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	3	1.79
(4,180)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HB3	10	1.78
(4,141)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HB2	8	1.78
(4,112)	1:23:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HD3	9	1.78
(4,95)	1:11:A:TRP:H	1:24:A:PRO:HB3	3	1.78
(4,95)	1:11:A:TRP:H	1:24:A:PRO:HB3	9	1.78
(4,63)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD21	1	1.78
(4,63)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD22	1	1.78
(4,63)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD23	1	1.78
(4,63)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD21	2	1.78
(4,63)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD22	2	1.78
(4,63)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD23	2	1.78
(3,309)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA3	6	1.78
(3,309)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA3	6	1.78
(3,309)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA3	6	1.78
(3,204)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	3	1.78
(3,204)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	3	1.78
(2,529)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HB3	10	1.78
(2,456)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA3	6	1.78

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,456)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA3	6	1.78
(2,456)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA3	6	1.78
(2,444)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HB2	8	1.78
(2,396)	1:23:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HD3	9	1.78
(2,357)	1:11:A:TRP:H	1:24:A:PRO:HB3	3	1.78
(2,357)	1:11:A:TRP:H	1:24:A:PRO:HB3	9	1.78
(2,294)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD21	1	1.78
(2,294)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD22	1	1.78
(2,294)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD23	1	1.78
(2,294)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD21	2	1.78
(2,294)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD22	2	1.78
(2,294)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD23	2	1.78
(2,252)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	3	1.78
(2,252)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	3	1.78
(1,419)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HG2	5	1.78
(1,419)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HG2	5	1.78
(4,157)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HA	1	1.77
(4,157)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HA	1	1.77
(4,157)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HA	1	1.77
(4,154)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG11	2	1.77
(4,154)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG12	2	1.77
(4,154)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG13	2	1.77
(4,134)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB2	6	1.77
(4,134)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB2	6	1.77
(4,134)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB2	6	1.77
(4,134)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB3	6	1.77
(4,134)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB3	6	1.77
(4,134)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB3	6	1.77
(4,40)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HA	9	1.77
(4,40)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HA	9	1.77
(2,472)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HA	1	1.77
(2,472)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HA	1	1.77
(2,472)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HA	1	1.77
(2,467)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG11	2	1.77
(2,467)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG12	2	1.77
(2,467)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG13	2	1.77
(2,434)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB2	6	1.77
(2,434)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB2	6	1.77
(2,434)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB2	6	1.77
(2,434)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB3	6	1.77
(2,434)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB3	6	1.77
(2,434)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB3	6	1.77

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,230)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HA	9	1.77
(2,230)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HA	9	1.77
(1,419)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HG2	9	1.77
(1,419)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HG2	9	1.77
(1,419)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HG2	10	1.77
(1,419)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HG2	10	1.77
(1,372)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB1	8	1.77
(1,372)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB2	8	1.77
(1,372)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB3	8	1.77
(4,169)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	2	1.76
(4,169)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	2	1.76
(4,169)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	2	1.76
(4,112)	1:23:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HD3	10	1.76
(4,88)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD11	5	1.76
(4,88)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD12	5	1.76
(4,88)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD13	5	1.76
(4,63)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD21	7	1.76
(4,63)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD22	7	1.76
(4,63)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD23	7	1.76
(4,54)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE1	5	1.76
(4,54)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE2	5	1.76
(4,54)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE1	5	1.76
(4,54)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE2	5	1.76
(4,54)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE1	5	1.76
(4,54)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE2	5	1.76
(2,506)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	2	1.76
(2,506)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	2	1.76
(2,506)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	2	1.76
(2,396)	1:23:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HD3	10	1.76
(2,347)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD11	5	1.76
(2,347)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD12	5	1.76
(2,347)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD13	5	1.76
(2,294)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD21	7	1.76
(2,294)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD22	7	1.76
(2,294)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD23	7	1.76
(2,263)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE1	5	1.76
(2,263)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE2	5	1.76
(2,263)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE1	5	1.76
(2,263)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE2	5	1.76
(2,263)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE1	5	1.76
(2,263)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE2	5	1.76
(1,472)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HA	10	1.76

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,472)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HA	10	1.76
(1,472)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HA	10	1.76
(4,154)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG11	9	1.75
(4,154)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG12	9	1.75
(4,154)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG13	9	1.75
(4,134)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB2	2	1.75
(4,134)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB2	2	1.75
(4,134)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB2	2	1.75
(4,134)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB3	2	1.75
(4,134)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB3	2	1.75
(4,134)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB3	2	1.75
(4,118)	1:23:A:PRO:HG2	1:24:A:PRO:HD3	7	1.75
(4,52)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	5	1.75
(4,52)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	5	1.75
(4,52)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	5	1.75
(4,52)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	5	1.75
(4,52)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	5	1.75
(4,52)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	5	1.75
(4,42)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HA	7	1.75
(4,42)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HA	7	1.75
(2,467)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG11	9	1.75
(2,467)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG12	9	1.75
(2,467)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG13	9	1.75
(2,434)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB2	2	1.75
(2,434)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB2	2	1.75
(2,434)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB2	2	1.75
(2,434)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB3	2	1.75
(2,434)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB3	2	1.75
(2,434)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB3	2	1.75
(2,408)	1:23:A:PRO:HG2	1:24:A:PRO:HD3	7	1.75
(2,261)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	5	1.75
(2,261)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	5	1.75
(2,261)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	5	1.75
(2,261)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	5	1.75
(2,261)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	5	1.75
(2,261)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	5	1.75
(2,235)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HA	7	1.75
(2,235)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HA	7	1.75
(4,160)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HE1	5	1.74
(4,160)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HE2	5	1.74
(4,157)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HA	6	1.74
(4,157)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HA	6	1.74

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,157)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HA	6	1.74
(4,83)	1:10:A:GLN:HG2	1:13:A:LYS:H	4	1.74
(4,83)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:H	4	1.74
(4,63)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD21	5	1.74
(4,63)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD22	5	1.74
(4,63)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD23	5	1.74
(3,309)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA3	7	1.74
(3,309)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA3	7	1.74
(3,309)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA3	7	1.74
(3,204)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	10	1.74
(3,204)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	10	1.74
(2,483)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HE1	5	1.74
(2,483)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HE2	5	1.74
(2,472)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HA	6	1.74
(2,472)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HA	6	1.74
(2,472)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HA	6	1.74
(2,456)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA3	7	1.74
(2,456)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA3	7	1.74
(2,456)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA3	7	1.74
(2,340)	1:10:A:GLN:HG2	1:13:A:LYS:H	4	1.74
(2,340)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:H	4	1.74
(2,294)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD21	5	1.74
(2,294)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD22	5	1.74
(2,294)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD23	5	1.74
(2,252)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	10	1.74
(2,252)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	10	1.74
(4,135)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:HG	8	1.73
(4,135)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:HG	8	1.73
(4,135)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:HG	8	1.73
(4,83)	1:10:A:GLN:HG2	1:13:A:LYS:H	2	1.73
(4,83)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:H	2	1.73
(4,83)	1:10:A:GLN:HG2	1:13:A:LYS:H	9	1.73
(4,83)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:H	9	1.73
(2,435)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:HG	8	1.73
(2,435)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:HG	8	1.73
(2,435)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:HG	8	1.73
(2,340)	1:10:A:GLN:HG2	1:13:A:LYS:H	2	1.73
(2,340)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:H	2	1.73
(2,340)	1:10:A:GLN:HG2	1:13:A:LYS:H	9	1.73
(2,340)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:H	9	1.73
(1,438)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG21	5	1.73
(1,438)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG22	5	1.73

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,438)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG23	5	1.73
(4,134)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB2	4	1.72
(4,134)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB2	4	1.72
(4,134)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB2	4	1.72
(4,134)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB3	4	1.72
(4,134)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB3	4	1.72
(4,134)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB3	4	1.72
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	1	1.72
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	1	1.72
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	1	1.72
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	6	1.72
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	6	1.72
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	6	1.72
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	7	1.72
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	7	1.72
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	7	1.72
(3,204)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	2	1.72
(3,204)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	2	1.72
(2,434)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB2	4	1.72
(2,434)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB2	4	1.72
(2,434)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB2	4	1.72
(2,434)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB3	4	1.72
(2,434)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB3	4	1.72
(2,434)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB3	4	1.72
(2,252)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	2	1.72
(2,252)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	2	1.72
(2,14)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	1	1.72
(2,14)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	1	1.72
(2,14)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	1	1.72
(2,14)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	6	1.72
(2,14)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	6	1.72
(2,14)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	6	1.72
(2,14)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	7	1.72
(2,14)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	7	1.72
(2,14)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	7	1.72
(1,511)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HA	1	1.72
(1,511)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HA	1	1.72
(1,511)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HA	1	1.72
(1,472)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HA	3	1.72
(1,472)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HA	3	1.72
(1,472)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HA	3	1.72
(1,468)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG21	5	1.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,468)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG22	5	1.72
(1,468)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG23	5	1.72
(1,425)	1:7:A:LEU:HG	1:9:A:ILE:HG13	2	1.72
(4,175)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HE1	8	1.71
(4,175)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HE2	8	1.71
(3,309)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA3	1	1.71
(3,309)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA3	1	1.71
(3,309)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA3	1	1.71
(3,309)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA3	9	1.71
(3,309)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA3	9	1.71
(3,309)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA3	9	1.71
(3,204)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	4	1.71
(3,204)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	4	1.71
(2,518)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HE1	8	1.71
(2,518)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HE2	8	1.71
(2,456)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA3	1	1.71
(2,456)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA3	1	1.71
(2,456)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA3	1	1.71
(2,456)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA3	9	1.71
(2,456)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA3	9	1.71
(2,456)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA3	9	1.71
(2,252)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	4	1.71
(2,252)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	4	1.71
(1,312)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:HD1	2	1.71
(4,180)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HB3	6	1.7
(4,63)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD21	3	1.7
(4,63)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD22	3	1.7
(4,63)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD23	3	1.7
(3,309)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA3	4	1.7
(3,309)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA3	4	1.7
(3,309)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA3	4	1.7
(3,309)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA3	5	1.7
(3,309)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA3	5	1.7
(3,309)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA3	5	1.7
(2,529)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HB3	6	1.7
(2,456)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA3	4	1.7
(2,456)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA3	4	1.7
(2,456)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA3	4	1.7
(2,456)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA3	5	1.7
(2,456)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA3	5	1.7
(2,456)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA3	5	1.7
(2,294)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD21	3	1.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,294)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD22	3	1.7
(2,294)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD23	3	1.7
(1,511)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HA	7	1.7
(1,511)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HA	7	1.7
(1,511)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HA	7	1.7
(1,419)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HG2	1	1.7
(1,419)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HG2	1	1.7
(1,405)	1:17:A:PRO:HG2	1:19:A:SER:HB3	5	1.7
(1,405)	1:17:A:PRO:HG3	1:19:A:SER:HB3	5	1.7
(1,241)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HE1	3	1.7
(1,241)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HE2	3	1.7
(1,241)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HE1	3	1.7
(1,241)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HE2	3	1.7
(1,241)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HE1	8	1.7
(1,241)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HE2	8	1.7
(1,241)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HE1	8	1.7
(1,241)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HE2	8	1.7
(4,180)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HB3	3	1.69
(4,163)	1:8:A:TYR:HB2	1:24:A:PRO:HA	5	1.69
(4,112)	1:23:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HD3	5	1.69
(4,70)	1:11:A:TRP:HE3	1:24:A:PRO:HA	5	1.69
(4,63)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD21	6	1.69
(4,63)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD22	6	1.69
(4,63)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD23	6	1.69
(4,28)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:HB2	5	1.69
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	3	1.69
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	3	1.69
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	3	1.69
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	4	1.69
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	4	1.69
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	4	1.69
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	5	1.69
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	5	1.69
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	5	1.69
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	9	1.69
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	9	1.69
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	9	1.69
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	10	1.69
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	10	1.69
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	10	1.69
(2,529)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HB3	3	1.69
(2,487)	1:8:A:TYR:HB2	1:24:A:PRO:HA	5	1.69

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,396)	1:23:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HD3	5	1.69
(2,313)	1:11:A:TRP:HE3	1:24:A:PRO:HA	5	1.69
(2,294)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD21	6	1.69
(2,294)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD22	6	1.69
(2,294)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD23	6	1.69
(2,141)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:HB2	5	1.69
(2,14)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	3	1.69
(2,14)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	3	1.69
(2,14)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	3	1.69
(2,14)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	4	1.69
(2,14)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	4	1.69
(2,14)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	4	1.69
(2,14)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	5	1.69
(2,14)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	5	1.69
(2,14)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	5	1.69
(2,14)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	9	1.69
(2,14)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	9	1.69
(2,14)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	9	1.69
(2,14)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	10	1.69
(2,14)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	10	1.69
(2,14)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	10	1.69
(1,387)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HG12	7	1.69
(4,180)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HB3	8	1.68
(4,170)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	4	1.68
(4,170)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	4	1.68
(4,170)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	4	1.68
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	2	1.68
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	2	1.68
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	2	1.68
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	8	1.68
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	8	1.68
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	8	1.68
(2,529)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HB3	8	1.68
(2,507)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	4	1.68
(2,507)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	4	1.68
(2,507)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	4	1.68
(2,14)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	2	1.68
(2,14)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	2	1.68
(2,14)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	2	1.68
(2,14)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	8	1.68
(2,14)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	8	1.68
(2,14)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	8	1.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,419)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HG2	3	1.68
(1,419)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HG2	3	1.68
(4,156)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	2	1.67
(4,156)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	2	1.67
(4,156)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	2	1.67
(4,137)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG21	2	1.67
(4,137)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG22	2	1.67
(4,137)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG23	2	1.67
(4,95)	1:11:A:TRP:H	1:24:A:PRO:HB3	10	1.67
(4,42)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HA	1	1.67
(4,42)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HA	1	1.67
(3,345)	1:11:A:TRP:HZ3	1:24:A:PRO:HG3	2	1.67
(3,309)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA3	2	1.67
(3,309)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA3	2	1.67
(3,309)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA3	2	1.67
(3,309)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA3	3	1.67
(3,309)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA3	3	1.67
(3,309)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA3	3	1.67
(3,204)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	8	1.67
(3,204)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	8	1.67
(2,520)	1:11:A:TRP:HZ3	1:24:A:PRO:HG3	2	1.67
(2,470)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	2	1.67
(2,470)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	2	1.67
(2,470)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	2	1.67
(2,456)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA3	2	1.67
(2,456)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA3	2	1.67
(2,456)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA3	2	1.67
(2,456)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA3	3	1.67
(2,456)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA3	3	1.67
(2,456)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA3	3	1.67
(2,438)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG21	2	1.67
(2,438)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG22	2	1.67
(2,438)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG23	2	1.67
(2,357)	1:11:A:TRP:H	1:24:A:PRO:HB3	10	1.67
(2,252)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	8	1.67
(2,252)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	8	1.67
(2,235)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HA	1	1.67
(2,235)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HA	1	1.67
(4,180)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HB3	2	1.66
(4,134)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB2	10	1.66
(4,134)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB2	10	1.66
(4,134)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB2	10	1.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,134)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB3	10	1.66
(4,134)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB3	10	1.66
(4,134)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB3	10	1.66
(4,124)	1:7:A:LEU:HB2	1:8:A:TYR:HB3	7	1.66
(4,63)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD21	10	1.66
(4,63)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD22	10	1.66
(4,63)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD23	10	1.66
(2,529)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HB3	2	1.66
(2,434)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB2	10	1.66
(2,434)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB2	10	1.66
(2,434)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB2	10	1.66
(2,434)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB3	10	1.66
(2,434)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB3	10	1.66
(2,434)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB3	10	1.66
(2,415)	1:7:A:LEU:HB2	1:8:A:TYR:HB3	7	1.66
(2,294)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD21	10	1.66
(2,294)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD22	10	1.66
(2,294)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD23	10	1.66
(1,238)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HD2	6	1.66
(1,238)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HD2	6	1.66
(4,122)	1:1:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD2	8	1.65
(4,122)	1:1:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD3	8	1.65
(4,122)	1:1:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD2	8	1.65
(4,114)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	4	1.65
(4,114)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	4	1.65
(4,88)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD11	8	1.65
(4,88)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD12	8	1.65
(4,88)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD13	8	1.65
(4,70)	1:11:A:TRP:HE3	1:24:A:PRO:HA	1	1.65
(3,345)	1:11:A:TRP:HZ3	1:24:A:PRO:HG3	6	1.65
(2,520)	1:11:A:TRP:HZ3	1:24:A:PRO:HG3	6	1.65
(2,413)	1:1:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD2	8	1.65
(2,413)	1:1:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD3	8	1.65
(2,413)	1:1:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD2	8	1.65
(2,402)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	4	1.65
(2,402)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	4	1.65
(2,347)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD11	8	1.65
(2,347)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD12	8	1.65
(2,347)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD13	8	1.65
(2,313)	1:11:A:TRP:HE3	1:24:A:PRO:HA	1	1.65
(1,425)	1:7:A:LEU:HG	1:9:A:ILE:HG13	3	1.65
(1,419)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HG2	2	1.65

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,419)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HG2	2	1.65
(4,143)	1:12:A:LEU:HD11	1:14:A:ASP:HB2	10	1.64
(4,143)	1:12:A:LEU:HD12	1:14:A:ASP:HB2	10	1.64
(4,143)	1:12:A:LEU:HD13	1:14:A:ASP:HB2	10	1.64
(4,137)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG21	3	1.64
(4,137)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG22	3	1.64
(4,137)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG23	3	1.64
(3,345)	1:11:A:TRP:HZ3	1:24:A:PRO:HG3	5	1.64
(3,204)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	9	1.64
(3,204)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	9	1.64
(2,520)	1:11:A:TRP:HZ3	1:24:A:PRO:HG3	5	1.64
(2,449)	1:12:A:LEU:HD11	1:14:A:ASP:HB2	10	1.64
(2,449)	1:12:A:LEU:HD12	1:14:A:ASP:HB2	10	1.64
(2,449)	1:12:A:LEU:HD13	1:14:A:ASP:HB2	10	1.64
(2,438)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG21	3	1.64
(2,438)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG22	3	1.64
(2,438)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG23	3	1.64
(2,252)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	9	1.64
(2,252)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	9	1.64
(1,241)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HE1	10	1.64
(1,241)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HE2	10	1.64
(1,241)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HE1	10	1.64
(1,241)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HE2	10	1.64
(4,175)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HE1	3	1.63
(4,175)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HE2	3	1.63
(4,115)	1:19:A:SER:HB3	1:21:A:ARG:HG2	9	1.63
(3,345)	1:11:A:TRP:HZ3	1:24:A:PRO:HG3	4	1.63
(3,345)	1:11:A:TRP:HZ3	1:24:A:PRO:HG3	8	1.63
(2,520)	1:11:A:TRP:HZ3	1:24:A:PRO:HG3	4	1.63
(2,520)	1:11:A:TRP:HZ3	1:24:A:PRO:HG3	8	1.63
(2,518)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HE1	3	1.63
(2,518)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HE2	3	1.63
(2,403)	1:19:A:SER:HB3	1:21:A:ARG:HG2	9	1.63
(1,117)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:H	6	1.63
(1,117)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:H	6	1.63
(4,180)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HB3	5	1.62
(4,162)	1:24:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:HA	6	1.62
(4,83)	1:10:A:GLN:HG2	1:13:A:LYS:H	1	1.62
(4,83)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:H	1	1.62
(4,83)	1:10:A:GLN:HG2	1:13:A:LYS:H	5	1.62
(4,83)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:H	5	1.62
(4,28)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:HB2	3	1.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,28)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:HB2	8	1.62
(3,345)	1:11:A:TRP:HZ3	1:24:A:PRO:HG3	1	1.62
(3,301)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG2	8	1.62
(3,301)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG2	8	1.62
(3,301)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG2	8	1.62
(3,301)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG3	8	1.62
(3,301)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG3	8	1.62
(3,301)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG3	8	1.62
(2,529)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HB3	5	1.62
(2,520)	1:11:A:TRP:HZ3	1:24:A:PRO:HG3	1	1.62
(2,486)	1:24:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:HA	6	1.62
(2,437)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG2	8	1.62
(2,437)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG2	8	1.62
(2,437)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG2	8	1.62
(2,437)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG3	8	1.62
(2,437)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG3	8	1.62
(2,437)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG3	8	1.62
(2,340)	1:10:A:GLN:HG2	1:13:A:LYS:H	1	1.62
(2,340)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:H	1	1.62
(2,340)	1:10:A:GLN:HG2	1:13:A:LYS:H	5	1.62
(2,340)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:H	5	1.62
(2,141)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:HB2	3	1.62
(2,141)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:HB2	8	1.62
(1,318)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HA	3	1.62
(1,318)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HA	4	1.62
(4,134)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB2	9	1.61
(4,134)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB2	9	1.61
(4,134)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB2	9	1.61
(4,134)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB3	9	1.61
(4,134)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB3	9	1.61
(4,134)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB3	9	1.61
(4,63)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD21	9	1.61
(4,63)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD22	9	1.61
(4,63)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD23	9	1.61
(4,53)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	10	1.61
(4,53)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	10	1.61
(4,53)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	10	1.61
(4,53)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	10	1.61
(4,53)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	10	1.61
(4,53)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	10	1.61
(4,43)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HB2	9	1.61
(4,43)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HB2	9	1.61

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,434)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB2	9	1.61
(2,434)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB2	9	1.61
(2,434)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB2	9	1.61
(2,434)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB3	9	1.61
(2,434)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB3	9	1.61
(2,434)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB3	9	1.61
(2,294)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD21	9	1.61
(2,294)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD22	9	1.61
(2,294)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD23	9	1.61
(2,262)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	10	1.61
(2,262)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	10	1.61
(2,262)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	10	1.61
(2,262)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	10	1.61
(2,262)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	10	1.61
(2,262)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	10	1.61
(2,237)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HB2	9	1.61
(2,237)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HB2	9	1.61
(1,318)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HA	2	1.61
(4,180)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HB3	7	1.6
(4,163)	1:8:A:TYR:HB2	1:24:A:PRO:HA	6	1.6
(4,154)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG11	8	1.6
(4,154)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG12	8	1.6
(4,154)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG13	8	1.6
(4,95)	1:11:A:TRP:H	1:24:A:PRO:HB3	2	1.6
(4,72)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	9	1.6
(4,72)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	10	1.6
(3,345)	1:11:A:TRP:HZ3	1:24:A:PRO:HG3	7	1.6
(2,529)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HB3	7	1.6
(2,520)	1:11:A:TRP:HZ3	1:24:A:PRO:HG3	7	1.6
(2,487)	1:8:A:TYR:HB2	1:24:A:PRO:HA	6	1.6
(2,467)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG11	8	1.6
(2,467)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG12	8	1.6
(2,467)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG13	8	1.6
(2,357)	1:11:A:TRP:H	1:24:A:PRO:HB3	2	1.6
(2,317)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	9	1.6
(2,317)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	10	1.6
(4,170)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	9	1.59
(4,170)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	9	1.59
(4,170)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	9	1.59
(4,156)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	4	1.59
(4,156)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	4	1.59
(4,156)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	4	1.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,345)	1:11:A:TRP:HZ3	1:24:A:PRO:HG3	3	1.59
(3,345)	1:11:A:TRP:HZ3	1:24:A:PRO:HG3	9	1.59
(3,345)	1:11:A:TRP:HZ3	1:24:A:PRO:HG3	10	1.59
(3,309)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA3	10	1.59
(3,309)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA3	10	1.59
(3,309)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA3	10	1.59
(2,520)	1:11:A:TRP:HZ3	1:24:A:PRO:HG3	3	1.59
(2,520)	1:11:A:TRP:HZ3	1:24:A:PRO:HG3	9	1.59
(2,520)	1:11:A:TRP:HZ3	1:24:A:PRO:HG3	10	1.59
(2,507)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	9	1.59
(2,507)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	9	1.59
(2,507)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	9	1.59
(2,470)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	4	1.59
(2,470)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	4	1.59
(2,470)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	4	1.59
(2,456)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA3	10	1.59
(2,456)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA3	10	1.59
(2,456)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA3	10	1.59
(1,438)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG21	7	1.59
(1,438)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG22	7	1.59
(1,438)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG23	7	1.59
(1,387)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HG12	1	1.59
(1,117)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:H	8	1.59
(1,117)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:H	8	1.59
(4,72)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	8	1.58
(4,28)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:HB2	1	1.58
(2,317)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	8	1.58
(2,141)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:HB2	1	1.58
(1,117)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:H	4	1.58
(1,117)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:H	4	1.58
(1,117)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:H	10	1.58
(1,117)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:H	10	1.58
(4,180)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HB3	1	1.57
(4,180)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HB3	4	1.57
(4,170)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	10	1.57
(4,170)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	10	1.57
(4,170)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	10	1.57
(4,132)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	4	1.57
(4,132)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	4	1.57
(4,132)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	4	1.57
(4,132)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	4	1.57
(4,132)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	4	1.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,132)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	4	1.57
(4,132)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	4	1.57
(4,132)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	4	1.57
(4,132)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	4	1.57
(4,128)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	6	1.57
(4,128)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	6	1.57
(4,128)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	6	1.57
(4,101)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB1	6	1.57
(4,101)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB2	6	1.57
(4,101)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB3	6	1.57
(4,84)	1:10:A:GLN:HB2	1:13:A:LYS:H	4	1.57
(4,84)	1:10:A:GLN:HB2	1:13:A:LYS:H	6	1.57
(4,67)	1:11:A:TRP:HZ3	1:23:A:PRO:HB2	6	1.57
(2,529)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HB3	1	1.57
(2,529)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HB3	4	1.57
(2,507)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	10	1.57
(2,507)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	10	1.57
(2,507)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	10	1.57
(2,428)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	4	1.57
(2,428)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	4	1.57
(2,428)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	4	1.57
(2,428)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	4	1.57
(2,428)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	4	1.57
(2,428)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	4	1.57
(2,428)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	4	1.57
(2,428)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	4	1.57
(2,428)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	4	1.57
(2,420)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	6	1.57
(2,420)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	6	1.57
(2,420)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	6	1.57
(2,372)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB1	6	1.57
(2,372)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB2	6	1.57
(2,372)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB3	6	1.57
(2,341)	1:10:A:GLN:HB2	1:13:A:LYS:H	4	1.57
(2,341)	1:10:A:GLN:HB2	1:13:A:LYS:H	6	1.57
(2,303)	1:11:A:TRP:HZ3	1:23:A:PRO:HB2	6	1.57
(1,312)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:HD1	7	1.57
(1,117)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:H	1	1.57
(1,117)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:H	1	1.57
(4,175)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HE1	10	1.56
(4,175)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HE2	10	1.56
(4,40)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HA	6	1.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,40)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HA	6	1.56
(2,518)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HE1	10	1.56
(2,518)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HE2	10	1.56
(2,230)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HA	6	1.56
(2,230)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HA	6	1.56
(1,511)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HA	5	1.56
(1,511)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HA	5	1.56
(1,511)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HA	5	1.56
(1,338)	1:8:A:TYR:HB3	1:9:A:ILE:H	7	1.56
(1,312)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:HD1	6	1.56
(4,49)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HG2	7	1.55
(4,49)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HG2	7	1.55
(4,28)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:HB2	2	1.55
(2,253)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HG2	7	1.55
(2,253)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HG2	7	1.55
(2,141)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:HB2	2	1.55
(1,420)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	5	1.55
(1,420)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	5	1.55
(1,420)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	5	1.55
(1,338)	1:8:A:TYR:HB3	1:9:A:ILE:H	6	1.55
(1,186)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD21	4	1.55
(1,186)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD22	4	1.55
(1,186)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD23	4	1.55
(4,72)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	6	1.54
(2,317)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	6	1.54
(1,117)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:H	2	1.54
(1,117)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:H	2	1.54
(1,117)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:H	3	1.54
(1,117)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:H	3	1.54
(4,170)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	8	1.53
(4,170)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	8	1.53
(4,170)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	8	1.53
(4,124)	1:7:A:LEU:HB2	1:8:A:TYR:HB3	1	1.53
(4,122)	1:1:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD2	7	1.53
(4,122)	1:1:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD3	7	1.53
(4,122)	1:1:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD2	7	1.53
(4,72)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	7	1.53
(2,507)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	8	1.53
(2,507)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	8	1.53
(2,507)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	8	1.53
(2,415)	1:7:A:LEU:HB2	1:8:A:TYR:HB3	1	1.53
(2,413)	1:1:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD2	7	1.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,413)	1:1:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD3	7	1.53
(2,413)	1:1:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD2	7	1.53
(2,317)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	7	1.53
(1,372)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB1	3	1.53
(1,372)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB2	3	1.53
(1,372)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB3	3	1.53
(1,117)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:H	9	1.53
(1,117)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:H	9	1.53
(4,141)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HB2	7	1.52
(4,63)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD21	8	1.52
(4,63)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD22	8	1.52
(4,63)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD23	8	1.52
(4,43)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HB2	10	1.52
(4,43)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HB2	10	1.52
(2,444)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HB2	7	1.52
(2,294)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD21	8	1.52
(2,294)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD22	8	1.52
(2,294)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD23	8	1.52
(2,237)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HB2	10	1.52
(2,237)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HB2	10	1.52
(1,318)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HA	1	1.52
(1,139)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB3	1	1.52
(4,137)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG21	8	1.51
(4,137)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG22	8	1.51
(4,137)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG23	8	1.51
(4,72)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	3	1.51
(3,234)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD21	4	1.51
(3,234)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD22	4	1.51
(3,234)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD23	4	1.51
(3,204)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	1	1.51
(3,204)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	1	1.51
(2,438)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG21	8	1.51
(2,438)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG22	8	1.51
(2,438)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG23	8	1.51
(2,317)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	3	1.51
(2,298)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD21	4	1.51
(2,298)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD22	4	1.51
(2,298)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD23	4	1.51
(2,252)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	1	1.51
(2,252)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	1	1.51
(1,511)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HA	6	1.51
(1,511)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HA	6	1.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,511)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HA	6	1.51
(1,241)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HE1	9	1.51
(1,241)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HE2	9	1.51
(1,241)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HE1	9	1.51
(1,241)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HE2	9	1.51
(1,186)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD21	2	1.51
(1,186)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD22	2	1.51
(1,186)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD23	2	1.51
(1,139)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB3	2	1.51
(4,170)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	2	1.5
(4,170)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	2	1.5
(4,170)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	2	1.5
(4,112)	1:23:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HD3	4	1.5
(4,97)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:H	3	1.5
(4,97)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:H	3	1.5
(4,97)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:H	3	1.5
(4,84)	1:10:A:GLN:HB2	1:13:A:LYS:H	3	1.5
(4,72)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	4	1.5
(4,28)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:HB2	7	1.5
(2,507)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	2	1.5
(2,507)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	2	1.5
(2,507)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	2	1.5
(2,396)	1:23:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HD3	4	1.5
(2,366)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:H	3	1.5
(2,366)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:H	3	1.5
(2,366)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:H	3	1.5
(2,341)	1:10:A:GLN:HB2	1:13:A:LYS:H	3	1.5
(2,317)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	4	1.5
(2,141)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:HB2	7	1.5
(1,408)	1:23:A:PRO:HG2	1:24:A:PRO:HD3	1	1.5
(1,372)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB1	10	1.5
(1,372)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB2	10	1.5
(1,372)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB3	10	1.5
(1,338)	1:8:A:TYR:HB3	1:9:A:ILE:H	5	1.5
(1,245)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB2	4	1.5
(1,245)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB2	4	1.5
(1,186)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD21	1	1.5
(1,186)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD22	1	1.5
(1,186)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD23	1	1.5
(1,186)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD21	7	1.5
(1,186)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD22	7	1.5
(1,186)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD23	7	1.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,170)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	3	1.49
(4,170)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	3	1.49
(4,170)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	3	1.49
(4,84)	1:10:A:GLN:HB2	1:13:A:LYS:H	1	1.49
(4,84)	1:10:A:GLN:HB2	1:13:A:LYS:H	5	1.49
(4,65)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD21	6	1.49
(4,65)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD22	6	1.49
(4,65)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD23	6	1.49
(4,43)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HB2	1	1.49
(4,43)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HB2	1	1.49
(4,43)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HB2	2	1.49
(4,43)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HB2	2	1.49
(2,507)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	3	1.49
(2,507)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	3	1.49
(2,507)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	3	1.49
(2,341)	1:10:A:GLN:HB2	1:13:A:LYS:H	1	1.49
(2,341)	1:10:A:GLN:HB2	1:13:A:LYS:H	5	1.49
(2,299)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD21	6	1.49
(2,299)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD22	6	1.49
(2,299)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD23	6	1.49
(2,237)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HB2	1	1.49
(2,237)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HB2	1	1.49
(2,237)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HB2	2	1.49
(2,237)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HB2	2	1.49
(1,186)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD21	8	1.49
(1,186)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD22	8	1.49
(1,186)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD23	8	1.49
(1,139)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB3	3	1.49
(1,139)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB3	9	1.49
(4,128)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	4	1.48
(4,128)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	4	1.48
(4,128)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	4	1.48
(4,97)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:H	2	1.48
(4,97)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:H	2	1.48
(4,97)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:H	2	1.48
(4,97)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:H	4	1.48
(4,97)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:H	4	1.48
(4,97)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:H	4	1.48
(4,72)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	2	1.48
(4,70)	1:11:A:TRP:HE3	1:24:A:PRO:HA	6	1.48
(4,27)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:HB3	4	1.48
(3,286)	1:14:A:ASP:HB2	1:19:A:SER:HB2	6	1.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,420)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	4	1.48
(2,420)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	4	1.48
(2,420)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	4	1.48
(2,398)	1:14:A:ASP:HB2	1:19:A:SER:HB2	6	1.48
(2,366)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:H	2	1.48
(2,366)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:H	2	1.48
(2,366)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:H	2	1.48
(2,366)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:H	4	1.48
(2,366)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:H	4	1.48
(2,366)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:H	4	1.48
(2,317)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	2	1.48
(2,313)	1:11:A:TRP:HE3	1:24:A:PRO:HA	6	1.48
(2,140)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:HB3	4	1.48
(1,425)	1:7:A:LEU:HG	1:9:A:ILE:HG13	9	1.48
(1,338)	1:8:A:TYR:HB3	1:9:A:ILE:H	1	1.48
(1,186)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD21	3	1.48
(1,186)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD22	3	1.48
(1,186)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD23	3	1.48
(4,175)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HE1	4	1.47
(4,175)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HE2	4	1.47
(4,83)	1:10:A:GLN:HG2	1:13:A:LYS:H	6	1.47
(4,83)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:H	6	1.47
(4,72)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	1	1.47
(4,72)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	5	1.47
(4,66)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD11	10	1.47
(4,66)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD12	10	1.47
(4,66)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD13	10	1.47
(4,53)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	9	1.47
(4,53)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	9	1.47
(4,53)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	9	1.47
(4,53)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	9	1.47
(4,53)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	9	1.47
(4,53)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	9	1.47
(3,243)	1:11:A:TRP:HD1	1:19:A:SER:HB3	9	1.47
(2,518)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HE1	4	1.47
(2,518)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HE2	4	1.47
(2,340)	1:10:A:GLN:HG2	1:13:A:LYS:H	6	1.47
(2,340)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:H	6	1.47
(2,317)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	1	1.47
(2,317)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	5	1.47
(2,311)	1:11:A:TRP:HD1	1:19:A:SER:HB3	9	1.47
(2,302)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD11	10	1.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,302)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD12	10	1.47
(2,302)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD13	10	1.47
(2,262)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	9	1.47
(2,262)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	9	1.47
(2,262)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	9	1.47
(2,262)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	9	1.47
(2,262)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	9	1.47
(2,262)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	9	1.47
(1,186)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD21	9	1.47
(1,186)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD22	9	1.47
(1,186)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD23	9	1.47
(1,139)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB3	8	1.47
(1,139)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB3	10	1.47
(4,95)	1:11:A:TRP:H	1:24:A:PRO:HB3	6	1.46
(3,309)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA3	8	1.46
(3,309)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA3	8	1.46
(3,309)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA3	8	1.46
(2,456)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA3	8	1.46
(2,456)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA3	8	1.46
(2,456)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA3	8	1.46
(2,357)	1:11:A:TRP:H	1:24:A:PRO:HB3	6	1.46
(1,186)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD21	5	1.46
(1,186)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD22	5	1.46
(1,186)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD23	5	1.46
(1,186)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD21	6	1.46
(1,186)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD22	6	1.46
(1,186)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD23	6	1.46
(1,186)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD21	10	1.46
(1,186)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD22	10	1.46
(1,186)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD23	10	1.46
(1,158)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG13	6	1.46
(1,139)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB3	7	1.46
(4,139)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HB2	8	1.45
(4,139)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HB2	8	1.45
(4,139)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HB2	8	1.45
(4,139)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HB3	8	1.45
(4,139)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HB3	8	1.45
(4,139)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HB3	8	1.45
(4,137)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG21	9	1.45
(4,137)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG22	9	1.45
(4,137)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG23	9	1.45
(2,441)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HB2	8	1.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,441)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HB2	8	1.45
(2,441)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HB2	8	1.45
(2,441)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HB3	8	1.45
(2,441)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HB3	8	1.45
(2,441)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HB3	8	1.45
(2,438)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG21	9	1.45
(2,438)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG22	9	1.45
(2,438)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG23	9	1.45
(1,158)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG13	5	1.45
(4,161)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HA	9	1.44
(4,122)	1:1:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD2	3	1.44
(4,122)	1:1:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD3	3	1.44
(4,122)	1:1:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD2	3	1.44
(4,113)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD2	4	1.44
(4,113)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD2	4	1.44
(4,43)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HB2	6	1.44
(4,43)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HB2	6	1.44
(4,40)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HA	7	1.44
(4,40)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HA	7	1.44
(2,485)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HA	9	1.44
(2,413)	1:1:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD2	3	1.44
(2,413)	1:1:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD3	3	1.44
(2,413)	1:1:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD2	3	1.44
(2,401)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD2	4	1.44
(2,401)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD2	4	1.44
(2,237)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HB2	6	1.44
(2,237)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HB2	6	1.44
(2,230)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HA	7	1.44
(2,230)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HA	7	1.44
(1,438)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG21	6	1.44
(1,438)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG22	6	1.44
(1,438)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG23	6	1.44
(1,318)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HA	7	1.44
(4,114)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	8	1.43
(4,114)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	8	1.43
(4,111)	1:23:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HD2	1	1.43
(4,97)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:H	7	1.43
(4,97)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:H	7	1.43
(4,97)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:H	7	1.43
(4,67)	1:11:A:TRP:HZ3	1:23:A:PRO:HB2	7	1.43
(4,65)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD21	5	1.43
(4,65)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD22	5	1.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,65)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD23	5	1.43
(3,301)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG2	9	1.43
(3,301)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG2	9	1.43
(3,301)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG2	9	1.43
(3,301)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG3	9	1.43
(3,301)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG3	9	1.43
(3,301)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG3	9	1.43
(3,204)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	5	1.43
(3,204)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	5	1.43
(2,437)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG2	9	1.43
(2,437)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG2	9	1.43
(2,437)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG2	9	1.43
(2,437)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG3	9	1.43
(2,437)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG3	9	1.43
(2,437)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG3	9	1.43
(2,402)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	8	1.43
(2,402)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	8	1.43
(2,394)	1:23:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HD2	1	1.43
(2,366)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:H	7	1.43
(2,366)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:H	7	1.43
(2,366)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:H	7	1.43
(2,303)	1:11:A:TRP:HZ3	1:23:A:PRO:HB2	7	1.43
(2,299)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD21	5	1.43
(2,299)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD22	5	1.43
(2,299)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD23	5	1.43
(2,252)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	5	1.43
(2,252)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	5	1.43
(1,438)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG21	1	1.43
(1,438)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG22	1	1.43
(1,438)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG23	1	1.43
(1,425)	1:7:A:LEU:HG	1:9:A:ILE:HG13	10	1.43
(1,337)	1:12:A:LEU:HA	1:16:A:GLY:H	4	1.43
(1,262)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	7	1.43
(1,262)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	7	1.43
(1,262)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	7	1.43
(1,262)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	7	1.43
(1,262)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	7	1.43
(1,262)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	7	1.43
(4,163)	1:8:A:TYR:HB2	1:24:A:PRO:HA	1	1.42
(4,111)	1:23:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HD2	3	1.42
(4,103)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	2	1.42
(4,103)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB3	2	1.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,487)	1:8:A:TYR:HB2	1:24:A:PRO:HA	1	1.42
(2,394)	1:23:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HD2	3	1.42
(2,374)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	2	1.42
(2,374)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB3	2	1.42
(1,511)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HA	10	1.42
(1,511)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HA	10	1.42
(1,511)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HA	10	1.42
(1,449)	1:12:A:LEU:HD11	1:14:A:ASP:HB2	5	1.42
(1,449)	1:12:A:LEU:HD12	1:14:A:ASP:HB2	5	1.42
(1,449)	1:12:A:LEU:HD13	1:14:A:ASP:HB2	5	1.42
(1,158)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG13	2	1.42
(1,139)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB3	4	1.42
(4,84)	1:10:A:GLN:HB2	1:13:A:LYS:H	2	1.41
(4,84)	1:10:A:GLN:HB2	1:13:A:LYS:H	8	1.41
(4,42)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HA	5	1.41
(4,42)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HA	5	1.41
(4,17)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD3	4	1.41
(2,341)	1:10:A:GLN:HB2	1:13:A:LYS:H	2	1.41
(2,341)	1:10:A:GLN:HB2	1:13:A:LYS:H	8	1.41
(2,235)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HA	5	1.41
(2,235)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HA	5	1.41
(2,85)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD3	4	1.41
(1,337)	1:12:A:LEU:HA	1:16:A:GLY:H	1	1.41
(1,158)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG13	4	1.41
(1,158)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG13	8	1.41
(1,158)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG13	9	1.41
(1,139)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB3	6	1.41
(4,114)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	7	1.4
(4,114)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	7	1.4
(4,111)	1:23:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HD2	9	1.4
(4,111)	1:23:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HD2	10	1.4
(4,46)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HD1	6	1.4
(4,46)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HD2	6	1.4
(4,46)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HD1	6	1.4
(4,46)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HD2	6	1.4
(4,41)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HE1	5	1.4
(4,41)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HE2	5	1.4
(2,402)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	7	1.4
(2,402)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	7	1.4
(2,394)	1:23:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HD2	9	1.4
(2,394)	1:23:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HD2	10	1.4
(2,242)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HD1	6	1.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,242)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HD2	6	1.4
(2,242)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HD1	6	1.4
(2,242)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HD2	6	1.4
(2,233)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HE1	5	1.4
(2,233)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HE2	5	1.4
(1,511)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HA	9	1.4
(1,511)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HA	9	1.4
(1,511)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HA	9	1.4
(1,470)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	8	1.4
(1,470)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	8	1.4
(1,470)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	8	1.4
(1,457)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HD2	10	1.4
(1,457)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HD2	10	1.4
(1,457)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HD2	10	1.4
(1,355)	1:9:A:ILE:HG12	1:11:A:TRP:H	4	1.4
(1,158)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG13	10	1.4
(4,137)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG21	4	1.39
(4,137)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG22	4	1.39
(4,137)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG23	4	1.39
(3,261)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:H	5	1.39
(3,261)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:H	5	1.39
(3,261)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:H	5	1.39
(2,438)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG21	4	1.39
(2,438)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG22	4	1.39
(2,438)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG23	4	1.39
(2,350)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:H	5	1.39
(2,350)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:H	5	1.39
(2,350)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:H	5	1.39
(1,511)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HA	2	1.39
(1,511)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HA	2	1.39
(1,511)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HA	2	1.39
(1,470)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	1	1.39
(1,470)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	1	1.39
(1,470)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	1	1.39
(1,470)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	7	1.39
(1,470)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	7	1.39
(1,470)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	7	1.39
(1,355)	1:9:A:ILE:HG12	1:11:A:TRP:H	2	1.39
(1,355)	1:9:A:ILE:HG12	1:11:A:TRP:H	5	1.39
(1,250)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG2	3	1.39
(1,250)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG2	3	1.39
(4,144)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HE2	6	1.38

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,144)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HE2	6	1.38
(4,144)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HE2	6	1.38
(4,144)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HE3	6	1.38
(4,144)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HE3	6	1.38
(4,144)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HE3	6	1.38
(4,111)	1:23:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HD2	5	1.38
(4,43)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HB2	7	1.38
(4,43)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HB2	7	1.38
(3,286)	1:14:A:ASP:HB2	1:19:A:SER:HB2	10	1.38
(3,285)	1:14:A:ASP:HB2	1:19:A:SER:HB3	5	1.38
(2,450)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HE2	6	1.38
(2,450)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HE2	6	1.38
(2,450)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HE2	6	1.38
(2,450)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HE3	6	1.38
(2,450)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HE3	6	1.38
(2,450)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HE3	6	1.38
(2,398)	1:14:A:ASP:HB2	1:19:A:SER:HB2	10	1.38
(2,397)	1:14:A:ASP:HB2	1:19:A:SER:HB3	5	1.38
(2,394)	1:23:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HD2	5	1.38
(2,237)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HB2	7	1.38
(2,237)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HB2	7	1.38
(1,425)	1:7:A:LEU:HG	1:9:A:ILE:HG13	4	1.38
(1,424)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	7	1.38
(1,424)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	7	1.38
(1,424)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	7	1.38
(1,424)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB1	7	1.38
(1,424)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB2	7	1.38
(1,424)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB3	7	1.38
(1,337)	1:12:A:LEU:HA	1:16:A:GLY:H	2	1.38
(1,158)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG13	3	1.38
(4,144)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HE2	5	1.37
(4,144)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HE2	5	1.37
(4,144)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HE2	5	1.37
(4,144)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HE3	5	1.37
(4,144)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HE3	5	1.37
(4,144)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HE3	5	1.37
(4,112)	1:23:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HD3	1	1.37
(4,70)	1:11:A:TRP:HE3	1:24:A:PRO:HA	7	1.37
(3,234)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD21	2	1.37
(3,234)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD22	2	1.37
(3,234)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD23	2	1.37
(2,450)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HE2	5	1.37

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,450)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HE2	5	1.37
(2,450)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HE2	5	1.37
(2,450)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HE3	5	1.37
(2,450)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HE3	5	1.37
(2,450)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HE3	5	1.37
(2,396)	1:23:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HD3	1	1.37
(2,313)	1:11:A:TRP:HE3	1:24:A:PRO:HA	7	1.37
(2,298)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD21	2	1.37
(2,298)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD22	2	1.37
(2,298)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD23	2	1.37
(1,470)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	9	1.37
(1,470)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	9	1.37
(1,470)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	9	1.37
(1,420)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	7	1.37
(1,420)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	7	1.37
(1,420)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	7	1.37
(1,337)	1:12:A:LEU:HA	1:16:A:GLY:H	6	1.37
(4,66)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD11	9	1.36
(4,66)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD12	9	1.36
(4,66)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD13	9	1.36
(2,302)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD11	9	1.36
(2,302)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD12	9	1.36
(2,302)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD13	9	1.36
(1,337)	1:12:A:LEU:HA	1:16:A:GLY:H	8	1.36
(1,312)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:HD1	1	1.36
(1,142)	1:8:A:TYR:H	1:8:A:TYR:HB3	9	1.36
(1,142)	1:8:A:TYR:H	1:8:A:TYR:HB3	10	1.36
(1,140)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:HB3	6	1.36
(4,122)	1:1:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD2	1	1.35
(4,122)	1:1:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD3	1	1.35
(4,122)	1:1:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD2	1	1.35
(4,98)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HB2	7	1.35
(4,95)	1:11:A:TRP:H	1:24:A:PRO:HB3	8	1.35
(4,27)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:HB3	8	1.35
(3,234)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD21	10	1.35
(3,234)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD22	10	1.35
(3,234)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD23	10	1.35
(2,413)	1:1:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD2	1	1.35
(2,413)	1:1:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD3	1	1.35
(2,413)	1:1:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD2	1	1.35
(2,369)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HB2	7	1.35
(2,357)	1:11:A:TRP:H	1:24:A:PRO:HB3	8	1.35

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,298)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD21	10	1.35
(2,298)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD22	10	1.35
(2,298)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD23	10	1.35
(2,140)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:HB3	8	1.35
(1,457)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HD2	9	1.35
(1,457)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HD2	9	1.35
(1,457)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HD2	9	1.35
(1,355)	1:9:A:ILE:HG12	1:11:A:TRP:H	3	1.35
(1,241)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HE1	2	1.35
(1,241)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HE2	2	1.35
(1,241)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HE1	2	1.35
(1,241)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HE2	2	1.35
(1,230)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HA	3	1.35
(1,230)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HA	3	1.35
(4,135)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:HG	1	1.34
(4,135)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:HG	1	1.34
(4,135)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:HG	1	1.34
(4,114)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	6	1.34
(4,114)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	6	1.34
(4,111)	1:23:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HD2	2	1.34
(4,98)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HB2	8	1.34
(4,43)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HB2	8	1.34
(4,43)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HB2	8	1.34
(3,254)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB3	5	1.34
(3,234)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD21	7	1.34
(3,234)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD22	7	1.34
(3,234)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD23	7	1.34
(2,435)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:HG	1	1.34
(2,435)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:HG	1	1.34
(2,435)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:HG	1	1.34
(2,402)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	6	1.34
(2,402)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	6	1.34
(2,394)	1:23:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HD2	2	1.34
(2,369)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HB2	8	1.34
(2,331)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB3	5	1.34
(2,298)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD21	7	1.34
(2,298)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD22	7	1.34
(2,298)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD23	7	1.34
(2,237)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HB2	8	1.34
(2,237)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HB2	8	1.34
(1,361)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:H	1	1.34
(1,337)	1:12:A:LEU:HA	1:16:A:GLY:H	5	1.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,137)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG21	10	1.33
(4,137)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG22	10	1.33
(4,137)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG23	10	1.33
(4,135)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:HG	6	1.33
(4,135)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:HG	6	1.33
(4,135)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:HG	6	1.33
(4,132)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	2	1.33
(4,132)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	2	1.33
(4,132)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	2	1.33
(4,132)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	2	1.33
(4,132)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	2	1.33
(4,132)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	2	1.33
(4,132)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	2	1.33
(4,132)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	2	1.33
(4,132)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	2	1.33
(4,98)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HB2	2	1.33
(4,84)	1:10:A:GLN:HB2	1:13:A:LYS:H	7	1.33
(4,52)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	6	1.33
(4,52)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	6	1.33
(4,52)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	6	1.33
(4,52)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	6	1.33
(4,52)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	6	1.33
(4,52)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	6	1.33
(4,46)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HD1	4	1.33
(4,46)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HD2	4	1.33
(4,46)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HD1	4	1.33
(4,46)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HD2	4	1.33
(3,301)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG2	10	1.33
(3,301)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG2	10	1.33
(3,301)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG2	10	1.33
(3,301)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG3	10	1.33
(3,301)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG3	10	1.33
(3,301)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG3	10	1.33
(3,285)	1:14:A:ASP:HB2	1:19:A:SER:HB3	3	1.33
(3,204)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	6	1.33
(3,204)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	6	1.33
(2,438)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG21	10	1.33
(2,438)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG22	10	1.33
(2,438)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG23	10	1.33
(2,437)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG2	10	1.33
(2,437)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG2	10	1.33
(2,437)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG2	10	1.33

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,437)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG3	10	1.33
(2,437)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG3	10	1.33
(2,437)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG3	10	1.33
(2,435)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:HG	6	1.33
(2,435)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:HG	6	1.33
(2,435)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:HG	6	1.33
(2,428)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	2	1.33
(2,428)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	2	1.33
(2,428)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	2	1.33
(2,428)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	2	1.33
(2,428)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	2	1.33
(2,428)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	2	1.33
(2,428)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	2	1.33
(2,428)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	2	1.33
(2,428)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	2	1.33
(2,397)	1:14:A:ASP:HB2	1:19:A:SER:HB3	3	1.33
(2,369)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HB2	2	1.33
(2,341)	1:10:A:GLN:HB2	1:13:A:LYS:H	7	1.33
(2,261)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	6	1.33
(2,261)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	6	1.33
(2,261)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	6	1.33
(2,261)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	6	1.33
(2,261)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	6	1.33
(2,261)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	6	1.33
(2,252)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	6	1.33
(2,252)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	6	1.33
(2,242)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HD1	4	1.33
(2,242)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HD2	4	1.33
(2,242)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HD1	4	1.33
(2,242)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HD2	4	1.33
(1,511)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HA	3	1.33
(1,511)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HA	3	1.33
(1,511)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HA	3	1.33
(1,361)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:H	2	1.33
(1,361)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:H	3	1.33
(1,355)	1:9:A:ILE:HG12	1:11:A:TRP:H	6	1.33
(4,175)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HE1	9	1.32
(4,175)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HE2	9	1.32
(4,98)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HB2	1	1.32
(4,95)	1:11:A:TRP:H	1:24:A:PRO:HB3	4	1.32
(2,518)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HE1	9	1.32
(2,518)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HE2	9	1.32

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,369)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HB2	1	1.32
(2,357)	1:11:A:TRP:H	1:24:A:PRO:HB3	4	1.32
(1,472)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HA	2	1.32
(1,472)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HA	2	1.32
(1,472)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HA	2	1.32
(1,467)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG11	6	1.32
(1,467)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG12	6	1.32
(1,467)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG13	6	1.32
(1,424)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	5	1.32
(1,424)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	5	1.32
(1,424)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	5	1.32
(1,424)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB1	5	1.32
(1,424)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB2	5	1.32
(1,424)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB3	5	1.32
(1,418)	1:7:A:LEU:HG	1:10:A:GLN:HG2	1	1.32
(1,418)	1:7:A:LEU:HG	1:10:A:GLN:HG3	1	1.32
(1,337)	1:12:A:LEU:HA	1:16:A:GLY:H	3	1.32
(1,138)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB2	7	1.32
(4,160)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HE1	6	1.31
(4,160)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HE2	6	1.31
(4,119)	1:23:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	6	1.31
(3,285)	1:14:A:ASP:HB2	1:19:A:SER:HB3	8	1.31
(2,483)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HE1	6	1.31
(2,483)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HE2	6	1.31
(2,409)	1:23:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	6	1.31
(2,397)	1:14:A:ASP:HB2	1:19:A:SER:HB3	8	1.31
(1,312)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:HD1	5	1.31
(1,250)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG2	10	1.31
(1,250)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG2	10	1.31
(1,139)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB3	5	1.31
(1,138)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB2	1	1.31
(1,138)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB2	6	1.31
(1,118)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:H	2	1.31
(1,118)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:H	2	1.31
(4,154)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG11	4	1.3
(4,154)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG12	4	1.3
(4,154)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG13	4	1.3
(4,78)	1:11:A:TRP:HE1	1:22:A:PRO:HG2	8	1.3
(4,78)	1:11:A:TRP:HE1	1:22:A:PRO:HG3	8	1.3
(4,65)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD21	7	1.3
(4,65)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD22	7	1.3
(4,65)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD23	7	1.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,54)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE1	7	1.3
(4,54)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE2	7	1.3
(4,54)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE1	7	1.3
(4,54)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE2	7	1.3
(4,54)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE1	7	1.3
(4,54)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE2	7	1.3
(4,39)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HA	5	1.3
(4,39)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HA	5	1.3
(4,20)	1:22:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	10	1.3
(3,334)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB2	7	1.3
(3,334)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB2	7	1.3
(3,334)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB2	7	1.3
(3,234)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD21	1	1.3
(3,234)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD22	1	1.3
(3,234)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD23	1	1.3
(2,502)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB2	7	1.3
(2,502)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB2	7	1.3
(2,502)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB2	7	1.3
(2,467)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG11	4	1.3
(2,467)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG12	4	1.3
(2,467)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG13	4	1.3
(2,332)	1:11:A:TRP:HE1	1:22:A:PRO:HG2	8	1.3
(2,332)	1:11:A:TRP:HE1	1:22:A:PRO:HG3	8	1.3
(2,299)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD21	7	1.3
(2,299)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD22	7	1.3
(2,299)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD23	7	1.3
(2,298)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD21	1	1.3
(2,298)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD22	1	1.3
(2,298)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD23	1	1.3
(2,263)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE1	7	1.3
(2,263)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE2	7	1.3
(2,263)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE1	7	1.3
(2,263)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE2	7	1.3
(2,263)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE1	7	1.3
(2,263)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE2	7	1.3
(2,229)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HA	5	1.3
(2,229)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HA	5	1.3
(2,108)	1:22:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	10	1.3
(1,511)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HA	4	1.3
(1,511)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HA	4	1.3
(1,511)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HA	4	1.3
(1,461)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD21	3	1.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,461)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD22	3	1.3
(1,461)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD23	3	1.3
(1,418)	1:7:A:LEU:HG	1:10:A:GLN:HG2	5	1.3
(1,418)	1:7:A:LEU:HG	1:10:A:GLN:HG3	5	1.3
(1,361)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:H	4	1.3
(4,168)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB3	5	1.29
(4,168)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB3	5	1.29
(4,168)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB3	5	1.29
(4,162)	1:24:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:HA	1	1.29
(4,132)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	3	1.29
(4,132)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	3	1.29
(4,132)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	3	1.29
(4,132)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	3	1.29
(4,132)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	3	1.29
(4,132)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	3	1.29
(4,132)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	3	1.29
(4,132)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	3	1.29
(4,132)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	3	1.29
(4,131)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG11	5	1.29
(4,131)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG12	5	1.29
(4,131)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG13	5	1.29
(4,131)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG11	5	1.29
(4,131)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG12	5	1.29
(4,131)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG13	5	1.29
(4,131)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG11	5	1.29
(4,131)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG12	5	1.29
(4,131)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG13	5	1.29
(4,102)	1:7:A:LEU:HG	1:24:A:PRO:HA	9	1.29
(4,97)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:H	9	1.29
(4,97)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:H	9	1.29
(4,97)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:H	9	1.29
(4,53)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	8	1.29
(4,53)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	8	1.29
(4,53)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	8	1.29
(4,53)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	8	1.29
(4,53)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	8	1.29
(4,53)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	8	1.29
(4,20)	1:22:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	9	1.29
(3,234)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD21	9	1.29
(3,234)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD22	9	1.29
(3,234)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD23	9	1.29
(2,501)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB3	5	1.29

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,501)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB3	5	1.29
(2,501)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB3	5	1.29
(2,486)	1:24:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:HA	1	1.29
(2,428)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	3	1.29
(2,428)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	3	1.29
(2,428)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	3	1.29
(2,428)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	3	1.29
(2,428)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	3	1.29
(2,428)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	3	1.29
(2,428)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	3	1.29
(2,428)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	3	1.29
(2,428)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	3	1.29
(2,427)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG11	5	1.29
(2,427)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG12	5	1.29
(2,427)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG13	5	1.29
(2,427)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG11	5	1.29
(2,427)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG12	5	1.29
(2,427)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG13	5	1.29
(2,427)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG11	5	1.29
(2,427)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG12	5	1.29
(2,427)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG13	5	1.29
(2,373)	1:7:A:LEU:HG	1:24:A:PRO:HA	9	1.29
(2,366)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:H	9	1.29
(2,366)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:H	9	1.29
(2,366)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:H	9	1.29
(2,298)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD21	9	1.29
(2,298)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD22	9	1.29
(2,298)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD23	9	1.29
(2,262)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	8	1.29
(2,262)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	8	1.29
(2,262)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	8	1.29
(2,262)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	8	1.29
(2,262)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	8	1.29
(2,262)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	8	1.29
(2,108)	1:22:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	9	1.29
(1,472)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HA	4	1.29
(1,472)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HA	4	1.29
(1,472)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HA	4	1.29
(1,449)	1:12:A:LEU:HD11	1:14:A:ASP:HB2	6	1.29
(1,449)	1:12:A:LEU:HD12	1:14:A:ASP:HB2	6	1.29
(1,449)	1:12:A:LEU:HD13	1:14:A:ASP:HB2	6	1.29
(1,318)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HA	5	1.29

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,138)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB2	5	1.29
(1,118)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:H	3	1.29
(1,118)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:H	3	1.29
(4,168)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB3	9	1.28
(4,168)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB3	9	1.28
(4,168)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB3	9	1.28
(4,113)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD2	8	1.28
(4,113)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD2	8	1.28
(4,105)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	2	1.28
(4,105)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	10	1.28
(4,97)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:H	10	1.28
(4,97)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:H	10	1.28
(4,97)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:H	10	1.28
(3,234)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD21	3	1.28
(3,234)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD22	3	1.28
(3,234)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD23	3	1.28
(3,204)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	7	1.28
(3,204)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	7	1.28
(2,501)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB3	9	1.28
(2,501)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB3	9	1.28
(2,501)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB3	9	1.28
(2,401)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD2	8	1.28
(2,401)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD2	8	1.28
(2,382)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	2	1.28
(2,382)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	10	1.28
(2,366)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:H	10	1.28
(2,366)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:H	10	1.28
(2,366)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:H	10	1.28
(2,298)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD21	3	1.28
(2,298)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD22	3	1.28
(2,298)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD23	3	1.28
(2,252)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	7	1.28
(2,252)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	7	1.28
(1,511)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HA	8	1.28
(1,511)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HA	8	1.28
(1,511)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HA	8	1.28
(1,461)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD21	10	1.28
(1,461)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD22	10	1.28
(1,461)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD23	10	1.28
(1,444)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HB2	4	1.28
(4,168)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB3	1	1.27
(4,168)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB3	1	1.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,168)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB3	1	1.27
(4,168)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB3	2	1.27
(4,168)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB3	2	1.27
(4,168)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB3	2	1.27
(4,161)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HA	10	1.27
(4,131)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG11	4	1.27
(4,131)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG12	4	1.27
(4,131)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG13	4	1.27
(4,131)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG11	4	1.27
(4,131)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG12	4	1.27
(4,131)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG13	4	1.27
(4,131)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG11	4	1.27
(4,131)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG12	4	1.27
(4,131)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG13	4	1.27
(4,122)	1:1:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD2	2	1.27
(4,122)	1:1:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD3	2	1.27
(4,122)	1:1:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD2	2	1.27
(4,102)	1:7:A:LEU:HG	1:24:A:PRO:HA	10	1.27
(4,98)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HB2	3	1.27
(4,65)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD21	1	1.27
(4,65)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD22	1	1.27
(4,65)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD23	1	1.27
(4,39)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HA	1	1.27
(4,39)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HA	1	1.27
(4,27)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:HB3	10	1.27
(3,285)	1:14:A:ASP:HB2	1:19:A:SER:HB3	1	1.27
(2,501)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB3	1	1.27
(2,501)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB3	1	1.27
(2,501)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB3	1	1.27
(2,501)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB3	2	1.27
(2,501)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB3	2	1.27
(2,501)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB3	2	1.27
(2,485)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HA	10	1.27
(2,427)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG11	4	1.27
(2,427)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG12	4	1.27
(2,427)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG13	4	1.27
(2,427)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG11	4	1.27
(2,427)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG12	4	1.27
(2,427)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG13	4	1.27
(2,427)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG11	4	1.27
(2,427)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG12	4	1.27
(2,427)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG13	4	1.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,413)	1:1:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD2	2	1.27
(2,413)	1:1:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD3	2	1.27
(2,413)	1:1:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD2	2	1.27
(2,397)	1:14:A:ASP:HB2	1:19:A:SER:HB3	1	1.27
(2,373)	1:7:A:LEU:HG	1:24:A:PRO:HA	10	1.27
(2,369)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HB2	3	1.27
(2,299)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD21	1	1.27
(2,299)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD22	1	1.27
(2,299)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD23	1	1.27
(2,229)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HA	1	1.27
(2,229)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HA	1	1.27
(2,140)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:HB3	10	1.27
(1,361)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:H	5	1.27
(1,361)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:H	6	1.27
(1,140)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:HB3	5	1.27
(4,168)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB3	4	1.26
(4,168)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB3	4	1.26
(4,168)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB3	4	1.26
(4,168)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB3	10	1.26
(4,168)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB3	10	1.26
(4,168)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB3	10	1.26
(4,163)	1:8:A:TYR:HB2	1:24:A:PRO:HA	7	1.26
(4,104)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:HB2	9	1.26
(4,104)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:HB3	9	1.26
(4,103)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	6	1.26
(4,103)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB3	6	1.26
(4,43)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HB2	3	1.26
(4,43)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HB2	3	1.26
(4,39)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HA	6	1.26
(4,39)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HA	6	1.26
(4,27)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:HB3	2	1.26
(3,234)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD21	8	1.26
(3,234)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD22	8	1.26
(3,234)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD23	8	1.26
(2,501)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB3	4	1.26
(2,501)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB3	4	1.26
(2,501)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB3	4	1.26
(2,501)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB3	10	1.26
(2,501)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB3	10	1.26
(2,501)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB3	10	1.26
(2,487)	1:8:A:TYR:HB2	1:24:A:PRO:HA	7	1.26
(2,380)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:HB2	9	1.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,380)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:HB3	9	1.26
(2,374)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	6	1.26
(2,374)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB3	6	1.26
(2,298)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD21	8	1.26
(2,298)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD22	8	1.26
(2,298)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD23	8	1.26
(2,237)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HB2	3	1.26
(2,237)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HB2	3	1.26
(2,229)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HA	6	1.26
(2,229)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HA	6	1.26
(2,140)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:HB3	2	1.26
(1,461)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD21	8	1.26
(1,461)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD22	8	1.26
(1,461)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD23	8	1.26
(1,461)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD21	9	1.26
(1,461)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD22	9	1.26
(1,461)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD23	9	1.26
(1,457)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HD2	5	1.26
(1,457)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HD2	5	1.26
(1,457)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HD2	5	1.26
(1,457)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HD2	6	1.26
(1,457)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HD2	6	1.26
(1,457)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HD2	6	1.26
(1,455)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD21	4	1.26
(1,455)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD22	4	1.26
(1,455)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD23	4	1.26
(1,455)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD21	8	1.26
(1,455)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD22	8	1.26
(1,455)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD23	8	1.26
(1,284)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB3	2	1.26
(1,250)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG2	8	1.26
(1,250)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG2	8	1.26
(1,118)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:H	9	1.26
(1,118)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:H	9	1.26
(4,168)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB3	6	1.25
(4,168)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB3	6	1.25
(4,168)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB3	6	1.25
(4,124)	1:7:A:LEU:HB2	1:8:A:TYR:HB3	5	1.25
(4,105)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	4	1.25
(4,87)	1:12:A:LEU:HD11	1:14:A:ASP:H	5	1.25
(4,87)	1:12:A:LEU:HD12	1:14:A:ASP:H	5	1.25
(4,87)	1:12:A:LEU:HD13	1:14:A:ASP:H	5	1.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,285)	1:14:A:ASP:HB2	1:19:A:SER:HB3	7	1.25
(2,501)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB3	6	1.25
(2,501)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB3	6	1.25
(2,501)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB3	6	1.25
(2,415)	1:7:A:LEU:HB2	1:8:A:TYR:HB3	5	1.25
(2,397)	1:14:A:ASP:HB2	1:19:A:SER:HB3	7	1.25
(2,382)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	4	1.25
(2,346)	1:12:A:LEU:HD11	1:14:A:ASP:H	5	1.25
(2,346)	1:12:A:LEU:HD12	1:14:A:ASP:H	5	1.25
(2,346)	1:12:A:LEU:HD13	1:14:A:ASP:H	5	1.25
(1,472)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HA	8	1.25
(1,472)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HA	8	1.25
(1,472)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HA	8	1.25
(1,470)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	3	1.25
(1,470)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	3	1.25
(1,470)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	3	1.25
(1,457)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HD2	3	1.25
(1,457)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HD2	3	1.25
(1,457)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HD2	3	1.25
(1,455)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD21	3	1.25
(1,455)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD22	3	1.25
(1,455)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD23	3	1.25
(1,355)	1:9:A:ILE:HG12	1:11:A:TRP:H	8	1.25
(1,318)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HA	8	1.25
(1,284)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB3	1	1.25
(1,284)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB3	5	1.25
(1,253)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HG2	8	1.25
(1,253)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HG2	8	1.25
(1,235)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HA	6	1.25
(1,235)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HA	6	1.25
(1,132)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HG	5	1.25
(4,141)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HB2	6	1.24
(4,135)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:HG	7	1.24
(4,135)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:HG	7	1.24
(4,135)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:HG	7	1.24
(4,102)	1:7:A:LEU:HG	1:24:A:PRO:HA	3	1.24
(4,97)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:H	1	1.24
(4,97)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:H	1	1.24
(4,97)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:H	1	1.24
(4,70)	1:11:A:TRP:HE3	1:24:A:PRO:HA	2	1.24
(4,50)	1:7:A:LEU:HG	1:8:A:TYR:HD1	4	1.24
(4,50)	1:7:A:LEU:HG	1:8:A:TYR:HD2	4	1.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,50)	1:7:A:LEU:HG	1:8:A:TYR:HD1	5	1.24
(4,50)	1:7:A:LEU:HG	1:8:A:TYR:HD2	5	1.24
(4,20)	1:22:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	5	1.24
(3,254)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB3	10	1.24
(2,444)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HB2	6	1.24
(2,435)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:HG	7	1.24
(2,435)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:HG	7	1.24
(2,435)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:HG	7	1.24
(2,373)	1:7:A:LEU:HG	1:24:A:PRO:HA	3	1.24
(2,366)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:H	1	1.24
(2,366)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:H	1	1.24
(2,366)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:H	1	1.24
(2,331)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB3	10	1.24
(2,313)	1:11:A:TRP:HE3	1:24:A:PRO:HA	2	1.24
(2,254)	1:7:A:LEU:HG	1:8:A:TYR:HD1	4	1.24
(2,254)	1:7:A:LEU:HG	1:8:A:TYR:HD2	4	1.24
(2,254)	1:7:A:LEU:HG	1:8:A:TYR:HD1	5	1.24
(2,254)	1:7:A:LEU:HG	1:8:A:TYR:HD2	5	1.24
(2,108)	1:22:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	5	1.24
(1,461)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD21	2	1.24
(1,461)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD22	2	1.24
(1,461)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD23	2	1.24
(1,461)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD21	7	1.24
(1,461)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD22	7	1.24
(1,461)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD23	7	1.24
(1,457)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HD2	8	1.24
(1,457)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HD2	8	1.24
(1,457)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HD2	8	1.24
(1,444)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HB2	10	1.24
(1,307)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG2	3	1.24
(1,307)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG3	3	1.24
(1,284)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB3	3	1.24
(1,241)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HE1	1	1.24
(1,241)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HE2	1	1.24
(1,241)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HE1	1	1.24
(1,241)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HE2	1	1.24
(3,254)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB3	9	1.23
(3,231)	1:11:A:TRP:HZ3	1:23:A:PRO:HG2	5	1.23
(2,331)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB3	9	1.23
(2,292)	1:11:A:TRP:HZ3	1:23:A:PRO:HG2	5	1.23
(1,457)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HD2	1	1.23
(1,457)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HD2	1	1.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,457)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HD2	1	1.23
(1,455)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD21	1	1.23
(1,455)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD22	1	1.23
(1,455)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD23	1	1.23
(1,455)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD21	2	1.23
(1,455)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD22	2	1.23
(1,455)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD23	2	1.23
(1,455)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD21	9	1.23
(1,455)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD22	9	1.23
(1,455)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD23	9	1.23
(1,444)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HB2	9	1.23
(1,434)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB2	1	1.23
(1,434)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB2	1	1.23
(1,434)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB2	1	1.23
(1,434)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB3	1	1.23
(1,434)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB3	1	1.23
(1,434)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB3	1	1.23
(1,359)	1:10:A:GLN:HG2	1:11:A:TRP:H	7	1.23
(1,359)	1:10:A:GLN:HG3	1:11:A:TRP:H	7	1.23
(1,142)	1:8:A:TYR:H	1:8:A:TYR:HB3	2	1.23
(4,132)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	10	1.22
(4,132)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	10	1.22
(4,132)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	10	1.22
(4,132)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	10	1.22
(4,132)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	10	1.22
(4,132)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	10	1.22
(4,132)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	10	1.22
(4,132)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	10	1.22
(4,132)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	10	1.22
(4,112)	1:23:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HD3	6	1.22
(4,110)	1:23:A:PRO:HG2	1:25:A:SER:HB2	9	1.22
(4,110)	1:23:A:PRO:HG2	1:25:A:SER:HB3	9	1.22
(4,67)	1:11:A:TRP:HZ3	1:23:A:PRO:HB2	8	1.22
(4,46)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HD1	7	1.22
(4,46)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HD2	7	1.22
(4,46)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HD1	7	1.22
(4,46)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HD2	7	1.22
(4,20)	1:22:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	1	1.22
(3,259)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD11	5	1.22
(3,259)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD12	5	1.22
(3,259)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD13	5	1.22
(2,428)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	10	1.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,428)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	10	1.22
(2,428)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	10	1.22
(2,428)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	10	1.22
(2,428)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	10	1.22
(2,428)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	10	1.22
(2,428)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	10	1.22
(2,428)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	10	1.22
(2,428)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	10	1.22
(2,396)	1:23:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HD3	6	1.22
(2,392)	1:23:A:PRO:HG2	1:25:A:SER:HB2	9	1.22
(2,392)	1:23:A:PRO:HG2	1:25:A:SER:HB3	9	1.22
(2,345)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD11	5	1.22
(2,345)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD12	5	1.22
(2,345)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD13	5	1.22
(2,303)	1:11:A:TRP:HZ3	1:23:A:PRO:HB2	8	1.22
(2,242)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HD1	7	1.22
(2,242)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HD2	7	1.22
(2,242)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HD1	7	1.22
(2,242)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HD2	7	1.22
(2,108)	1:22:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	1	1.22
(1,467)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG11	5	1.22
(1,467)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG12	5	1.22
(1,467)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG13	5	1.22
(1,457)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HD2	2	1.22
(1,457)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HD2	2	1.22
(1,457)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HD2	2	1.22
(1,455)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD21	10	1.22
(1,455)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD22	10	1.22
(1,455)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD23	10	1.22
(1,434)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB2	7	1.22
(1,434)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB2	7	1.22
(1,434)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB2	7	1.22
(1,434)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB3	7	1.22
(1,434)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB3	7	1.22
(1,434)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB3	7	1.22
(1,418)	1:7:A:LEU:HG	1:10:A:GLN:HG2	6	1.22
(1,418)	1:7:A:LEU:HG	1:10:A:GLN:HG3	6	1.22
(1,337)	1:12:A:LEU:HA	1:16:A:GLY:H	10	1.22
(1,250)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG2	9	1.22
(1,250)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG2	9	1.22
(1,158)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG13	1	1.22
(1,158)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG13	7	1.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,142)	1:8:A:TYR:H	1:8:A:TYR:HB3	8	1.22
(1,29)	1:14:A:ASP:H	1:14:A:ASP:HB2	9	1.22
(4,135)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:HG	9	1.21
(4,135)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:HG	9	1.21
(4,135)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:HG	9	1.21
(4,131)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG11	7	1.21
(4,131)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG12	7	1.21
(4,131)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG13	7	1.21
(4,131)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG11	7	1.21
(4,131)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG12	7	1.21
(4,131)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG13	7	1.21
(4,131)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG11	7	1.21
(4,131)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG12	7	1.21
(4,131)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG13	7	1.21
(4,101)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB1	5	1.21
(4,101)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB2	5	1.21
(4,101)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB3	5	1.21
(4,7)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE1	9	1.21
(4,7)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE2	9	1.21
(2,435)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:HG	9	1.21
(2,435)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:HG	9	1.21
(2,435)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:HG	9	1.21
(2,427)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG11	7	1.21
(2,427)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG12	7	1.21
(2,427)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG13	7	1.21
(2,427)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG11	7	1.21
(2,427)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG12	7	1.21
(2,427)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG13	7	1.21
(2,427)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG11	7	1.21
(2,427)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG12	7	1.21
(2,427)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG13	7	1.21
(2,372)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB1	5	1.21
(2,372)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB2	5	1.21
(2,372)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB3	5	1.21
(2,21)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE1	9	1.21
(2,21)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE2	9	1.21
(1,468)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG21	4	1.21
(1,468)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG22	4	1.21
(1,468)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG23	4	1.21
(1,455)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD21	7	1.21
(1,455)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD22	7	1.21
(1,455)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD23	7	1.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,355)	1:9:A:ILE:HG12	1:11:A:TRP:H	9	1.21
(1,307)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG2	6	1.21
(1,307)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG3	6	1.21
(1,271)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD3	7	1.21
(1,250)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG2	2	1.21
(1,250)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG2	2	1.21
(1,142)	1:8:A:TYR:H	1:8:A:TYR:HB3	4	1.21
(4,102)	1:7:A:LEU:HG	1:24:A:PRO:HA	4	1.2
(4,43)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HB2	4	1.2
(4,43)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HB2	4	1.2
(4,27)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:HB3	3	1.2
(4,27)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:HB3	9	1.2
(3,334)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB2	3	1.2
(3,334)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB2	3	1.2
(3,334)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB2	3	1.2
(3,291)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HG3	2	1.2
(2,502)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB2	3	1.2
(2,502)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB2	3	1.2
(2,502)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB2	3	1.2
(2,411)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HG3	2	1.2
(2,373)	1:7:A:LEU:HG	1:24:A:PRO:HA	4	1.2
(2,237)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HB2	4	1.2
(2,237)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HB2	4	1.2
(2,140)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:HB3	3	1.2
(2,140)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:HB3	9	1.2
(1,355)	1:9:A:ILE:HG12	1:11:A:TRP:H	10	1.2
(1,337)	1:12:A:LEU:HA	1:16:A:GLY:H	7	1.2
(1,318)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HA	9	1.2
(1,271)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD3	6	1.2
(1,142)	1:8:A:TYR:H	1:8:A:TYR:HB3	3	1.2
(1,132)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HG	8	1.2
(1,118)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:H	8	1.2
(1,118)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:H	8	1.2
(4,105)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	9	1.19
(4,87)	1:12:A:LEU:HD11	1:14:A:ASP:H	1	1.19
(4,87)	1:12:A:LEU:HD12	1:14:A:ASP:H	1	1.19
(4,87)	1:12:A:LEU:HD13	1:14:A:ASP:H	1	1.19
(4,41)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HE1	6	1.19
(4,41)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HE2	6	1.19
(4,20)	1:22:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	3	1.19
(4,8)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	3	1.19
(4,8)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	3	1.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,291)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HG3	1	1.19
(3,291)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HG3	3	1.19
(3,291)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HG3	4	1.19
(2,411)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HG3	1	1.19
(2,411)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HG3	3	1.19
(2,411)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HG3	4	1.19
(2,382)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	9	1.19
(2,346)	1:12:A:LEU:HD11	1:14:A:ASP:H	1	1.19
(2,346)	1:12:A:LEU:HD12	1:14:A:ASP:H	1	1.19
(2,346)	1:12:A:LEU:HD13	1:14:A:ASP:H	1	1.19
(2,233)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HE1	6	1.19
(2,233)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HE2	6	1.19
(2,108)	1:22:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	3	1.19
(2,24)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	3	1.19
(2,24)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	3	1.19
(1,472)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HA	5	1.19
(1,472)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HA	5	1.19
(1,472)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HA	5	1.19
(1,449)	1:12:A:LEU:HD11	1:14:A:ASP:HB2	7	1.19
(1,449)	1:12:A:LEU:HD12	1:14:A:ASP:HB2	7	1.19
(1,449)	1:12:A:LEU:HD13	1:14:A:ASP:HB2	7	1.19
(1,372)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB1	7	1.19
(1,372)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB2	7	1.19
(1,372)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB3	7	1.19
(1,355)	1:9:A:ILE:HG12	1:11:A:TRP:H	7	1.19
(1,337)	1:12:A:LEU:HA	1:16:A:GLY:H	9	1.19
(1,307)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG2	2	1.19
(1,307)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG3	2	1.19
(1,29)	1:14:A:ASP:H	1:14:A:ASP:HB2	4	1.19
(4,135)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:HG	3	1.18
(4,135)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:HG	3	1.18
(4,135)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:HG	3	1.18
(4,66)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD11	6	1.18
(4,66)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD12	6	1.18
(4,66)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD13	6	1.18
(4,54)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE1	1	1.18
(4,54)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE2	1	1.18
(4,54)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE1	1	1.18
(4,54)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE2	1	1.18
(4,54)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE1	1	1.18
(4,54)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE2	1	1.18
(4,50)	1:7:A:LEU:HG	1:8:A:TYR:HD1	8	1.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,50)	1:7:A:LEU:HG	1:8:A:TYR:HD2	8	1.18
(4,43)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HB2	5	1.18
(4,43)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HB2	5	1.18
(4,8)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	8	1.18
(4,8)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	8	1.18
(3,334)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB2	8	1.18
(3,334)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB2	8	1.18
(3,334)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB2	8	1.18
(3,259)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD11	6	1.18
(3,259)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD12	6	1.18
(3,259)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD13	6	1.18
(3,231)	1:11:A:TRP:HZ3	1:23:A:PRO:HG2	1	1.18
(2,502)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB2	8	1.18
(2,502)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB2	8	1.18
(2,502)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB2	8	1.18
(2,435)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:HG	3	1.18
(2,435)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:HG	3	1.18
(2,435)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:HG	3	1.18
(2,345)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD11	6	1.18
(2,345)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD12	6	1.18
(2,345)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD13	6	1.18
(2,302)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD11	6	1.18
(2,302)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD12	6	1.18
(2,302)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD13	6	1.18
(2,292)	1:11:A:TRP:HZ3	1:23:A:PRO:HG2	1	1.18
(2,263)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE1	1	1.18
(2,263)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE2	1	1.18
(2,263)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE1	1	1.18
(2,263)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE2	1	1.18
(2,263)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE1	1	1.18
(2,263)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE2	1	1.18
(2,254)	1:7:A:LEU:HG	1:8:A:TYR:HD1	8	1.18
(2,254)	1:7:A:LEU:HG	1:8:A:TYR:HD2	8	1.18
(2,237)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HB2	5	1.18
(2,237)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HB2	5	1.18
(2,24)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	8	1.18
(2,24)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	8	1.18
(1,357)	1:11:A:TRP:H	1:24:A:PRO:HB3	1	1.18
(1,288)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG3	10	1.18
(1,267)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD21	5	1.18
(1,267)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD22	5	1.18
(1,267)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD23	5	1.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,267)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD21	5	1.18
(1,267)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD22	5	1.18
(1,267)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD23	5	1.18
(1,232)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HD1	9	1.18
(1,232)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HD2	9	1.18
(4,97)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:H	8	1.17
(4,97)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:H	8	1.17
(4,97)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:H	8	1.17
(4,70)	1:11:A:TRP:HE3	1:24:A:PRO:HA	3	1.17
(4,9)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	6	1.17
(4,9)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	6	1.17
(4,8)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	10	1.17
(4,8)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	10	1.17
(2,366)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:H	8	1.17
(2,366)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:H	8	1.17
(2,366)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:H	8	1.17
(2,313)	1:11:A:TRP:HE3	1:24:A:PRO:HA	3	1.17
(2,25)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	6	1.17
(2,25)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	6	1.17
(2,24)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	10	1.17
(2,24)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	10	1.17
(1,461)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD21	4	1.17
(1,461)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD22	4	1.17
(1,461)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD23	4	1.17
(1,444)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HB2	3	1.17
(1,429)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG13	6	1.17
(1,429)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG13	6	1.17
(1,429)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG13	6	1.17
(1,288)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG3	3	1.17
(1,132)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HG	10	1.17
(4,162)	1:24:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:HA	2	1.16
(4,128)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	1	1.16
(4,128)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	1	1.16
(4,128)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	1	1.16
(4,113)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD2	7	1.16
(4,113)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD2	7	1.16
(4,7)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE1	10	1.16
(4,7)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE2	10	1.16
(2,486)	1:24:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:HA	2	1.16
(2,420)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	1	1.16
(2,420)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	1	1.16
(2,420)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	1	1.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,401)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD2	7	1.16
(2,401)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD2	7	1.16
(2,21)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE1	10	1.16
(2,21)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE2	10	1.16
(1,461)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD21	1	1.16
(1,461)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD22	1	1.16
(1,461)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD23	1	1.16
(1,449)	1:12:A:LEU:HD11	1:14:A:ASP:HB2	8	1.16
(1,449)	1:12:A:LEU:HD12	1:14:A:ASP:HB2	8	1.16
(1,449)	1:12:A:LEU:HD13	1:14:A:ASP:HB2	8	1.16
(1,362)	1:24:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	10	1.16
(1,288)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG3	2	1.16
(1,288)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG3	9	1.16
(1,284)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB3	6	1.16
(1,271)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD3	4	1.16
(1,132)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HG	2	1.16
(1,132)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HG	9	1.16
(1,29)	1:14:A:ASP:H	1:14:A:ASP:HB2	2	1.16
(4,103)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	10	1.15
(4,103)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB3	10	1.15
(4,67)	1:11:A:TRP:HZ3	1:23:A:PRO:HB2	5	1.15
(3,291)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HG3	6	1.15
(3,234)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD21	5	1.15
(3,234)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD22	5	1.15
(3,234)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD23	5	1.15
(2,411)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HG3	6	1.15
(2,374)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	10	1.15
(2,374)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB3	10	1.15
(2,303)	1:11:A:TRP:HZ3	1:23:A:PRO:HB2	5	1.15
(2,298)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD21	5	1.15
(2,298)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD22	5	1.15
(2,298)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD23	5	1.15
(1,429)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG13	5	1.15
(1,429)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG13	5	1.15
(1,429)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG13	5	1.15
(1,413)	1:1:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD2	6	1.15
(1,413)	1:1:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD3	6	1.15
(1,413)	1:1:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD2	6	1.15
(1,413)	1:1:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD3	6	1.15
(1,366)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:H	5	1.15
(1,366)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:H	5	1.15
(1,366)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:H	5	1.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,362)	1:24:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	8	1.15
(1,362)	1:24:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	9	1.15
(1,307)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG2	10	1.15
(1,307)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG3	10	1.15
(1,250)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG2	4	1.15
(1,250)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG2	4	1.15
(1,132)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HG	4	1.15
(1,132)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HG	6	1.15
(1,118)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:H	1	1.15
(1,118)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:H	1	1.15
(4,170)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	6	1.14
(4,170)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	6	1.14
(4,170)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	6	1.14
(4,169)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	5	1.14
(4,169)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	5	1.14
(4,169)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	5	1.14
(4,162)	1:24:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:HA	3	1.14
(4,156)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	10	1.14
(4,156)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	10	1.14
(4,156)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	10	1.14
(4,87)	1:12:A:LEU:HD11	1:14:A:ASP:H	8	1.14
(4,87)	1:12:A:LEU:HD12	1:14:A:ASP:H	8	1.14
(4,87)	1:12:A:LEU:HD13	1:14:A:ASP:H	8	1.14
(4,70)	1:11:A:TRP:HE3	1:24:A:PRO:HA	9	1.14
(4,9)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	7	1.14
(4,9)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	7	1.14
(3,291)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HG3	7	1.14
(3,254)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB3	6	1.14
(3,234)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD21	6	1.14
(3,234)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD22	6	1.14
(3,234)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD23	6	1.14
(2,507)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	6	1.14
(2,507)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	6	1.14
(2,507)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	6	1.14
(2,506)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	5	1.14
(2,506)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	5	1.14
(2,506)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	5	1.14
(2,486)	1:24:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:HA	3	1.14
(2,470)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	10	1.14
(2,470)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	10	1.14
(2,470)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	10	1.14
(2,411)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HG3	7	1.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,346)	1:12:A:LEU:HD11	1:14:A:ASP:H	8	1.14
(2,346)	1:12:A:LEU:HD12	1:14:A:ASP:H	8	1.14
(2,346)	1:12:A:LEU:HD13	1:14:A:ASP:H	8	1.14
(2,331)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB3	6	1.14
(2,313)	1:11:A:TRP:HE3	1:24:A:PRO:HA	9	1.14
(2,298)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD21	6	1.14
(2,298)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD22	6	1.14
(2,298)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD23	6	1.14
(2,25)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	7	1.14
(2,25)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	7	1.14
(1,455)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD21	5	1.14
(1,455)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD22	5	1.14
(1,455)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD23	5	1.14
(1,418)	1:7:A:LEU:HG	1:10:A:GLN:HG2	4	1.14
(1,418)	1:7:A:LEU:HG	1:10:A:GLN:HG3	4	1.14
(1,379)	1:11:A:TRP:HA	1:14:A:ASP:HB2	9	1.14
(1,355)	1:9:A:ILE:HG12	1:11:A:TRP:H	1	1.14
(1,288)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG3	4	1.14
(1,230)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HA	4	1.14
(1,230)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HA	4	1.14
(1,132)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HG	3	1.14
(4,135)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:HG	10	1.13
(4,135)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:HG	10	1.13
(4,135)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:HG	10	1.13
(4,132)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	9	1.13
(4,132)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	9	1.13
(4,132)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	9	1.13
(4,132)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	9	1.13
(4,132)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	9	1.13
(4,132)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	9	1.13
(4,132)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	9	1.13
(4,132)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	9	1.13
(4,132)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	9	1.13
(4,79)	1:11:A:TRP:HE1	1:23:A:PRO:HA	6	1.13
(4,20)	1:22:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	8	1.13
(4,8)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	4	1.13
(4,8)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	4	1.13
(4,5)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	1	1.13
(4,5)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	1	1.13
(4,5)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	1	1.13
(3,291)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HG3	5	1.13
(3,231)	1:11:A:TRP:HZ3	1:23:A:PRO:HG2	9	1.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,210)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	8	1.13
(3,210)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	8	1.13
(3,210)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	8	1.13
(3,210)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	8	1.13
(3,210)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	8	1.13
(3,210)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	8	1.13
(2,435)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:HG	10	1.13
(2,435)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:HG	10	1.13
(2,435)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:HG	10	1.13
(2,428)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	9	1.13
(2,428)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	9	1.13
(2,428)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	9	1.13
(2,428)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	9	1.13
(2,428)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	9	1.13
(2,428)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	9	1.13
(2,428)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	9	1.13
(2,428)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	9	1.13
(2,428)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	9	1.13
(2,411)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HG3	5	1.13
(2,333)	1:11:A:TRP:HE1	1:23:A:PRO:HA	6	1.13
(2,292)	1:11:A:TRP:HZ3	1:23:A:PRO:HG2	9	1.13
(2,264)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	8	1.13
(2,264)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	8	1.13
(2,264)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	8	1.13
(2,264)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	8	1.13
(2,264)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	8	1.13
(2,264)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	8	1.13
(2,108)	1:22:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	8	1.13
(2,24)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	4	1.13
(2,24)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	4	1.13
(2,16)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	1	1.13
(2,16)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	1	1.13
(2,16)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	1	1.13
(1,418)	1:7:A:LEU:HG	1:10:A:GLN:HG2	8	1.13
(1,418)	1:7:A:LEU:HG	1:10:A:GLN:HG3	8	1.13
(1,330)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HG2	6	1.13
(1,318)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HA	10	1.13
(1,132)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HG	7	1.13
(4,78)	1:11:A:TRP:HE1	1:22:A:PRO:HG2	7	1.12
(4,78)	1:11:A:TRP:HE1	1:22:A:PRO:HG3	7	1.12
(3,291)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HG3	8	1.12
(2,411)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HG3	8	1.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,332)	1:11:A:TRP:HE1	1:22:A:PRO:HG2	7	1.12
(2,332)	1:11:A:TRP:HE1	1:22:A:PRO:HG3	7	1.12
(1,475)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:HE3	2	1.12
(1,475)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:HE3	2	1.12
(1,467)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG11	1	1.12
(1,467)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG12	1	1.12
(1,467)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG13	1	1.12
(1,379)	1:11:A:TRP:HA	1:14:A:ASP:HB2	2	1.12
(1,318)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HA	6	1.12
(1,304)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HG3	9	1.12
(1,288)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG3	5	1.12
(1,266)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD21	6	1.12
(1,266)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD22	6	1.12
(1,266)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD23	6	1.12
(1,266)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD21	6	1.12
(1,266)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD22	6	1.12
(1,266)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD23	6	1.12
(1,262)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	1	1.12
(1,262)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	1	1.12
(1,262)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	1	1.12
(1,262)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	1	1.12
(1,262)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	1	1.12
(1,262)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	1	1.12
(1,262)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	4	1.12
(1,262)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	4	1.12
(1,262)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	4	1.12
(1,262)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	4	1.12
(1,262)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	4	1.12
(1,262)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	4	1.12
(1,232)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HD1	1	1.12
(1,232)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HD2	1	1.12
(1,140)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:HB3	7	1.12
(4,175)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HE1	5	1.11
(4,175)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HE2	5	1.11
(4,161)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HA	3	1.11
(4,135)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:HG	2	1.11
(4,135)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:HG	2	1.11
(4,135)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:HG	2	1.11
(4,119)	1:23:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	5	1.11
(4,103)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	4	1.11
(4,103)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB3	4	1.11
(4,87)	1:12:A:LEU:HD11	1:14:A:ASP:H	6	1.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,87)	1:12:A:LEU:HD12	1:14:A:ASP:H	6	1.11
(4,87)	1:12:A:LEU:HD13	1:14:A:ASP:H	6	1.11
(4,70)	1:11:A:TRP:HE3	1:24:A:PRO:HA	10	1.11
(3,265)	1:21:A:ARG:H	1:22:A:PRO:HD2	9	1.11
(3,231)	1:11:A:TRP:HZ3	1:23:A:PRO:HG2	10	1.11
(2,518)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HE1	5	1.11
(2,518)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HE2	5	1.11
(2,485)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HA	3	1.11
(2,435)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:HG	2	1.11
(2,435)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:HG	2	1.11
(2,435)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:HG	2	1.11
(2,409)	1:23:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	5	1.11
(2,374)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	4	1.11
(2,374)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB3	4	1.11
(2,360)	1:21:A:ARG:H	1:22:A:PRO:HD2	9	1.11
(2,346)	1:12:A:LEU:HD11	1:14:A:ASP:H	6	1.11
(2,346)	1:12:A:LEU:HD12	1:14:A:ASP:H	6	1.11
(2,346)	1:12:A:LEU:HD13	1:14:A:ASP:H	6	1.11
(2,313)	1:11:A:TRP:HE3	1:24:A:PRO:HA	10	1.11
(2,292)	1:11:A:TRP:HZ3	1:23:A:PRO:HG2	10	1.11
(1,475)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:HE3	1	1.11
(1,475)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:HE3	1	1.11
(1,457)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HD2	7	1.11
(1,457)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HD2	7	1.11
(1,457)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HD2	7	1.11
(1,455)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD21	6	1.11
(1,455)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD22	6	1.11
(1,455)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD23	6	1.11
(1,449)	1:12:A:LEU:HD11	1:14:A:ASP:HB2	1	1.11
(1,449)	1:12:A:LEU:HD12	1:14:A:ASP:HB2	1	1.11
(1,449)	1:12:A:LEU:HD13	1:14:A:ASP:HB2	1	1.11
(1,444)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HB2	1	1.11
(1,437)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG2	2	1.11
(1,437)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG2	2	1.11
(1,437)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG2	2	1.11
(1,437)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG3	2	1.11
(1,437)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG3	2	1.11
(1,437)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG3	2	1.11
(1,324)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HZ3	6	1.11
(1,324)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HZ3	6	1.11
(1,307)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG2	9	1.11
(1,307)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG3	9	1.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,304)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HG3	10	1.11
(1,288)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG3	6	1.11
(1,267)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD21	3	1.11
(1,267)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD22	3	1.11
(1,267)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD23	3	1.11
(1,267)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD21	3	1.11
(1,267)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD22	3	1.11
(1,267)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD23	3	1.11
(1,242)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HD1	5	1.11
(1,242)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HD2	5	1.11
(1,242)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HD1	5	1.11
(1,242)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HD2	5	1.11
(4,98)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HB2	4	1.1
(4,65)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD21	10	1.1
(4,65)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD22	10	1.1
(4,65)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD23	10	1.1
(4,9)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	1	1.1
(4,9)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	1	1.1
(4,7)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE1	2	1.1
(4,7)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE2	2	1.1
(3,265)	1:21:A:ARG:H	1:22:A:PRO:HD2	5	1.1
(3,201)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HB3	5	1.1
(3,201)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HB3	5	1.1
(2,369)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HB2	4	1.1
(2,360)	1:21:A:ARG:H	1:22:A:PRO:HD2	5	1.1
(2,299)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD21	10	1.1
(2,299)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD22	10	1.1
(2,299)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD23	10	1.1
(2,248)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HB3	5	1.1
(2,248)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HB3	5	1.1
(2,25)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	1	1.1
(2,25)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	1	1.1
(2,21)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE1	2	1.1
(2,21)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE2	2	1.1
(1,429)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG13	2	1.1
(1,429)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG13	2	1.1
(1,429)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG13	2	1.1
(1,429)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG13	3	1.1
(1,429)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG13	3	1.1
(1,429)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG13	3	1.1
(1,429)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG13	9	1.1
(1,429)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG13	9	1.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,429)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG13	9	1.1
(1,357)	1:11:A:TRP:H	1:24:A:PRO:HB3	7	1.1
(1,307)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG2	1	1.1
(1,307)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG3	1	1.1
(1,271)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD3	8	1.1
(1,132)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HG	1	1.1
(1,118)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:H	10	1.1
(1,118)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:H	10	1.1
(4,135)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:HG	5	1.09
(4,135)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:HG	5	1.09
(4,135)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:HG	5	1.09
(4,132)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	8	1.09
(4,132)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	8	1.09
(4,132)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	8	1.09
(4,132)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	8	1.09
(4,132)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	8	1.09
(4,132)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	8	1.09
(4,132)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	8	1.09
(4,132)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	8	1.09
(4,132)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	8	1.09
(4,128)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	3	1.09
(4,128)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	3	1.09
(4,128)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	3	1.09
(4,102)	1:7:A:LEU:HG	1:24:A:PRO:HA	5	1.09
(4,91)	1:21:A:ARG:H	1:22:A:PRO:HB3	4	1.09
(4,66)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD11	8	1.09
(4,66)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD12	8	1.09
(4,66)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD13	8	1.09
(4,42)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HA	2	1.09
(4,42)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HA	2	1.09
(4,20)	1:22:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	2	1.09
(4,7)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE1	3	1.09
(4,7)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE2	3	1.09
(4,5)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	7	1.09
(4,5)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	7	1.09
(4,5)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	7	1.09
(3,265)	1:21:A:ARG:H	1:22:A:PRO:HD2	6	1.09
(3,259)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD11	7	1.09
(3,259)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD12	7	1.09
(3,259)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD13	7	1.09
(3,239)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB3	6	1.09
(3,239)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB3	10	1.09

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,210)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	4	1.09
(3,210)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	4	1.09
(3,210)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	4	1.09
(3,210)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	4	1.09
(3,210)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	4	1.09
(3,210)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	4	1.09
(2,435)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:HG	5	1.09
(2,435)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:HG	5	1.09
(2,435)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:HG	5	1.09
(2,428)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	8	1.09
(2,428)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	8	1.09
(2,428)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	8	1.09
(2,428)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	8	1.09
(2,428)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	8	1.09
(2,428)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	8	1.09
(2,428)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	8	1.09
(2,428)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	8	1.09
(2,428)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	8	1.09
(2,420)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	3	1.09
(2,420)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	3	1.09
(2,420)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	3	1.09
(2,373)	1:7:A:LEU:HG	1:24:A:PRO:HA	5	1.09
(2,360)	1:21:A:ARG:H	1:22:A:PRO:HD2	6	1.09
(2,352)	1:21:A:ARG:H	1:22:A:PRO:HB3	4	1.09
(2,345)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD11	7	1.09
(2,345)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD12	7	1.09
(2,345)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD13	7	1.09
(2,306)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB3	6	1.09
(2,306)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB3	10	1.09
(2,302)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD11	8	1.09
(2,302)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD12	8	1.09
(2,302)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD13	8	1.09
(2,264)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	4	1.09
(2,264)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	4	1.09
(2,264)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	4	1.09
(2,264)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	4	1.09
(2,264)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	4	1.09
(2,264)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	4	1.09
(2,235)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HA	2	1.09
(2,235)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HA	2	1.09
(2,108)	1:22:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	2	1.09
(2,21)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE1	3	1.09

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,21)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE2	3	1.09
(2,16)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	7	1.09
(2,16)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	7	1.09
(2,16)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	7	1.09
(1,506)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	9	1.09
(1,506)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	9	1.09
(1,506)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	9	1.09
(1,467)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG11	7	1.09
(1,467)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG12	7	1.09
(1,467)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG13	7	1.09
(1,361)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:H	7	1.09
(1,361)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:H	9	1.09
(1,361)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:H	10	1.09
(1,304)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HG3	6	1.09
(1,266)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD21	7	1.09
(1,266)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD22	7	1.09
(1,266)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD23	7	1.09
(1,266)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD21	7	1.09
(1,266)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD22	7	1.09
(1,266)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD23	7	1.09
(1,232)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HD1	2	1.09
(1,232)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HD2	2	1.09
(4,170)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	5	1.08
(4,170)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	5	1.08
(4,170)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	5	1.08
(4,132)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	1	1.08
(4,132)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	1	1.08
(4,132)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	1	1.08
(4,132)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	1	1.08
(4,132)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	1	1.08
(4,132)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	1	1.08
(4,132)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	1	1.08
(4,132)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	1	1.08
(4,132)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	1	1.08
(4,74)	1:11:A:TRP:HE1	1:11:A:TRP:HH2	5	1.08
(4,67)	1:11:A:TRP:HZ3	1:23:A:PRO:HB2	1	1.08
(4,9)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	2	1.08
(4,9)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	2	1.08
(4,9)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	3	1.08
(4,9)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	3	1.08
(3,265)	1:21:A:ARG:H	1:22:A:PRO:HD2	10	1.08
(3,239)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB3	5	1.08

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,210)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	5	1.08
(3,210)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	5	1.08
(3,210)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	5	1.08
(3,210)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	5	1.08
(3,210)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	5	1.08
(3,210)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	5	1.08
(2,507)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	5	1.08
(2,507)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	5	1.08
(2,507)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	5	1.08
(2,428)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	1	1.08
(2,428)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	1	1.08
(2,428)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	1	1.08
(2,428)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	1	1.08
(2,428)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	1	1.08
(2,428)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	1	1.08
(2,428)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	1	1.08
(2,428)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	1	1.08
(2,428)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	1	1.08
(2,360)	1:21:A:ARG:H	1:22:A:PRO:HD2	10	1.08
(2,323)	1:11:A:TRP:HE1	1:11:A:TRP:HH2	5	1.08
(2,306)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB3	5	1.08
(2,303)	1:11:A:TRP:HZ3	1:23:A:PRO:HB2	1	1.08
(2,264)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	5	1.08
(2,264)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	5	1.08
(2,264)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	5	1.08
(2,264)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	5	1.08
(2,264)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	5	1.08
(2,264)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	5	1.08
(2,25)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	2	1.08
(2,25)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	2	1.08
(2,25)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	3	1.08
(2,25)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	3	1.08
(1,486)	1:24:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:HA	5	1.08
(1,437)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG2	3	1.08
(1,437)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG2	3	1.08
(1,437)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG2	3	1.08
(1,437)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG3	3	1.08
(1,437)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG3	3	1.08
(1,437)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG3	3	1.08
(1,386)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HB3	4	1.08
(1,386)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HB3	6	1.08
(1,362)	1:24:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	7	1.08

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,304)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HG3	5	1.08
(1,288)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG3	1	1.08
(1,288)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG3	8	1.08
(1,230)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HA	8	1.08
(1,230)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HA	8	1.08
(4,179)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HB	5	1.07
(4,179)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HB	5	1.07
(4,179)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HB	5	1.07
(4,91)	1:21:A:ARG:H	1:22:A:PRO:HB3	9	1.07
(4,74)	1:11:A:TRP:HE1	1:11:A:TRP:HH2	9	1.07
(4,65)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD21	2	1.07
(4,65)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD22	2	1.07
(4,65)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD23	2	1.07
(4,65)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD21	3	1.07
(4,65)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD22	3	1.07
(4,65)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD23	3	1.07
(4,54)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE1	2	1.07
(4,54)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE2	2	1.07
(4,54)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE1	2	1.07
(4,54)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE2	2	1.07
(4,54)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE1	2	1.07
(4,54)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE2	2	1.07
(4,9)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	9	1.07
(4,9)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	9	1.07
(4,8)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	9	1.07
(4,8)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	9	1.07
(4,5)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	8	1.07
(4,5)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	8	1.07
(4,5)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	8	1.07
(3,239)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB3	9	1.07
(2,528)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HB	5	1.07
(2,528)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HB	5	1.07
(2,528)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HB	5	1.07
(2,352)	1:21:A:ARG:H	1:22:A:PRO:HB3	9	1.07
(2,323)	1:11:A:TRP:HE1	1:11:A:TRP:HH2	9	1.07
(2,306)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB3	9	1.07
(2,299)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD21	2	1.07
(2,299)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD22	2	1.07
(2,299)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD23	2	1.07
(2,299)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD21	3	1.07
(2,299)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD22	3	1.07
(2,299)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD23	3	1.07

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,263)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE1	2	1.07
(2,263)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE2	2	1.07
(2,263)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE1	2	1.07
(2,263)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE2	2	1.07
(2,263)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE1	2	1.07
(2,263)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE2	2	1.07
(2,25)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	9	1.07
(2,25)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	9	1.07
(2,24)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	9	1.07
(2,24)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	9	1.07
(2,16)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	8	1.07
(2,16)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	8	1.07
(2,16)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	8	1.07
(1,429)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG13	10	1.07
(1,429)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG13	10	1.07
(1,429)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG13	10	1.07
(1,418)	1:7:A:LEU:HG	1:10:A:GLN:HG2	9	1.07
(1,418)	1:7:A:LEU:HG	1:10:A:GLN:HG3	9	1.07
(1,413)	1:1:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD2	5	1.07
(1,413)	1:1:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD3	5	1.07
(1,413)	1:1:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD2	5	1.07
(1,413)	1:1:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD3	5	1.07
(1,341)	1:10:A:GLN:HB2	1:13:A:LYS:H	10	1.07
(1,324)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HZ3	1	1.07
(1,324)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HZ3	1	1.07
(1,324)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HZ3	7	1.07
(1,324)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HZ3	7	1.07
(1,259)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:HE1	1	1.07
(1,259)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:HE2	1	1.07
(1,259)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:HE1	1	1.07
(1,259)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:HE2	1	1.07
(1,259)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:HE1	1	1.07
(1,259)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:HE2	1	1.07
(1,259)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:HE1	7	1.07
(1,259)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:HE2	7	1.07
(1,259)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:HE1	7	1.07
(1,259)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:HE2	7	1.07
(1,259)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:HE1	7	1.07
(1,259)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:HE2	7	1.07
(1,230)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HA	2	1.07
(1,230)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HA	2	1.07
(1,141)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:HB2	4	1.07

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,128)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	9	1.06
(4,128)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	9	1.06
(4,128)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	9	1.06
(4,74)	1:11:A:TRP:HE1	1:11:A:TRP:HH2	10	1.06
(4,70)	1:11:A:TRP:HE3	1:24:A:PRO:HA	8	1.06
(3,259)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD11	8	1.06
(3,259)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD12	8	1.06
(3,259)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD13	8	1.06
(3,210)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	3	1.06
(3,210)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	3	1.06
(3,210)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	3	1.06
(3,210)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	3	1.06
(3,210)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	3	1.06
(3,210)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	3	1.06
(2,420)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	9	1.06
(2,420)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	9	1.06
(2,420)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	9	1.06
(2,345)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD11	8	1.06
(2,345)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD12	8	1.06
(2,345)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD13	8	1.06
(2,323)	1:11:A:TRP:HE1	1:11:A:TRP:HH2	10	1.06
(2,313)	1:11:A:TRP:HE3	1:24:A:PRO:HA	8	1.06
(2,264)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	3	1.06
(2,264)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	3	1.06
(2,264)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	3	1.06
(2,264)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	3	1.06
(2,264)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	3	1.06
(2,264)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	3	1.06
(1,437)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG2	6	1.06
(1,437)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG2	6	1.06
(1,437)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG2	6	1.06
(1,437)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG3	6	1.06
(1,437)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG3	6	1.06
(1,437)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG3	6	1.06
(1,418)	1:7:A:LEU:HG	1:10:A:GLN:HG2	2	1.06
(1,418)	1:7:A:LEU:HG	1:10:A:GLN:HG3	2	1.06
(1,338)	1:8:A:TYR:HB3	1:9:A:ILE:H	4	1.06
(1,324)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HZ3	2	1.06
(1,324)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HZ3	2	1.06
(1,288)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG3	7	1.06
(1,266)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD21	1	1.06
(1,266)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD22	1	1.06

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,266)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD23	1	1.06
(1,266)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD21	1	1.06
(1,266)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD22	1	1.06
(1,266)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD23	1	1.06
(1,232)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HD1	10	1.06
(1,232)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HD2	10	1.06
(1,230)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HA	10	1.06
(1,230)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HA	10	1.06
(1,140)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:HB3	1	1.06
(4,169)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	6	1.05
(4,169)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	6	1.05
(4,169)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	6	1.05
(4,119)	1:23:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	9	1.05
(4,119)	1:23:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	10	1.05
(4,65)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD21	9	1.05
(4,65)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD22	9	1.05
(4,65)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD23	9	1.05
(4,20)	1:22:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	7	1.05
(4,9)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	8	1.05
(4,9)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	8	1.05
(4,7)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE1	8	1.05
(4,7)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE2	8	1.05
(4,5)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	3	1.05
(4,5)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	3	1.05
(4,5)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	3	1.05
(3,259)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD11	1	1.05
(3,259)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD12	1	1.05
(3,259)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD13	1	1.05
(2,506)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	6	1.05
(2,506)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	6	1.05
(2,506)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	6	1.05
(2,409)	1:23:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	9	1.05
(2,409)	1:23:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	10	1.05
(2,345)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD11	1	1.05
(2,345)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD12	1	1.05
(2,345)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD13	1	1.05
(2,299)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD21	9	1.05
(2,299)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD22	9	1.05
(2,299)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD23	9	1.05
(2,108)	1:22:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	7	1.05
(2,25)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	8	1.05
(2,25)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	8	1.05

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,21)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE1	8	1.05
(2,21)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE2	8	1.05
(2,16)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	3	1.05
(2,16)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	3	1.05
(2,16)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	3	1.05
(1,506)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	3	1.05
(1,506)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	3	1.05
(1,506)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	3	1.05
(1,475)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:HE3	7	1.05
(1,475)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:HE3	7	1.05
(1,457)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HD2	4	1.05
(1,457)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HD2	4	1.05
(1,457)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HD2	4	1.05
(1,437)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG2	1	1.05
(1,437)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG2	1	1.05
(1,437)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG2	1	1.05
(1,437)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG3	1	1.05
(1,437)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG3	1	1.05
(1,437)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG3	1	1.05
(1,437)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG2	4	1.05
(1,437)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG2	4	1.05
(1,437)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG2	4	1.05
(1,437)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG3	4	1.05
(1,437)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG3	4	1.05
(1,437)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG3	4	1.05
(1,362)	1:24:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	4	1.05
(1,330)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HG2	9	1.05
(1,325)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HE3	4	1.05
(1,325)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HE3	4	1.05
(1,258)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:HD1	5	1.05
(1,258)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:HD2	5	1.05
(1,258)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:HD1	5	1.05
(1,258)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:HD2	5	1.05
(1,258)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:HD1	5	1.05
(1,258)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:HD2	5	1.05
(4,128)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	10	1.04
(4,128)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	10	1.04
(4,128)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	10	1.04
(4,119)	1:23:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	4	1.04
(4,98)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HB2	6	1.04
(4,74)	1:11:A:TRP:HE1	1:11:A:TRP:HH2	1	1.04
(4,74)	1:11:A:TRP:HE1	1:11:A:TRP:HH2	2	1.04

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,9)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	10	1.04
(4,9)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	10	1.04
(4,8)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	5	1.04
(4,8)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	5	1.04
(4,5)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	4	1.04
(4,5)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	4	1.04
(4,5)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	4	1.04
(4,5)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	9	1.04
(4,5)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	9	1.04
(4,5)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	9	1.04
(2,420)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	10	1.04
(2,420)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	10	1.04
(2,420)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	10	1.04
(2,409)	1:23:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	4	1.04
(2,369)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HB2	6	1.04
(2,323)	1:11:A:TRP:HE1	1:11:A:TRP:HH2	1	1.04
(2,323)	1:11:A:TRP:HE1	1:11:A:TRP:HH2	2	1.04
(2,25)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	10	1.04
(2,25)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	10	1.04
(2,24)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	5	1.04
(2,24)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	5	1.04
(2,16)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	4	1.04
(2,16)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	4	1.04
(2,16)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	4	1.04
(2,16)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	9	1.04
(2,16)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	9	1.04
(2,16)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	9	1.04
(1,444)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HB2	5	1.04
(1,386)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HB3	8	1.04
(1,359)	1:10:A:GLN:HG2	1:11:A:TRP:H	3	1.04
(1,359)	1:10:A:GLN:HG3	1:11:A:TRP:H	3	1.04
(1,307)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG2	5	1.04
(1,307)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG3	5	1.04
(1,305)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HG2	6	1.04
(1,232)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HD1	7	1.04
(1,232)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HD2	7	1.04
(4,179)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HB	6	1.03
(4,179)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HB	6	1.03
(4,179)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HB	6	1.03
(4,128)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	8	1.03
(4,128)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	8	1.03
(4,128)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	8	1.03

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,91)	1:21:A:ARG:H	1:22:A:PRO:HB3	6	1.03
(4,91)	1:21:A:ARG:H	1:22:A:PRO:HB3	10	1.03
(4,74)	1:11:A:TRP:HE1	1:11:A:TRP:HH2	3	1.03
(4,74)	1:11:A:TRP:HE1	1:11:A:TRP:HH2	6	1.03
(4,9)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	5	1.03
(4,9)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	5	1.03
(4,5)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	2	1.03
(4,5)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	2	1.03
(4,5)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	2	1.03
(4,5)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	5	1.03
(4,5)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	5	1.03
(4,5)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	5	1.03
(4,5)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	10	1.03
(4,5)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	10	1.03
(4,5)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	10	1.03
(3,292)	1:10:A:GLN:HG2	1:13:A:LYS:HE2	1	1.03
(3,292)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:HE2	1	1.03
(3,292)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:HE3	1	1.03
(3,231)	1:11:A:TRP:HZ3	1:23:A:PRO:HG2	2	1.03
(3,210)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	10	1.03
(3,210)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	10	1.03
(3,210)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	10	1.03
(3,210)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	10	1.03
(3,210)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	10	1.03
(3,210)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	10	1.03
(2,528)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HB	6	1.03
(2,528)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HB	6	1.03
(2,528)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HB	6	1.03
(2,420)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	8	1.03
(2,420)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	8	1.03
(2,420)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	8	1.03
(2,416)	1:10:A:GLN:HG2	1:13:A:LYS:HE2	1	1.03
(2,416)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:HE2	1	1.03
(2,416)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:HE3	1	1.03
(2,352)	1:21:A:ARG:H	1:22:A:PRO:HB3	6	1.03
(2,352)	1:21:A:ARG:H	1:22:A:PRO:HB3	10	1.03
(2,323)	1:11:A:TRP:HE1	1:11:A:TRP:HH2	3	1.03
(2,323)	1:11:A:TRP:HE1	1:11:A:TRP:HH2	6	1.03
(2,292)	1:11:A:TRP:HZ3	1:23:A:PRO:HG2	2	1.03
(2,264)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	10	1.03
(2,264)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	10	1.03
(2,264)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	10	1.03

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,264)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	10	1.03
(2,264)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	10	1.03
(2,264)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	10	1.03
(2,25)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	5	1.03
(2,25)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	5	1.03
(2,16)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	2	1.03
(2,16)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	2	1.03
(2,16)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	2	1.03
(2,16)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	5	1.03
(2,16)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	5	1.03
(2,16)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	5	1.03
(2,16)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	10	1.03
(2,16)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	10	1.03
(2,16)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	10	1.03
(1,506)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	10	1.03
(1,506)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	10	1.03
(1,506)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	10	1.03
(1,437)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG2	5	1.03
(1,437)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG2	5	1.03
(1,437)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG2	5	1.03
(1,437)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG3	5	1.03
(1,437)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG3	5	1.03
(1,437)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG3	5	1.03
(1,434)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB2	3	1.03
(1,434)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB2	3	1.03
(1,434)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB2	3	1.03
(1,434)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB3	3	1.03
(1,434)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB3	3	1.03
(1,434)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB3	3	1.03
(1,434)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB2	8	1.03
(1,434)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB2	8	1.03
(1,434)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB2	8	1.03
(1,434)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB3	8	1.03
(1,434)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB3	8	1.03
(1,434)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB3	8	1.03
(1,429)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG13	8	1.03
(1,429)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG13	8	1.03
(1,429)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG13	8	1.03
(1,418)	1:7:A:LEU:HG	1:10:A:GLN:HG2	10	1.03
(1,418)	1:7:A:LEU:HG	1:10:A:GLN:HG3	10	1.03
(1,361)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:H	8	1.03
(1,330)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HG2	10	1.03

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,305)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HG2	5	1.03
(1,295)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD21	8	1.03
(1,295)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD22	8	1.03
(1,295)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD23	8	1.03
(1,295)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD21	9	1.03
(1,295)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD22	9	1.03
(1,295)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD23	9	1.03
(1,295)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD21	10	1.03
(1,295)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD22	10	1.03
(1,295)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD23	10	1.03
(1,230)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HA	5	1.03
(1,230)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HA	5	1.03
(1,187)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HE2	4	1.03
(1,187)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HE3	4	1.03
(1,187)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HE2	4	1.03
(1,187)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HE3	4	1.03
(1,72)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HA	4	1.03
(4,177)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HG3	4	1.02
(4,132)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	6	1.02
(4,132)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	6	1.02
(4,132)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	6	1.02
(4,132)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	6	1.02
(4,132)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	6	1.02
(4,132)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	6	1.02
(4,132)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	6	1.02
(4,132)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	6	1.02
(4,132)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	6	1.02
(4,131)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG11	3	1.02
(4,131)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG12	3	1.02
(4,131)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG13	3	1.02
(4,131)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG11	3	1.02
(4,131)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG12	3	1.02
(4,131)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG13	3	1.02
(4,131)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG11	3	1.02
(4,131)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG12	3	1.02
(4,131)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG13	3	1.02
(4,131)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG11	6	1.02
(4,131)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG12	6	1.02
(4,131)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG13	6	1.02
(4,131)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG11	6	1.02
(4,131)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG12	6	1.02
(4,131)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG13	6	1.02

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,131)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG11	6	1.02
(4,131)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG12	6	1.02
(4,131)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG13	6	1.02
(4,128)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	2	1.02
(4,128)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	2	1.02
(4,128)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	2	1.02
(4,119)	1:23:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	2	1.02
(4,98)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HB2	9	1.02
(4,66)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD11	5	1.02
(4,66)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD12	5	1.02
(4,66)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD13	5	1.02
(4,39)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HA	7	1.02
(4,39)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HA	7	1.02
(4,8)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	2	1.02
(4,8)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	2	1.02
(4,5)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	6	1.02
(4,5)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	6	1.02
(4,5)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	6	1.02
(3,259)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD11	3	1.02
(3,259)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD12	3	1.02
(3,259)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD13	3	1.02
(2,526)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HG3	4	1.02
(2,428)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	6	1.02
(2,428)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	6	1.02
(2,428)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	6	1.02
(2,428)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	6	1.02
(2,428)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	6	1.02
(2,428)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	6	1.02
(2,428)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	6	1.02
(2,428)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	6	1.02
(2,428)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	6	1.02
(2,427)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG11	3	1.02
(2,427)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG12	3	1.02
(2,427)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG13	3	1.02
(2,427)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG11	3	1.02
(2,427)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG12	3	1.02
(2,427)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG13	3	1.02
(2,427)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG11	3	1.02
(2,427)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG12	3	1.02
(2,427)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG13	3	1.02
(2,427)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG11	6	1.02
(2,427)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG12	6	1.02

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,427)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG13	6	1.02
(2,427)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG11	6	1.02
(2,427)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG12	6	1.02
(2,427)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG13	6	1.02
(2,427)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG11	6	1.02
(2,427)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG12	6	1.02
(2,427)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG13	6	1.02
(2,420)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	2	1.02
(2,420)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	2	1.02
(2,420)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	2	1.02
(2,409)	1:23:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	2	1.02
(2,369)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HB2	9	1.02
(2,345)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD11	3	1.02
(2,345)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD12	3	1.02
(2,345)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD13	3	1.02
(2,302)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD11	5	1.02
(2,302)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD12	5	1.02
(2,302)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD13	5	1.02
(2,229)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HA	7	1.02
(2,229)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HA	7	1.02
(2,24)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	2	1.02
(2,24)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	2	1.02
(2,16)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	6	1.02
(2,16)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	6	1.02
(2,16)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	6	1.02
(1,475)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:HE3	3	1.02
(1,475)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:HE3	3	1.02
(1,475)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:HE3	9	1.02
(1,475)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:HE3	9	1.02
(1,434)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB2	5	1.02
(1,434)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB2	5	1.02
(1,434)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB2	5	1.02
(1,434)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB3	5	1.02
(1,434)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB3	5	1.02
(1,434)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB3	5	1.02
(1,347)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD11	3	1.02
(1,347)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD12	3	1.02
(1,347)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD13	3	1.02
(1,338)	1:8:A:TYR:HB3	1:9:A:ILE:H	2	1.02
(1,305)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HG2	9	1.02
(1,305)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HG2	10	1.02
(1,295)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD21	4	1.02

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,295)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD22	4	1.02
(1,295)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD23	4	1.02
(1,283)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG3	9	1.02
(4,175)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HE1	2	1.01
(4,175)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HE2	2	1.01
(4,131)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG11	2	1.01
(4,131)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG12	2	1.01
(4,131)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG13	2	1.01
(4,131)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG11	2	1.01
(4,131)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG12	2	1.01
(4,131)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG13	2	1.01
(4,131)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG11	2	1.01
(4,131)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG12	2	1.01
(4,131)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG13	2	1.01
(4,76)	1:11:A:TRP:HZ2	1:11:A:TRP:HZ3	1	1.01
(4,76)	1:11:A:TRP:HZ2	1:11:A:TRP:HZ3	2	1.01
(4,76)	1:11:A:TRP:HZ2	1:11:A:TRP:HZ3	4	1.01
(4,76)	1:11:A:TRP:HZ2	1:11:A:TRP:HZ3	9	1.01
(4,7)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE1	4	1.01
(4,7)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE2	4	1.01
(3,231)	1:11:A:TRP:HZ3	1:23:A:PRO:HG2	4	1.01
(2,518)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HE1	2	1.01
(2,518)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HE2	2	1.01
(2,427)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG11	2	1.01
(2,427)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG12	2	1.01
(2,427)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG13	2	1.01
(2,427)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG11	2	1.01
(2,427)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG12	2	1.01
(2,427)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG13	2	1.01
(2,427)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG11	2	1.01
(2,427)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG12	2	1.01
(2,427)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG13	2	1.01
(2,328)	1:11:A:TRP:HZ2	1:11:A:TRP:HZ3	1	1.01
(2,328)	1:11:A:TRP:HZ2	1:11:A:TRP:HZ3	2	1.01
(2,328)	1:11:A:TRP:HZ2	1:11:A:TRP:HZ3	4	1.01
(2,328)	1:11:A:TRP:HZ2	1:11:A:TRP:HZ3	9	1.01
(2,292)	1:11:A:TRP:HZ3	1:23:A:PRO:HG2	4	1.01
(2,21)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE1	4	1.01
(2,21)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE2	4	1.01
(1,506)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	4	1.01
(1,506)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	4	1.01
(1,506)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	4	1.01

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,475)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:HE3	6	1.01
(1,475)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:HE3	6	1.01
(1,418)	1:7:A:LEU:HG	1:10:A:GLN:HG2	3	1.01
(1,418)	1:7:A:LEU:HG	1:10:A:GLN:HG3	3	1.01
(1,396)	1:8:A:TYR:HB3	1:23:A:PRO:HD3	3	1.01
(1,396)	1:23:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HD3	3	1.01
(1,347)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD11	2	1.01
(1,347)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD12	2	1.01
(1,347)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD13	2	1.01
(1,347)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD11	10	1.01
(1,347)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD12	10	1.01
(1,347)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD13	10	1.01
(1,324)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HZ3	9	1.01
(1,324)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HZ3	9	1.01
(1,295)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD21	2	1.01
(1,295)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD22	2	1.01
(1,295)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD23	2	1.01
(1,253)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HG2	6	1.01
(1,253)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HG2	6	1.01
(1,232)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HD1	4	1.01
(1,232)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HD2	4	1.01
(4,132)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	7	1.0
(4,132)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	7	1.0
(4,132)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	7	1.0
(4,132)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	7	1.0
(4,132)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	7	1.0
(4,132)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	7	1.0
(4,132)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	7	1.0
(4,132)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	7	1.0
(4,132)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	7	1.0
(4,110)	1:23:A:PRO:HG2	1:25:A:SER:HB2	10	1.0
(4,110)	1:23:A:PRO:HG2	1:25:A:SER:HB3	10	1.0
(4,100)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	1	1.0
(4,100)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	6	1.0
(4,98)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HB2	10	1.0
(4,87)	1:12:A:LEU:HD11	1:14:A:ASP:H	3	1.0
(4,87)	1:12:A:LEU:HD12	1:14:A:ASP:H	3	1.0
(4,87)	1:12:A:LEU:HD13	1:14:A:ASP:H	3	1.0
(4,76)	1:11:A:TRP:HZ2	1:11:A:TRP:HZ3	3	1.0
(4,76)	1:11:A:TRP:HZ2	1:11:A:TRP:HZ3	5	1.0
(4,76)	1:11:A:TRP:HZ2	1:11:A:TRP:HZ3	10	1.0
(2,428)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	7	1.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,428)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	7	1.0
(2,428)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	7	1.0
(2,428)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	7	1.0
(2,428)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	7	1.0
(2,428)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	7	1.0
(2,428)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	7	1.0
(2,428)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	7	1.0
(2,428)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	7	1.0
(2,392)	1:23:A:PRO:HG2	1:25:A:SER:HB2	10	1.0
(2,392)	1:23:A:PRO:HG2	1:25:A:SER:HB3	10	1.0
(2,371)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	1	1.0
(2,371)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	6	1.0
(2,369)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HB2	10	1.0
(2,346)	1:12:A:LEU:HD11	1:14:A:ASP:H	3	1.0
(2,346)	1:12:A:LEU:HD12	1:14:A:ASP:H	3	1.0
(2,346)	1:12:A:LEU:HD13	1:14:A:ASP:H	3	1.0
(2,328)	1:11:A:TRP:HZ2	1:11:A:TRP:HZ3	3	1.0
(2,328)	1:11:A:TRP:HZ2	1:11:A:TRP:HZ3	5	1.0
(2,328)	1:11:A:TRP:HZ2	1:11:A:TRP:HZ3	10	1.0
(1,429)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG13	4	1.0
(1,429)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG13	4	1.0
(1,429)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG13	4	1.0
(1,429)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG13	7	1.0
(1,429)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG13	7	1.0
(1,429)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG13	7	1.0
(1,295)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD21	6	1.0
(1,295)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD22	6	1.0
(1,295)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD23	6	1.0
(1,262)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	2	1.0
(1,262)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	2	1.0
(1,262)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	2	1.0
(1,262)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	2	1.0
(1,262)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	2	1.0
(1,262)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	2	1.0
(1,187)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HE2	3	1.0
(1,187)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HE3	3	1.0
(1,187)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HE2	3	1.0
(1,187)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HE3	3	1.0
(4,139)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HB2	5	0.99
(4,139)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HB2	5	0.99
(4,139)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HB2	5	0.99
(4,139)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HB3	5	0.99

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,139)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HB3	5	0.99
(4,139)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HB3	5	0.99
(4,102)	1:7:A:LEU:HG	1:24:A:PRO:HA	2	0.99
(4,65)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD21	8	0.99
(4,65)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD22	8	0.99
(4,65)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD23	8	0.99
(4,36)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD3	5	0.99
(4,10)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE2	1	0.99
(4,10)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE3	1	0.99
(4,9)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	4	0.99
(4,9)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	4	0.99
(3,285)	1:14:A:ASP:HB2	1:19:A:SER:HB3	10	0.99
(3,136)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	10	0.99
(2,441)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HB2	5	0.99
(2,441)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HB2	5	0.99
(2,441)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HB2	5	0.99
(2,441)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HB3	5	0.99
(2,441)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HB3	5	0.99
(2,441)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HB3	5	0.99
(2,397)	1:14:A:ASP:HB2	1:19:A:SER:HB3	10	0.99
(2,373)	1:7:A:LEU:HG	1:24:A:PRO:HA	2	0.99
(2,299)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD21	8	0.99
(2,299)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD22	8	0.99
(2,299)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD23	8	0.99
(2,210)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD3	5	0.99
(2,168)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	10	0.99
(2,31)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE2	1	0.99
(2,31)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE3	1	0.99
(2,25)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	4	0.99
(2,25)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	4	0.99
(1,506)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	8	0.99
(1,506)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	8	0.99
(1,506)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	8	0.99
(1,470)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	5	0.99
(1,470)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	5	0.99
(1,470)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	5	0.99
(1,429)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG13	1	0.99
(1,429)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG13	1	0.99
(1,429)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG13	1	0.99
(1,408)	1:23:A:PRO:HG2	1:24:A:PRO:HD3	8	0.99
(1,295)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD21	5	0.99
(1,295)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD22	5	0.99

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,295)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD23	5	0.99
(1,258)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:HD1	7	0.99
(1,258)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:HD2	7	0.99
(1,258)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:HD1	7	0.99
(1,258)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:HD2	7	0.99
(1,258)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:HD1	7	0.99
(1,258)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:HD2	7	0.99
(1,232)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HD1	8	0.99
(1,232)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HD2	8	0.99
(1,187)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HE2	8	0.99
(1,187)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HE3	8	0.99
(1,187)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HE2	8	0.99
(1,187)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HE3	8	0.99
(1,187)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HE2	9	0.99
(1,187)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HE3	9	0.99
(1,187)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HE2	9	0.99
(1,187)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HE3	9	0.99
(4,148)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	10	0.98
(4,148)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	10	0.98
(4,148)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	10	0.98
(4,131)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG11	1	0.98
(4,131)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG12	1	0.98
(4,131)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG13	1	0.98
(4,131)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG11	1	0.98
(4,131)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG12	1	0.98
(4,131)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG13	1	0.98
(4,131)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG11	1	0.98
(4,131)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG12	1	0.98
(4,131)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG13	1	0.98
(4,115)	1:19:A:SER:HB3	1:21:A:ARG:HG2	1	0.98
(4,110)	1:23:A:PRO:HG2	1:25:A:SER:HB2	1	0.98
(4,110)	1:23:A:PRO:HG2	1:25:A:SER:HB3	1	0.98
(4,100)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	2	0.98
(4,76)	1:11:A:TRP:HZ2	1:11:A:TRP:HZ3	6	0.98
(4,76)	1:11:A:TRP:HZ2	1:11:A:TRP:HZ3	8	0.98
(3,136)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	6	0.98
(2,459)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	10	0.98
(2,459)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	10	0.98
(2,459)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	10	0.98
(2,427)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG11	1	0.98
(2,427)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG12	1	0.98
(2,427)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG13	1	0.98

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,427)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG11	1	0.98
(2,427)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG12	1	0.98
(2,427)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG13	1	0.98
(2,427)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG11	1	0.98
(2,427)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG12	1	0.98
(2,427)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG13	1	0.98
(2,403)	1:19:A:SER:HB3	1:21:A:ARG:HG2	1	0.98
(2,392)	1:23:A:PRO:HG2	1:25:A:SER:HB2	1	0.98
(2,392)	1:23:A:PRO:HG2	1:25:A:SER:HB3	1	0.98
(2,371)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	2	0.98
(2,328)	1:11:A:TRP:HZ2	1:11:A:TRP:HZ3	6	0.98
(2,328)	1:11:A:TRP:HZ2	1:11:A:TRP:HZ3	8	0.98
(2,168)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	6	0.98
(1,467)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG11	3	0.98
(1,467)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG12	3	0.98
(1,467)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG13	3	0.98
(1,347)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD11	9	0.98
(1,347)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD12	9	0.98
(1,347)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD13	9	0.98
(1,340)	1:10:A:GLN:HG2	1:13:A:LYS:H	10	0.98
(1,340)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:H	10	0.98
(1,338)	1:8:A:TYR:HB3	1:9:A:ILE:H	10	0.98
(1,295)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD21	1	0.98
(1,295)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD22	1	0.98
(1,295)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD23	1	0.98
(1,295)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD21	3	0.98
(1,295)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD22	3	0.98
(1,295)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD23	3	0.98
(1,263)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE1	6	0.98
(1,263)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE2	6	0.98
(1,263)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE1	6	0.98
(1,263)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE2	6	0.98
(1,263)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE1	6	0.98
(1,263)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE2	6	0.98
(1,250)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG2	7	0.98
(1,250)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG2	7	0.98
(1,187)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HE2	2	0.98
(1,187)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HE3	2	0.98
(1,187)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HE2	2	0.98
(1,187)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HE3	2	0.98
(4,179)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HB	7	0.97
(4,179)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HB	7	0.97

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,179)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HB	7	0.97
(4,132)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	5	0.97
(4,132)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	5	0.97
(4,132)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	5	0.97
(4,132)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	5	0.97
(4,132)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	5	0.97
(4,132)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	5	0.97
(4,132)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	5	0.97
(4,132)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	5	0.97
(4,132)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	5	0.97
(4,119)	1:23:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	3	0.97
(4,100)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	4	0.97
(4,74)	1:11:A:TRP:HE1	1:11:A:TRP:HH2	7	0.97
(4,52)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	7	0.97
(4,52)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	7	0.97
(4,52)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	7	0.97
(4,52)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	7	0.97
(4,52)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	7	0.97
(4,52)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	7	0.97
(3,201)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HB3	3	0.97
(3,201)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HB3	3	0.97
(3,136)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	9	0.97
(2,528)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HB	7	0.97
(2,528)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HB	7	0.97
(2,528)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HB	7	0.97
(2,428)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	5	0.97
(2,428)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	5	0.97
(2,428)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	5	0.97
(2,428)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	5	0.97
(2,428)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	5	0.97
(2,428)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	5	0.97
(2,428)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	5	0.97
(2,428)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	5	0.97
(2,428)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	5	0.97
(2,409)	1:23:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	3	0.97
(2,371)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	4	0.97
(2,323)	1:11:A:TRP:HE1	1:11:A:TRP:HH2	7	0.97
(2,261)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	7	0.97
(2,261)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	7	0.97
(2,261)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	7	0.97
(2,261)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	7	0.97
(2,261)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	7	0.97

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,261)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	7	0.97
(2,248)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HB3	3	0.97
(2,248)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HB3	3	0.97
(2,168)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	9	0.97
(1,475)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:HE3	4	0.97
(1,475)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:HE3	4	0.97
(1,418)	1:7:A:LEU:HG	1:10:A:GLN:HG2	7	0.97
(1,418)	1:7:A:LEU:HG	1:10:A:GLN:HG3	7	0.97
(1,368)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD3	4	0.97
(1,347)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD11	1	0.97
(1,347)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD12	1	0.97
(1,347)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD13	1	0.97
(1,341)	1:10:A:GLN:HB2	1:13:A:LYS:H	9	0.97
(1,310)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HD3	4	0.97
(1,295)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD21	7	0.97
(1,295)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD22	7	0.97
(1,295)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD23	7	0.97
(1,283)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG3	10	0.97
(1,187)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HE2	10	0.97
(1,187)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HE3	10	0.97
(1,187)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HE2	10	0.97
(1,187)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HE3	10	0.97
(4,179)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HB	1	0.96
(4,179)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HB	1	0.96
(4,179)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HB	1	0.96
(4,169)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	1	0.96
(4,169)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	1	0.96
(4,169)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	1	0.96
(4,139)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HB2	4	0.96
(4,139)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HB2	4	0.96
(4,139)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HB2	4	0.96
(4,139)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HB3	4	0.96
(4,139)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HB3	4	0.96
(4,139)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HB3	4	0.96
(4,139)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HB2	6	0.96
(4,139)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HB2	6	0.96
(4,139)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HB2	6	0.96
(4,139)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HB3	6	0.96
(4,139)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HB3	6	0.96
(4,139)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HB3	6	0.96
(4,135)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:HG	4	0.96
(4,135)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:HG	4	0.96

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,135)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:HG	4	0.96
(4,105)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	1	0.96
(4,91)	1:21:A:ARG:H	1:22:A:PRO:HB3	5	0.96
(4,87)	1:12:A:LEU:HD11	1:14:A:ASP:H	10	0.96
(4,87)	1:12:A:LEU:HD12	1:14:A:ASP:H	10	0.96
(4,87)	1:12:A:LEU:HD13	1:14:A:ASP:H	10	0.96
(4,76)	1:11:A:TRP:HZ2	1:11:A:TRP:HZ3	7	0.96
(3,259)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD11	4	0.96
(3,259)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD12	4	0.96
(3,259)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD13	4	0.96
(3,243)	1:11:A:TRP:HD1	1:19:A:SER:HB3	10	0.96
(3,218)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HD2	1	0.96
(3,175)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD2	5	0.96
(2,528)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HB	1	0.96
(2,528)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HB	1	0.96
(2,528)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HB	1	0.96
(2,506)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	1	0.96
(2,506)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	1	0.96
(2,506)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	1	0.96
(2,441)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HB2	4	0.96
(2,441)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HB2	4	0.96
(2,441)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HB2	4	0.96
(2,441)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HB3	4	0.96
(2,441)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HB3	4	0.96
(2,441)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HB3	4	0.96
(2,441)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HB2	6	0.96
(2,441)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HB2	6	0.96
(2,441)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HB2	6	0.96
(2,441)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HB3	6	0.96
(2,441)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HB3	6	0.96
(2,441)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HB3	6	0.96
(2,435)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:HG	4	0.96
(2,435)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:HG	4	0.96
(2,435)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:HG	4	0.96
(2,382)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	1	0.96
(2,352)	1:21:A:ARG:H	1:22:A:PRO:HB3	5	0.96
(2,346)	1:12:A:LEU:HD11	1:14:A:ASP:H	10	0.96
(2,346)	1:12:A:LEU:HD12	1:14:A:ASP:H	10	0.96
(2,346)	1:12:A:LEU:HD13	1:14:A:ASP:H	10	0.96
(2,345)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD11	4	0.96
(2,345)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD12	4	0.96
(2,345)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD13	4	0.96

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,328)	1:11:A:TRP:HZ2	1:11:A:TRP:HZ3	7	0.96
(2,311)	1:11:A:TRP:HD1	1:19:A:SER:HB3	10	0.96
(2,274)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HD2	1	0.96
(2,211)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD2	5	0.96
(1,469)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG11	6	0.96
(1,469)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG12	6	0.96
(1,469)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG13	6	0.96
(1,467)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG11	10	0.96
(1,467)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG12	10	0.96
(1,467)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG13	10	0.96
(1,437)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG2	7	0.96
(1,437)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG2	7	0.96
(1,437)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG2	7	0.96
(1,437)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG3	7	0.96
(1,437)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG3	7	0.96
(1,437)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG3	7	0.96
(1,434)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB2	6	0.96
(1,434)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB2	6	0.96
(1,434)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB2	6	0.96
(1,434)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB3	6	0.96
(1,434)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB3	6	0.96
(1,434)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB3	6	0.96
(1,379)	1:11:A:TRP:HA	1:14:A:ASP:HB2	4	0.96
(1,338)	1:8:A:TYR:HB3	1:9:A:ILE:H	8	0.96
(1,325)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HE3	8	0.96
(1,325)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HE3	8	0.96
(1,141)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:HB2	9	0.96
(4,148)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	9	0.95
(4,148)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	9	0.95
(4,148)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	9	0.95
(4,74)	1:11:A:TRP:HE1	1:11:A:TRP:HH2	8	0.95
(4,50)	1:7:A:LEU:HG	1:8:A:TYR:HD1	6	0.95
(4,50)	1:7:A:LEU:HG	1:8:A:TYR:HD2	6	0.95
(4,11)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD2	9	0.95
(4,11)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD3	9	0.95
(3,259)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD11	2	0.95
(3,259)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD12	2	0.95
(3,259)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD13	2	0.95
(3,231)	1:11:A:TRP:HZ3	1:23:A:PRO:HG2	3	0.95
(3,210)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	9	0.95
(3,210)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	9	0.95
(3,210)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	9	0.95

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,210)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	9	0.95
(3,210)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	9	0.95
(3,210)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	9	0.95
(2,459)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	9	0.95
(2,459)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	9	0.95
(2,459)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	9	0.95
(2,345)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD11	2	0.95
(2,345)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD12	2	0.95
(2,345)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD13	2	0.95
(2,323)	1:11:A:TRP:HE1	1:11:A:TRP:HH2	8	0.95
(2,292)	1:11:A:TRP:HZ3	1:23:A:PRO:HG2	3	0.95
(2,264)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	9	0.95
(2,264)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	9	0.95
(2,264)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	9	0.95
(2,264)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	9	0.95
(2,264)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	9	0.95
(2,264)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	9	0.95
(2,254)	1:7:A:LEU:HG	1:8:A:TYR:HD1	6	0.95
(2,254)	1:7:A:LEU:HG	1:8:A:TYR:HD2	6	0.95
(2,33)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD2	9	0.95
(2,33)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD3	9	0.95
(1,510)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HD3	7	0.95
(1,510)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HD3	7	0.95
(1,510)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HD3	7	0.95
(1,357)	1:11:A:TRP:H	1:24:A:PRO:HB3	5	0.95
(1,325)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HE3	5	0.95
(1,325)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HE3	5	0.95
(1,268)	1:11:A:TRP:HZ2	1:22:A:PRO:HA	6	0.95
(1,266)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD21	2	0.95
(1,266)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD22	2	0.95
(1,266)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD23	2	0.95
(1,266)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD21	2	0.95
(1,266)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD22	2	0.95
(1,266)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD23	2	0.95
(1,250)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG2	1	0.95
(1,250)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG2	1	0.95
(1,250)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG2	6	0.95
(1,250)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG2	6	0.95
(1,247)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB3	8	0.95
(1,247)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB3	8	0.95
(1,141)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:HB2	6	0.95
(4,162)	1:24:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:HA	4	0.94

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,162)	1:24:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:HA	7	0.94
(4,122)	1:1:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD2	4	0.94
(4,122)	1:1:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD3	4	0.94
(4,122)	1:1:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD2	4	0.94
(4,91)	1:21:A:ARG:H	1:22:A:PRO:HB3	2	0.94
(4,83)	1:10:A:GLN:HG2	1:13:A:LYS:H	3	0.94
(4,83)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:H	3	0.94
(4,74)	1:11:A:TRP:HE1	1:11:A:TRP:HH2	4	0.94
(4,65)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD21	4	0.94
(4,65)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD22	4	0.94
(4,65)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD23	4	0.94
(4,11)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD2	10	0.94
(4,11)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD3	10	0.94
(3,68)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD2	4	0.94
(2,486)	1:24:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:HA	4	0.94
(2,486)	1:24:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:HA	7	0.94
(2,413)	1:1:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD2	4	0.94
(2,413)	1:1:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD3	4	0.94
(2,413)	1:1:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD2	4	0.94
(2,352)	1:21:A:ARG:H	1:22:A:PRO:HB3	2	0.94
(2,340)	1:10:A:GLN:HG2	1:13:A:LYS:H	3	0.94
(2,340)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:H	3	0.94
(2,323)	1:11:A:TRP:HE1	1:11:A:TRP:HH2	4	0.94
(2,299)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD21	4	0.94
(2,299)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD22	4	0.94
(2,299)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD23	4	0.94
(2,84)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD2	4	0.94
(2,33)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD2	10	0.94
(2,33)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD3	10	0.94
(1,472)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HA	7	0.94
(1,472)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HA	7	0.94
(1,472)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HA	7	0.94
(1,444)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HB2	2	0.94
(1,434)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB2	2	0.94
(1,434)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB2	2	0.94
(1,434)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB2	2	0.94
(1,434)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB3	2	0.94
(1,434)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB3	2	0.94
(1,434)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB3	2	0.94
(1,386)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HB3	7	0.94
(1,359)	1:10:A:GLN:HG2	1:11:A:TRP:H	8	0.94
(1,359)	1:10:A:GLN:HG3	1:11:A:TRP:H	8	0.94

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,347)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD11	6	0.94
(1,347)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD12	6	0.94
(1,347)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD13	6	0.94
(1,347)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD11	7	0.94
(1,347)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD12	7	0.94
(1,347)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD13	7	0.94
(1,325)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HE3	3	0.94
(1,325)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HE3	3	0.94
(1,258)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:HD1	1	0.94
(1,258)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:HD2	1	0.94
(1,258)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:HD1	1	0.94
(1,258)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:HD2	1	0.94
(1,258)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:HD1	1	0.94
(1,258)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:HD2	1	0.94
(1,230)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HA	1	0.94
(1,230)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HA	1	0.94
(1,189)	1:13:A:LYS:HE2	1:13:A:LYS:HG2	1	0.94
(1,189)	1:13:A:LYS:HE3	1:13:A:LYS:HG2	1	0.94
(1,143)	1:8:A:TYR:H	1:8:A:TYR:HB2	1	0.94
(1,141)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:HB2	10	0.94
(1,72)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HA	10	0.94
(4,98)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HB2	5	0.93
(4,87)	1:12:A:LEU:HD11	1:14:A:ASP:H	7	0.93
(4,87)	1:12:A:LEU:HD12	1:14:A:ASP:H	7	0.93
(4,87)	1:12:A:LEU:HD13	1:14:A:ASP:H	7	0.93
(4,66)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD11	7	0.93
(4,66)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD12	7	0.93
(4,66)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD13	7	0.93
(4,39)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HA	2	0.93
(4,39)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HA	2	0.93
(4,11)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD2	8	0.93
(4,11)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD3	8	0.93
(3,311)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HD2	7	0.93
(3,311)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HD2	7	0.93
(3,311)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HD2	7	0.93
(3,286)	1:14:A:ASP:HB2	1:19:A:SER:HB2	5	0.93
(3,259)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD11	9	0.93
(3,259)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD12	9	0.93
(3,259)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD13	9	0.93
(3,259)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD11	10	0.93
(3,259)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD12	10	0.93
(3,259)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD13	10	0.93

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,136)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	5	0.93
(3,136)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	8	0.93
(3,68)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD2	8	0.93
(2,458)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HD2	7	0.93
(2,458)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HD2	7	0.93
(2,458)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HD2	7	0.93
(2,398)	1:14:A:ASP:HB2	1:19:A:SER:HB2	5	0.93
(2,369)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HB2	5	0.93
(2,346)	1:12:A:LEU:HD11	1:14:A:ASP:H	7	0.93
(2,346)	1:12:A:LEU:HD12	1:14:A:ASP:H	7	0.93
(2,346)	1:12:A:LEU:HD13	1:14:A:ASP:H	7	0.93
(2,345)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD11	9	0.93
(2,345)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD12	9	0.93
(2,345)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD13	9	0.93
(2,345)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD11	10	0.93
(2,345)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD12	10	0.93
(2,345)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD13	10	0.93
(2,302)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD11	7	0.93
(2,302)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD12	7	0.93
(2,302)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD13	7	0.93
(2,229)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HA	2	0.93
(2,229)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HA	2	0.93
(2,168)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	5	0.93
(2,168)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	8	0.93
(2,84)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD2	8	0.93
(2,33)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD2	8	0.93
(2,33)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD3	8	0.93
(1,187)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HE2	5	0.93
(1,187)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HE3	5	0.93
(1,187)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HE2	5	0.93
(1,187)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HE3	5	0.93
(1,72)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HA	9	0.93
(4,166)	1:12:A:LEU:HG	1:16:A:GLY:HA2	9	0.92
(4,97)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:H	6	0.92
(4,97)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:H	6	0.92
(4,97)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:H	6	0.92
(4,70)	1:11:A:TRP:HE3	1:24:A:PRO:HA	4	0.92
(4,50)	1:7:A:LEU:HG	1:8:A:TYR:HD1	10	0.92
(4,50)	1:7:A:LEU:HG	1:8:A:TYR:HD2	10	0.92
(3,136)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	3	0.92
(3,68)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD2	7	0.92
(2,498)	1:12:A:LEU:HG	1:16:A:GLY:HA2	9	0.92

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,366)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:H	6	0.92
(2,366)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:H	6	0.92
(2,366)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:H	6	0.92
(2,313)	1:11:A:TRP:HE3	1:24:A:PRO:HA	4	0.92
(2,254)	1:7:A:LEU:HG	1:8:A:TYR:HD1	10	0.92
(2,254)	1:7:A:LEU:HG	1:8:A:TYR:HD2	10	0.92
(2,168)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	3	0.92
(2,84)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD2	7	0.92
(1,529)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HB3	9	0.92
(1,491)	1:8:A:TYR:HB2	1:24:A:PRO:HB3	2	0.92
(1,475)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:HE3	8	0.92
(1,475)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:HE3	8	0.92
(1,415)	1:7:A:LEU:HB2	1:8:A:TYR:HB3	6	0.92
(1,262)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	3	0.92
(1,262)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	3	0.92
(1,262)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	3	0.92
(1,262)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	3	0.92
(1,262)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	3	0.92
(1,262)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	3	0.92
(1,72)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HA	6	0.92
(4,169)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	7	0.91
(4,169)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	7	0.91
(4,169)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	7	0.91
(4,166)	1:12:A:LEU:HG	1:16:A:GLY:HA2	10	0.91
(4,100)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	3	0.91
(4,99)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG2	1	0.91
(4,99)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG3	1	0.91
(4,20)	1:22:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	6	0.91
(4,12)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG2	5	0.91
(4,12)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG3	5	0.91
(4,11)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD2	2	0.91
(4,11)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD3	2	0.91
(3,311)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HD2	4	0.91
(3,311)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HD2	4	0.91
(3,311)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HD2	4	0.91
(3,136)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	7	0.91
(3,81)	1:24:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD2	6	0.91
(2,506)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	7	0.91
(2,506)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	7	0.91
(2,506)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	7	0.91
(2,498)	1:12:A:LEU:HG	1:16:A:GLY:HA2	10	0.91
(2,458)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HD2	4	0.91

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,458)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HD2	4	0.91
(2,458)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HD2	4	0.91
(2,371)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	3	0.91
(2,370)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG2	1	0.91
(2,370)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG3	1	0.91
(2,168)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	7	0.91
(2,108)	1:22:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	6	0.91
(2,99)	1:24:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD2	6	0.91
(2,58)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG2	5	0.91
(2,58)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG3	5	0.91
(2,33)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD2	2	0.91
(2,33)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD3	2	0.91
(1,529)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HB3	10	0.91
(1,491)	1:8:A:TYR:HB2	1:24:A:PRO:HB3	3	0.91
(1,472)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HA	1	0.91
(1,472)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HA	1	0.91
(1,472)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HA	1	0.91
(1,467)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG11	2	0.91
(1,467)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG12	2	0.91
(1,467)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG13	2	0.91
(1,449)	1:12:A:LEU:HD11	1:14:A:ASP:HB2	3	0.91
(1,449)	1:12:A:LEU:HD12	1:14:A:ASP:HB2	3	0.91
(1,449)	1:12:A:LEU:HD13	1:14:A:ASP:HB2	3	0.91
(1,444)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HB2	8	0.91
(1,434)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB2	4	0.91
(1,434)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB2	4	0.91
(1,434)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB2	4	0.91
(1,434)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB3	4	0.91
(1,434)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB3	4	0.91
(1,434)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB3	4	0.91
(1,357)	1:11:A:TRP:H	1:24:A:PRO:HB3	3	0.91
(1,357)	1:11:A:TRP:H	1:24:A:PRO:HB3	9	0.91
(1,294)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD21	1	0.91
(1,294)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD22	1	0.91
(1,294)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD23	1	0.91
(1,294)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD21	2	0.91
(1,294)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD22	2	0.91
(1,294)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD23	2	0.91
(1,294)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD21	4	0.91
(1,294)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD22	4	0.91
(1,294)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD23	4	0.91
(1,266)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD21	9	0.91

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,266)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD22	9	0.91
(1,266)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD23	9	0.91
(1,266)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD21	9	0.91
(1,266)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD22	9	0.91
(1,266)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD23	9	0.91
(1,252)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	3	0.91
(1,252)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	3	0.91
(1,118)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:H	4	0.91
(1,118)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:H	4	0.91
(1,72)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HA	5	0.91
(1,14)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	1	0.91
(1,14)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	1	0.91
(1,14)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	1	0.91
(1,14)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	6	0.91
(1,14)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	6	0.91
(1,14)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	6	0.91
(1,14)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	7	0.91
(1,14)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	7	0.91
(1,14)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	7	0.91
(4,139)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HB2	1	0.9
(4,139)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HB2	1	0.9
(4,139)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HB2	1	0.9
(4,139)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HB3	1	0.9
(4,139)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HB3	1	0.9
(4,139)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HB3	1	0.9
(4,100)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	5	0.9
(4,99)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG2	3	0.9
(4,99)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG3	3	0.9
(4,99)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG2	7	0.9
(4,99)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG3	7	0.9
(4,12)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG2	2	0.9
(4,12)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG3	2	0.9
(4,11)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD2	4	0.9
(4,11)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD3	4	0.9
(3,225)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG2	5	0.9
(3,136)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	2	0.9
(3,81)	1:24:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD2	5	0.9
(3,68)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD2	2	0.9
(3,68)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD2	6	0.9
(2,441)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HB2	1	0.9
(2,441)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HB2	1	0.9
(2,441)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HB2	1	0.9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,441)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HB3	1	0.9
(2,441)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HB3	1	0.9
(2,441)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HB3	1	0.9
(2,371)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	5	0.9
(2,370)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG2	3	0.9
(2,370)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG3	3	0.9
(2,370)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG2	7	0.9
(2,370)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG3	7	0.9
(2,283)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG2	5	0.9
(2,168)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	2	0.9
(2,99)	1:24:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD2	5	0.9
(2,84)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD2	2	0.9
(2,84)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD2	6	0.9
(2,58)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG2	2	0.9
(2,58)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG3	2	0.9
(2,33)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD2	4	0.9
(2,33)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD3	4	0.9
(1,506)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	2	0.9
(1,506)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	2	0.9
(1,506)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	2	0.9
(1,456)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA3	6	0.9
(1,456)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA3	6	0.9
(1,456)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA3	6	0.9
(1,396)	1:8:A:TYR:HB3	1:23:A:PRO:HD3	2	0.9
(1,396)	1:23:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HD3	2	0.9
(1,368)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD3	5	0.9
(1,338)	1:8:A:TYR:HB3	1:9:A:ILE:H	3	0.9
(1,230)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HA	9	0.9
(1,230)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HA	9	0.9
(1,187)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HE2	7	0.9
(1,187)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HE3	7	0.9
(1,187)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HE2	7	0.9
(1,187)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HE3	7	0.9
(1,100)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HD2	8	0.9
(4,108)	1:7:A:LEU:HG	1:8:A:TYR:HA	5	0.89
(4,99)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG2	2	0.89
(4,99)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG3	2	0.89
(4,99)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG2	8	0.89
(4,99)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG3	8	0.89
(4,87)	1:12:A:LEU:HD11	1:14:A:ASP:H	4	0.89
(4,87)	1:12:A:LEU:HD12	1:14:A:ASP:H	4	0.89
(4,87)	1:12:A:LEU:HD13	1:14:A:ASP:H	4	0.89

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,11)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD2	3	0.89
(4,11)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD3	3	0.89
(3,326)	1:21:A:ARG:HG2	1:22:A:PRO:HD3	7	0.89
(3,210)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	2	0.89
(3,210)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	2	0.89
(3,210)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	2	0.89
(3,210)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	2	0.89
(3,210)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	2	0.89
(3,210)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	2	0.89
(3,136)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	1	0.89
(2,489)	1:21:A:ARG:HG2	1:22:A:PRO:HD3	7	0.89
(2,385)	1:7:A:LEU:HG	1:8:A:TYR:HA	5	0.89
(2,370)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG2	2	0.89
(2,370)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG3	2	0.89
(2,370)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG2	8	0.89
(2,370)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG3	8	0.89
(2,346)	1:12:A:LEU:HD11	1:14:A:ASP:H	4	0.89
(2,346)	1:12:A:LEU:HD12	1:14:A:ASP:H	4	0.89
(2,346)	1:12:A:LEU:HD13	1:14:A:ASP:H	4	0.89
(2,264)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	2	0.89
(2,264)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	2	0.89
(2,264)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	2	0.89
(2,264)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	2	0.89
(2,264)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	2	0.89
(2,264)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	2	0.89
(2,168)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	1	0.89
(2,33)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD2	3	0.89
(2,33)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD3	3	0.89
(1,467)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG11	9	0.89
(1,467)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG12	9	0.89
(1,467)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG13	9	0.89
(1,396)	1:8:A:TYR:HB3	1:23:A:PRO:HD3	9	0.89
(1,396)	1:23:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HD3	9	0.89
(1,368)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD3	6	0.89
(1,310)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HD3	8	0.89
(1,263)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE1	5	0.89
(1,263)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE2	5	0.89
(1,263)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE1	5	0.89
(1,263)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE2	5	0.89
(1,263)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE1	5	0.89
(1,263)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE2	5	0.89
(1,261)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	5	0.89

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,261)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	5	0.89
(1,261)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	5	0.89
(1,261)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	5	0.89
(1,261)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	5	0.89
(1,261)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	5	0.89
(1,54)	1:16:A:GLY:HA2	1:16:A:GLY:HA3	5	0.89
(1,54)	1:16:A:GLY:HA2	1:16:A:GLY:HA3	8	0.89
(1,54)	1:16:A:GLY:HA2	1:16:A:GLY:HA3	9	0.89
(1,54)	1:16:A:GLY:HA2	1:16:A:GLY:HA3	10	0.89
(4,162)	1:24:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:HA	8	0.88
(4,100)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	9	0.88
(4,100)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	10	0.88
(4,12)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG2	1	0.88
(4,12)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG3	1	0.88
(4,12)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG2	6	0.88
(4,12)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG3	6	0.88
(3,225)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG2	2	0.88
(3,218)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HD2	5	0.88
(3,68)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD2	1	0.88
(3,68)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD2	3	0.88
(3,68)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD2	5	0.88
(3,68)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD2	9	0.88
(3,68)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD2	10	0.88
(2,486)	1:24:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:HA	8	0.88
(2,371)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	9	0.88
(2,371)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	10	0.88
(2,283)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG2	2	0.88
(2,274)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HD2	5	0.88
(2,84)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD2	1	0.88
(2,84)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD2	3	0.88
(2,84)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD2	5	0.88
(2,84)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD2	9	0.88
(2,84)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD2	10	0.88
(2,58)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG2	1	0.88
(2,58)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG3	1	0.88
(2,58)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG2	6	0.88
(2,58)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG3	6	0.88
(1,472)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HA	6	0.88
(1,472)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HA	6	0.88
(1,472)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HA	6	0.88
(1,362)	1:24:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	3	0.88
(1,347)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD11	5	0.88

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,347)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD12	5	0.88
(1,347)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD13	5	0.88
(1,342)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:H	5	0.88
(1,342)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:H	5	0.88
(1,342)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:H	5	0.88
(1,338)	1:8:A:TYR:HB3	1:9:A:ILE:H	9	0.88
(1,310)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HD3	3	0.88
(1,310)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HD3	7	0.88
(1,294)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD21	7	0.88
(1,294)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD22	7	0.88
(1,294)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD23	7	0.88
(1,235)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HA	7	0.88
(1,235)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HA	7	0.88
(1,208)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HG3	4	0.88
(1,54)	1:16:A:GLY:HA2	1:16:A:GLY:HA3	3	0.88
(1,54)	1:16:A:GLY:HA2	1:16:A:GLY:HA3	4	0.88
(1,54)	1:16:A:GLY:HA2	1:16:A:GLY:HA3	6	0.88
(1,54)	1:16:A:GLY:HA2	1:16:A:GLY:HA3	7	0.88
(1,14)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	4	0.88
(1,14)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	4	0.88
(1,14)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	4	0.88
(1,14)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	5	0.88
(1,14)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	5	0.88
(1,14)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	5	0.88
(1,14)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	9	0.88
(1,14)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	9	0.88
(1,14)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	9	0.88
(1,14)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	10	0.88
(1,14)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	10	0.88
(1,14)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	10	0.88
(4,139)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HB2	7	0.87
(4,139)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HB2	7	0.87
(4,139)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HB2	7	0.87
(4,139)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HB3	7	0.87
(4,139)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HB3	7	0.87
(4,139)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HB3	7	0.87
(4,139)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HB2	9	0.87
(4,139)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HB2	9	0.87
(4,139)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HB2	9	0.87
(4,139)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HB3	9	0.87
(4,139)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HB3	9	0.87
(4,139)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HB3	9	0.87

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,113)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD2	6	0.87
(4,113)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD2	6	0.87
(4,104)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:HB2	6	0.87
(4,104)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:HB3	6	0.87
(4,87)	1:12:A:LEU:HD11	1:14:A:ASP:H	9	0.87
(4,87)	1:12:A:LEU:HD12	1:14:A:ASP:H	9	0.87
(4,87)	1:12:A:LEU:HD13	1:14:A:ASP:H	9	0.87
(3,326)	1:21:A:ARG:HG2	1:22:A:PRO:HD3	8	0.87
(3,265)	1:21:A:ARG:H	1:22:A:PRO:HD2	2	0.87
(3,136)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	4	0.87
(2,489)	1:21:A:ARG:HG2	1:22:A:PRO:HD3	8	0.87
(2,441)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HB2	7	0.87
(2,441)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HB2	7	0.87
(2,441)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HB2	7	0.87
(2,441)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HB3	7	0.87
(2,441)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HB3	7	0.87
(2,441)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HB3	7	0.87
(2,441)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HB2	9	0.87
(2,441)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HB2	9	0.87
(2,441)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HB2	9	0.87
(2,441)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HB3	9	0.87
(2,441)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HB3	9	0.87
(2,441)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HB3	9	0.87
(2,401)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD2	6	0.87
(2,401)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD2	6	0.87
(2,380)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:HB2	6	0.87
(2,380)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:HB3	6	0.87
(2,360)	1:21:A:ARG:H	1:22:A:PRO:HD2	2	0.87
(2,346)	1:12:A:LEU:HD11	1:14:A:ASP:H	9	0.87
(2,346)	1:12:A:LEU:HD12	1:14:A:ASP:H	9	0.87
(2,346)	1:12:A:LEU:HD13	1:14:A:ASP:H	9	0.87
(2,168)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	4	0.87
(1,483)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HE1	5	0.87
(1,483)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HE2	5	0.87
(1,475)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:HE3	10	0.87
(1,475)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:HE3	10	0.87
(1,408)	1:23:A:PRO:HG2	1:24:A:PRO:HD3	7	0.87
(1,396)	1:8:A:TYR:HB3	1:23:A:PRO:HD3	10	0.87
(1,396)	1:23:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HD3	10	0.87
(1,368)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD3	9	0.87
(1,362)	1:24:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	2	0.87
(1,348)	1:8:A:TYR:H	1:9:A:ILE:HD11	3	0.87

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,348)	1:8:A:TYR:H	1:9:A:ILE:HD12	3	0.87
(1,348)	1:8:A:TYR:H	1:9:A:ILE:HD13	3	0.87
(1,340)	1:10:A:GLN:HG2	1:13:A:LYS:H	4	0.87
(1,340)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:H	4	0.87
(1,294)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD21	5	0.87
(1,294)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD22	5	0.87
(1,294)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD23	5	0.87
(1,258)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:HD1	6	0.87
(1,258)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:HD2	6	0.87
(1,258)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:HD1	6	0.87
(1,258)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:HD2	6	0.87
(1,258)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:HD1	6	0.87
(1,258)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:HD2	6	0.87
(1,252)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	10	0.87
(1,252)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	10	0.87
(1,208)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HG3	1	0.87
(1,72)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HA	1	0.87
(1,72)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HA	3	0.87
(1,54)	1:16:A:GLY:HA2	1:16:A:GLY:HA3	1	0.87
(1,54)	1:16:A:GLY:HA2	1:16:A:GLY:HA3	2	0.87
(1,14)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	2	0.87
(1,14)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	2	0.87
(1,14)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	2	0.87
(1,14)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	3	0.87
(1,14)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	3	0.87
(1,14)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	3	0.87
(1,14)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	8	0.87
(1,14)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	8	0.87
(1,14)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	8	0.87
(4,136)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA2	9	0.86
(4,136)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA2	9	0.86
(4,136)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA2	9	0.86
(4,83)	1:10:A:GLN:HG2	1:13:A:LYS:H	8	0.86
(4,83)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:H	8	0.86
(4,78)	1:11:A:TRP:HE1	1:22:A:PRO:HG2	4	0.86
(4,78)	1:11:A:TRP:HE1	1:22:A:PRO:HG3	4	0.86
(4,66)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD11	1	0.86
(4,66)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD12	1	0.86
(4,66)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD13	1	0.86
(4,2)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	4	0.86
(4,2)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	4	0.86
(4,2)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	4	0.86

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,436)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA2	9	0.86
(2,436)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA2	9	0.86
(2,436)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA2	9	0.86
(2,340)	1:10:A:GLN:HG2	1:13:A:LYS:H	8	0.86
(2,340)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:H	8	0.86
(2,332)	1:11:A:TRP:HE1	1:22:A:PRO:HG2	4	0.86
(2,332)	1:11:A:TRP:HE1	1:22:A:PRO:HG3	4	0.86
(2,302)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD11	1	0.86
(2,302)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD12	1	0.86
(2,302)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD13	1	0.86
(2,13)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	4	0.86
(2,13)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	4	0.86
(2,13)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	4	0.86
(1,510)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HD3	4	0.86
(1,510)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HD3	4	0.86
(1,510)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HD3	4	0.86
(1,491)	1:8:A:TYR:HB2	1:24:A:PRO:HB3	4	0.86
(1,456)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA3	7	0.86
(1,456)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA3	7	0.86
(1,456)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA3	7	0.86
(1,435)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:HG	8	0.86
(1,435)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:HG	8	0.86
(1,435)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:HG	8	0.86
(1,368)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD3	10	0.86
(1,340)	1:10:A:GLN:HG2	1:13:A:LYS:H	2	0.86
(1,340)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:H	2	0.86
(1,340)	1:10:A:GLN:HG2	1:13:A:LYS:H	9	0.86
(1,340)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:H	9	0.86
(1,321)	1:11:A:TRP:HE3	1:24:A:PRO:HD2	4	0.86
(1,266)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD21	5	0.86
(1,266)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD22	5	0.86
(1,266)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD23	5	0.86
(1,266)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD21	5	0.86
(1,266)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD22	5	0.86
(1,266)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD23	5	0.86
(1,247)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB3	4	0.86
(1,247)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB3	4	0.86
(1,163)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HE22	1	0.86
(1,163)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HE22	2	0.86
(1,163)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HE22	3	0.86
(1,163)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HE22	4	0.86
(1,163)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HE22	5	0.86

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,163)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HE22	6	0.86
(1,163)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HE22	7	0.86
(1,143)	1:8:A:TYR:H	1:8:A:TYR:HB2	6	0.86
(1,87)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD3	8	0.86
(4,115)	1:19:A:SER:HB3	1:21:A:ARG:HG2	10	0.85
(4,104)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:HB2	10	0.85
(4,104)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:HB3	10	0.85
(4,103)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	3	0.85
(4,103)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB3	3	0.85
(4,102)	1:7:A:LEU:HG	1:24:A:PRO:HA	8	0.85
(4,80)	1:11:A:TRP:HE1	1:24:A:PRO:HD2	7	0.85
(4,66)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD11	2	0.85
(4,66)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD12	2	0.85
(4,66)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD13	2	0.85
(4,52)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	3	0.85
(4,52)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	3	0.85
(4,52)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	3	0.85
(4,52)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	3	0.85
(4,52)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	3	0.85
(4,52)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	3	0.85
(4,50)	1:7:A:LEU:HG	1:8:A:TYR:HD1	3	0.85
(4,50)	1:7:A:LEU:HG	1:8:A:TYR:HD2	3	0.85
(4,12)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG2	3	0.85
(4,12)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG3	3	0.85
(4,11)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD2	5	0.85
(4,11)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD3	5	0.85
(4,11)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD2	7	0.85
(4,11)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD3	7	0.85
(3,201)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HB3	6	0.85
(3,201)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HB3	6	0.85
(2,403)	1:19:A:SER:HB3	1:21:A:ARG:HG2	10	0.85
(2,380)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:HB2	10	0.85
(2,380)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:HB3	10	0.85
(2,374)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	3	0.85
(2,374)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB3	3	0.85
(2,373)	1:7:A:LEU:HG	1:24:A:PRO:HA	8	0.85
(2,334)	1:11:A:TRP:HE1	1:24:A:PRO:HD2	7	0.85
(2,302)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD11	2	0.85
(2,302)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD12	2	0.85
(2,302)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD13	2	0.85
(2,261)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	3	0.85
(2,261)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	3	0.85

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,261)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	3	0.85
(2,261)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	3	0.85
(2,261)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	3	0.85
(2,261)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	3	0.85
(2,254)	1:7:A:LEU:HG	1:8:A:TYR:HD1	3	0.85
(2,254)	1:7:A:LEU:HG	1:8:A:TYR:HD2	3	0.85
(2,248)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HB3	6	0.85
(2,248)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HB3	6	0.85
(2,58)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG2	3	0.85
(2,58)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG3	3	0.85
(2,33)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD2	5	0.85
(2,33)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD3	5	0.85
(2,33)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD2	7	0.85
(2,33)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD3	7	0.85
(1,510)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HD3	3	0.85
(1,510)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HD3	3	0.85
(1,510)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HD3	3	0.85
(1,434)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB2	10	0.85
(1,434)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB2	10	0.85
(1,434)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB2	10	0.85
(1,434)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB3	10	0.85
(1,434)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB3	10	0.85
(1,434)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB3	10	0.85
(1,324)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HZ3	4	0.85
(1,324)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HZ3	4	0.85
(1,286)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG3	1	0.85
(1,232)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HD1	3	0.85
(1,232)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HD2	3	0.85
(1,163)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HE22	8	0.85
(1,163)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HE22	9	0.85
(1,163)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HE22	10	0.85
(4,88)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD11	4	0.84
(4,88)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD12	4	0.84
(4,88)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD13	4	0.84
(4,11)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD2	6	0.84
(4,11)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD3	6	0.84
(3,225)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG2	3	0.84
(2,347)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD11	4	0.84
(2,347)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD12	4	0.84
(2,347)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD13	4	0.84
(2,283)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG2	3	0.84
(2,33)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD2	6	0.84

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,33)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD3	6	0.84
(1,518)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HE1	8	0.84
(1,518)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HE2	8	0.84
(1,507)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	4	0.84
(1,507)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	4	0.84
(1,507)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	4	0.84
(1,456)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA3	9	0.84
(1,456)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA3	9	0.84
(1,456)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA3	9	0.84
(1,330)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HG2	5	0.84
(1,310)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HD3	2	0.84
(1,305)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HG2	2	0.84
(1,266)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD21	10	0.84
(1,266)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD22	10	0.84
(1,266)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD23	10	0.84
(1,266)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD21	10	0.84
(1,266)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD22	10	0.84
(1,266)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD23	10	0.84
(1,259)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:HE1	6	0.84
(1,259)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:HE2	6	0.84
(1,259)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:HE1	6	0.84
(1,259)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:HE2	6	0.84
(1,259)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:HE1	6	0.84
(1,259)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:HE2	6	0.84
(1,258)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:HD1	3	0.84
(1,258)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:HD2	3	0.84
(1,258)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:HD1	3	0.84
(1,258)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:HD2	3	0.84
(1,258)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:HD1	3	0.84
(1,258)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:HD2	3	0.84
(1,252)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	2	0.84
(1,252)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	2	0.84
(1,201)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HG3	10	0.84
(1,72)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HA	7	0.84
(4,177)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HG3	1	0.83
(4,177)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HG3	3	0.83
(4,131)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG11	10	0.83
(4,131)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG12	10	0.83
(4,131)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG13	10	0.83
(4,131)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG11	10	0.83
(4,131)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG12	10	0.83
(4,131)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG13	10	0.83

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,131)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG11	10	0.83
(4,131)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG12	10	0.83
(4,131)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG13	10	0.83
(4,93)	1:9:A:ILE:HB	1:11:A:TRP:H	5	0.83
(3,280)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HA	4	0.83
(3,280)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HA	4	0.83
(3,280)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HA	4	0.83
(3,265)	1:21:A:ARG:H	1:22:A:PRO:HD2	3	0.83
(3,218)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HD2	2	0.83
(2,526)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HG3	1	0.83
(2,526)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HG3	3	0.83
(2,427)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG11	10	0.83
(2,427)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG12	10	0.83
(2,427)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG13	10	0.83
(2,427)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG11	10	0.83
(2,427)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG12	10	0.83
(2,427)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG13	10	0.83
(2,427)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG11	10	0.83
(2,427)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG12	10	0.83
(2,427)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG13	10	0.83
(2,389)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HA	4	0.83
(2,389)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HA	4	0.83
(2,389)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HA	4	0.83
(2,360)	1:21:A:ARG:H	1:22:A:PRO:HD2	3	0.83
(2,354)	1:9:A:ILE:HB	1:11:A:TRP:H	5	0.83
(2,274)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HD2	2	0.83
(1,487)	1:8:A:TYR:HB2	1:24:A:PRO:HA	5	0.83
(1,456)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA3	1	0.83
(1,456)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA3	1	0.83
(1,456)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA3	1	0.83
(1,365)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:H	10	0.83
(1,365)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:H	10	0.83
(1,365)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:H	10	0.83
(1,310)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HD3	1	0.83
(1,252)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	4	0.83
(1,252)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	4	0.83
(1,201)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HG3	9	0.83
(1,29)	1:14:A:ASP:H	1:14:A:ASP:HB2	1	0.83
(4,114)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	5	0.82
(4,114)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	5	0.82
(4,111)	1:23:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HD2	4	0.82
(4,80)	1:11:A:TRP:HE1	1:24:A:PRO:HD2	1	0.82

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,52)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	4	0.82
(4,52)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	4	0.82
(4,52)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	4	0.82
(4,52)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	4	0.82
(4,52)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	4	0.82
(4,52)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	4	0.82
(2,402)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	5	0.82
(2,402)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	5	0.82
(2,394)	1:23:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HD2	4	0.82
(2,334)	1:11:A:TRP:HE1	1:24:A:PRO:HD2	1	0.82
(2,261)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	4	0.82
(2,261)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	4	0.82
(2,261)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	4	0.82
(2,261)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	4	0.82
(2,261)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	4	0.82
(2,261)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	4	0.82
(1,529)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HB3	6	0.82
(1,456)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA3	4	0.82
(1,456)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA3	4	0.82
(1,456)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA3	4	0.82
(1,456)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA3	5	0.82
(1,456)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA3	5	0.82
(1,456)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA3	5	0.82
(1,438)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG21	2	0.82
(1,438)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG22	2	0.82
(1,438)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG23	2	0.82
(1,391)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HD2	2	0.82
(1,365)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:H	9	0.82
(1,365)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:H	9	0.82
(1,365)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:H	9	0.82
(1,324)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HZ3	8	0.82
(1,324)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HZ3	8	0.82
(1,321)	1:11:A:TRP:HE3	1:24:A:PRO:HD2	3	0.82
(1,313)	1:11:A:TRP:HE3	1:24:A:PRO:HA	5	0.82
(1,305)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HG2	1	0.82
(1,305)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HG2	3	0.82
(1,294)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD21	3	0.82
(1,294)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD22	3	0.82
(1,294)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD23	3	0.82
(1,283)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG3	8	0.82
(1,258)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:HD1	8	0.82
(1,258)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:HD2	8	0.82

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,258)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:HD1	8	0.82
(1,258)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:HD2	8	0.82
(1,258)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:HD1	8	0.82
(1,258)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:HD2	8	0.82
(1,245)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB2	8	0.82
(1,245)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB2	8	0.82
(1,203)	1:15:A:GLY:H	1:15:A:GLY:HA2	2	0.82
(1,143)	1:8:A:TYR:H	1:8:A:TYR:HB2	7	0.82
(1,141)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:HB2	5	0.82
(1,72)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HA	8	0.82
(1,12)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG11	8	0.82
(1,12)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG12	8	0.82
(1,12)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG13	8	0.82
(1,11)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HB	2	0.82
(1,11)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HB	9	0.82
(4,177)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HG3	9	0.81
(4,166)	1:12:A:LEU:HG	1:16:A:GLY:HA2	8	0.81
(4,148)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	6	0.81
(4,148)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	6	0.81
(4,148)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	6	0.81
(4,148)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	8	0.81
(4,148)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	8	0.81
(4,148)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	8	0.81
(4,144)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HE2	4	0.81
(4,144)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HE2	4	0.81
(4,144)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HE2	4	0.81
(4,144)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HE3	4	0.81
(4,144)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HE3	4	0.81
(4,144)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HE3	4	0.81
(4,136)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA2	6	0.81
(4,136)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA2	6	0.81
(4,136)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA2	6	0.81
(4,122)	1:1:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD2	9	0.81
(4,122)	1:1:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD3	9	0.81
(4,122)	1:1:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD2	9	0.81
(4,10)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE2	7	0.81
(4,10)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE3	7	0.81
(3,201)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HB3	1	0.81
(3,201)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HB3	1	0.81
(2,526)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HG3	9	0.81
(2,498)	1:12:A:LEU:HG	1:16:A:GLY:HA2	8	0.81
(2,459)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	6	0.81

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,459)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	6	0.81
(2,459)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	6	0.81
(2,459)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	8	0.81
(2,459)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	8	0.81
(2,459)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	8	0.81
(2,450)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HE2	4	0.81
(2,450)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HE2	4	0.81
(2,450)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HE2	4	0.81
(2,450)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HE3	4	0.81
(2,450)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HE3	4	0.81
(2,450)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HE3	4	0.81
(2,436)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA2	6	0.81
(2,436)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA2	6	0.81
(2,436)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA2	6	0.81
(2,413)	1:1:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD2	9	0.81
(2,413)	1:1:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD3	9	0.81
(2,413)	1:1:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD2	9	0.81
(2,248)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HB3	1	0.81
(2,248)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HB3	1	0.81
(2,31)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE2	7	0.81
(2,31)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE3	7	0.81
(1,529)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HB3	3	0.81
(1,519)	1:8:A:TYR:HE1	1:25:A:SER:HA	6	0.81
(1,519)	1:8:A:TYR:HE2	1:25:A:SER:HA	6	0.81
(1,453)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HB3	5	0.81
(1,453)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HB3	5	0.81
(1,453)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HB3	5	0.81
(1,421)	1:1:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	5	0.81
(1,421)	1:1:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	5	0.81
(1,421)	1:1:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	5	0.81
(1,421)	1:1:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB1	5	0.81
(1,421)	1:1:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB2	5	0.81
(1,421)	1:1:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB3	5	0.81
(1,396)	1:8:A:TYR:HB3	1:23:A:PRO:HD3	5	0.81
(1,396)	1:23:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HD3	5	0.81
(1,294)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD21	6	0.81
(1,294)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD22	6	0.81
(1,294)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD23	6	0.81
(1,187)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HE2	6	0.81
(1,187)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HE3	6	0.81
(1,187)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HE2	6	0.81
(1,187)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HE3	6	0.81

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,87)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD3	7	0.81
(1,73)	1:15:A:GLY:HA2	1:15:A:GLY:HA3	3	0.81
(1,73)	1:15:A:GLY:HA2	1:15:A:GLY:HA3	5	0.81
(1,73)	1:15:A:GLY:HA2	1:15:A:GLY:HA3	6	0.81
(1,73)	1:15:A:GLY:HA2	1:15:A:GLY:HA3	7	0.81
(1,73)	1:15:A:GLY:HA2	1:15:A:GLY:HA3	8	0.81
(1,73)	1:15:A:GLY:HA2	1:15:A:GLY:HA3	9	0.81
(1,73)	1:15:A:GLY:HA2	1:15:A:GLY:HA3	10	0.81
(4,136)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA2	10	0.8
(4,136)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA2	10	0.8
(4,136)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA2	10	0.8
(4,100)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	7	0.8
(4,52)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	1	0.8
(4,52)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	1	0.8
(4,52)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	1	0.8
(4,52)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	1	0.8
(4,52)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	1	0.8
(4,52)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	1	0.8
(4,8)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	6	0.8
(4,8)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	6	0.8
(3,225)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG2	6	0.8
(2,436)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA2	10	0.8
(2,436)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA2	10	0.8
(2,436)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA2	10	0.8
(2,371)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	7	0.8
(2,283)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG2	6	0.8
(2,261)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	1	0.8
(2,261)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	1	0.8
(2,261)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	1	0.8
(2,261)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	1	0.8
(2,261)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	1	0.8
(2,261)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	1	0.8
(2,24)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	6	0.8
(2,24)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	6	0.8
(1,529)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HB3	8	0.8
(1,510)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HD3	2	0.8
(1,510)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HD3	2	0.8
(1,510)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HD3	2	0.8
(1,510)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HD3	6	0.8
(1,510)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HD3	6	0.8
(1,510)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HD3	6	0.8
(1,434)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB2	9	0.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,434)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB2	9	0.8
(1,434)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB2	9	0.8
(1,434)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB3	9	0.8
(1,434)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB3	9	0.8
(1,434)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB3	9	0.8
(1,365)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:H	6	0.8
(1,365)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:H	6	0.8
(1,365)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:H	6	0.8
(1,357)	1:11:A:TRP:H	1:24:A:PRO:HB3	10	0.8
(1,324)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HZ3	10	0.8
(1,324)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HZ3	10	0.8
(1,283)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG3	7	0.8
(1,252)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	8	0.8
(1,252)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	8	0.8
(1,73)	1:15:A:GLY:HA2	1:15:A:GLY:HA3	1	0.8
(1,73)	1:15:A:GLY:HA2	1:15:A:GLY:HA3	2	0.8
(1,73)	1:15:A:GLY:HA2	1:15:A:GLY:HA3	4	0.8
(1,11)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HB	3	0.8
(4,67)	1:11:A:TRP:HZ3	1:23:A:PRO:HB2	2	0.79
(4,66)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD11	3	0.79
(4,66)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD12	3	0.79
(4,66)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD13	3	0.79
(4,66)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD11	4	0.79
(4,66)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD12	4	0.79
(4,66)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD13	4	0.79
(4,8)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	7	0.79
(4,8)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	7	0.79
(3,283)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HD3	10	0.79
(3,225)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG2	1	0.79
(3,210)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	1	0.79
(3,210)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	1	0.79
(3,210)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	1	0.79
(3,210)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	1	0.79
(3,210)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	1	0.79
(3,210)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	1	0.79
(3,210)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	6	0.79
(3,210)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	6	0.79
(3,210)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	6	0.79
(3,210)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	6	0.79
(3,210)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	6	0.79
(3,210)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	6	0.79
(3,210)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	7	0.79

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,210)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	7	0.79
(3,210)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	7	0.79
(3,210)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	7	0.79
(3,210)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	7	0.79
(3,210)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	7	0.79
(3,201)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HB3	4	0.79
(3,201)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HB3	4	0.79
(2,393)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HD3	10	0.79
(2,303)	1:11:A:TRP:HZ3	1:23:A:PRO:HB2	2	0.79
(2,302)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD11	3	0.79
(2,302)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD12	3	0.79
(2,302)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD13	3	0.79
(2,302)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD11	4	0.79
(2,302)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD12	4	0.79
(2,302)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD13	4	0.79
(2,283)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG2	1	0.79
(2,264)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	1	0.79
(2,264)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	1	0.79
(2,264)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	1	0.79
(2,264)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	1	0.79
(2,264)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	1	0.79
(2,264)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	1	0.79
(2,264)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	6	0.79
(2,264)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	6	0.79
(2,264)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	6	0.79
(2,264)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	6	0.79
(2,264)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	6	0.79
(2,264)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	6	0.79
(2,264)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	7	0.79
(2,264)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	7	0.79
(2,264)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	7	0.79
(2,264)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	7	0.79
(2,264)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	7	0.79
(2,264)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	7	0.79
(2,248)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HB3	4	0.79
(2,248)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HB3	4	0.79
(2,24)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	7	0.79
(2,24)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	7	0.79
(1,520)	1:11:A:TRP:HZ3	1:24:A:PRO:HG3	2	0.79
(1,510)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HD3	1	0.79
(1,510)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HD3	1	0.79
(1,510)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HD3	1	0.79

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,470)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	2	0.79
(1,470)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	2	0.79
(1,470)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	2	0.79
(1,461)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD21	6	0.79
(1,461)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD22	6	0.79
(1,461)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD23	6	0.79
(1,456)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA3	2	0.79
(1,456)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA3	2	0.79
(1,456)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA3	2	0.79
(1,456)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA3	3	0.79
(1,456)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA3	3	0.79
(1,456)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA3	3	0.79
(1,438)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG21	3	0.79
(1,438)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG22	3	0.79
(1,438)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG23	3	0.79
(1,402)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	4	0.79
(1,402)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	4	0.79
(1,348)	1:8:A:TYR:H	1:9:A:ILE:HD11	7	0.79
(1,348)	1:8:A:TYR:H	1:9:A:ILE:HD12	7	0.79
(1,348)	1:8:A:TYR:H	1:9:A:ILE:HD13	7	0.79
(1,313)	1:11:A:TRP:HE3	1:24:A:PRO:HA	1	0.79
(1,235)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HA	1	0.79
(1,235)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HA	1	0.79
(1,72)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HA	2	0.79
(1,11)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HB	10	0.79
(1,4)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:H	4	0.79
(4,162)	1:24:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:HA	10	0.78
(4,153)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HD11	6	0.78
(4,153)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HD12	6	0.78
(4,153)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HD13	6	0.78
(4,114)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	1	0.78
(4,114)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	1	0.78
(4,103)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	5	0.78
(4,103)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB3	5	0.78
(3,117)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG12	6	0.78
(3,45)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HD2	2	0.78
(2,486)	1:24:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:HA	10	0.78
(2,466)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HD11	6	0.78
(2,466)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HD12	6	0.78
(2,466)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HD13	6	0.78
(2,402)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	1	0.78
(2,402)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	1	0.78

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,374)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	5	0.78
(2,374)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB3	5	0.78
(2,145)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG12	6	0.78
(2,56)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HD2	2	0.78
(1,529)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HB3	2	0.78
(1,520)	1:11:A:TRP:HZ3	1:24:A:PRO:HG3	6	0.78
(1,415)	1:7:A:LEU:HB2	1:8:A:TYR:HB3	7	0.78
(1,386)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HB3	2	0.78
(1,321)	1:11:A:TRP:HE3	1:24:A:PRO:HD2	2	0.78
(1,294)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD21	10	0.78
(1,294)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD22	10	0.78
(1,294)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD23	10	0.78
(1,87)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD3	10	0.78
(1,29)	1:14:A:ASP:H	1:14:A:ASP:HB2	3	0.78
(1,3)	1:4:A:ALA:H	1:4:A:ALA:HA	2	0.78
(1,3)	1:4:A:ALA:H	1:4:A:ALA:HA	3	0.78
(1,3)	1:4:A:ALA:H	1:4:A:ALA:HA	8	0.78
(4,162)	1:24:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:HA	9	0.77
(4,139)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HB2	3	0.77
(4,139)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HB2	3	0.77
(4,139)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HB2	3	0.77
(4,139)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HB3	3	0.77
(4,139)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HB3	3	0.77
(4,139)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HB3	3	0.77
(4,136)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA2	7	0.77
(4,136)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA2	7	0.77
(4,136)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA2	7	0.77
(4,100)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	8	0.77
(4,93)	1:9:A:ILE:HB	1:11:A:TRP:H	4	0.77
(4,77)	1:11:A:TRP:HE1	1:12:A:LEU:HD11	10	0.77
(4,77)	1:11:A:TRP:HE1	1:12:A:LEU:HD12	10	0.77
(4,77)	1:11:A:TRP:HE1	1:12:A:LEU:HD13	10	0.77
(4,39)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HA	3	0.77
(4,39)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HA	3	0.77
(4,33)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD11	2	0.77
(4,33)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD12	2	0.77
(4,33)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD13	2	0.77
(4,33)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD11	4	0.77
(4,33)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD12	4	0.77
(4,33)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD13	4	0.77
(3,311)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HD2	3	0.77
(3,311)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HD2	3	0.77

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,311)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HD2	3	0.77
(3,206)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB3	8	0.77
(3,206)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB3	8	0.77
(3,117)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG12	9	0.77
(3,117)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG12	10	0.77
(2,486)	1:24:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:HA	9	0.77
(2,458)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HD2	3	0.77
(2,458)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HD2	3	0.77
(2,458)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HD2	3	0.77
(2,441)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HB2	3	0.77
(2,441)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HB2	3	0.77
(2,441)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HB2	3	0.77
(2,441)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HB3	3	0.77
(2,441)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HB3	3	0.77
(2,441)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HB3	3	0.77
(2,436)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA2	7	0.77
(2,436)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA2	7	0.77
(2,436)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA2	7	0.77
(2,371)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	8	0.77
(2,354)	1:9:A:ILE:HB	1:11:A:TRP:H	4	0.77
(2,329)	1:11:A:TRP:HE1	1:12:A:LEU:HD11	10	0.77
(2,329)	1:11:A:TRP:HE1	1:12:A:LEU:HD12	10	0.77
(2,329)	1:11:A:TRP:HE1	1:12:A:LEU:HD13	10	0.77
(2,256)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB3	8	0.77
(2,256)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB3	8	0.77
(2,229)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HA	3	0.77
(2,229)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HA	3	0.77
(2,174)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD11	2	0.77
(2,174)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD12	2	0.77
(2,174)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD13	2	0.77
(2,174)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD11	4	0.77
(2,174)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD12	4	0.77
(2,174)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD13	4	0.77
(2,145)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG12	9	0.77
(2,145)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG12	10	0.77
(1,520)	1:11:A:TRP:HZ3	1:24:A:PRO:HG3	5	0.77
(1,510)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HD3	8	0.77
(1,510)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HD3	8	0.77
(1,510)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HD3	8	0.77
(1,449)	1:12:A:LEU:HD11	1:14:A:ASP:HB2	10	0.77
(1,449)	1:12:A:LEU:HD12	1:14:A:ASP:HB2	10	0.77
(1,449)	1:12:A:LEU:HD13	1:14:A:ASP:HB2	10	0.77

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,347)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD11	8	0.77
(1,347)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD12	8	0.77
(1,347)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HD13	8	0.77
(1,325)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HE3	7	0.77
(1,325)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HE3	7	0.77
(1,275)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HD3	6	0.77
(1,272)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD3	8	0.77
(1,252)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	9	0.77
(1,252)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	9	0.77
(1,208)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HG3	3	0.77
(1,136)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD21	8	0.77
(1,136)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD22	8	0.77
(1,136)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD23	8	0.77
(1,100)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HD2	7	0.77
(1,87)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD3	9	0.77
(1,29)	1:14:A:ASP:H	1:14:A:ASP:HB2	5	0.77
(1,3)	1:4:A:ALA:H	1:4:A:ALA:HA	9	0.77
(1,3)	1:4:A:ALA:H	1:4:A:ALA:HA	10	0.77
(4,93)	1:9:A:ILE:HB	1:11:A:TRP:H	6	0.76
(3,311)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HD2	2	0.76
(3,311)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HD2	2	0.76
(3,311)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HD2	2	0.76
(3,284)	1:19:A:SER:HB3	1:21:A:ARG:HD2	9	0.76
(3,218)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HD2	9	0.76
(3,201)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HB3	2	0.76
(3,201)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HB3	2	0.76
(3,45)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HD2	1	0.76
(3,45)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HD2	5	0.76
(2,458)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HD2	2	0.76
(2,458)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HD2	2	0.76
(2,458)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HD2	2	0.76
(2,395)	1:19:A:SER:HB3	1:21:A:ARG:HD2	9	0.76
(2,354)	1:9:A:ILE:HB	1:11:A:TRP:H	6	0.76
(2,274)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HD2	9	0.76
(2,248)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HB3	2	0.76
(2,248)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HB3	2	0.76
(2,56)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HD2	1	0.76
(2,56)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HD2	5	0.76
(1,520)	1:11:A:TRP:HZ3	1:24:A:PRO:HG3	8	0.76
(1,486)	1:24:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:HA	6	0.76
(1,403)	1:19:A:SER:HB3	1:21:A:ARG:HG2	9	0.76
(1,400)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD2	2	0.76

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,395)	1:19:A:SER:HB3	1:21:A:ARG:HD2	5	0.76
(1,330)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HG2	7	0.76
(1,320)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HE3	10	0.76
(1,247)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB3	10	0.76
(1,247)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB3	10	0.76
(1,87)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD3	3	0.76
(1,87)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD3	5	0.76
(1,29)	1:14:A:ASP:H	1:14:A:ASP:HB2	8	0.76
(1,29)	1:14:A:ASP:H	1:14:A:ASP:HB2	10	0.76
(1,3)	1:4:A:ALA:H	1:4:A:ALA:HA	4	0.76
(4,179)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HB	2	0.75
(4,179)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HB	2	0.75
(4,179)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HB	2	0.75
(4,33)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD11	1	0.75
(4,33)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD12	1	0.75
(4,33)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD13	1	0.75
(3,311)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HD2	1	0.75
(3,311)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HD2	1	0.75
(3,311)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HD2	1	0.75
(3,265)	1:21:A:ARG:H	1:22:A:PRO:HD2	1	0.75
(3,265)	1:21:A:ARG:H	1:22:A:PRO:HD2	8	0.75
(3,218)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HD2	3	0.75
(3,117)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG12	5	0.75
(3,117)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG12	8	0.75
(2,528)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HB	2	0.75
(2,528)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HB	2	0.75
(2,528)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HB	2	0.75
(2,458)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HD2	1	0.75
(2,458)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HD2	1	0.75
(2,458)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HD2	1	0.75
(2,360)	1:21:A:ARG:H	1:22:A:PRO:HD2	1	0.75
(2,360)	1:21:A:ARG:H	1:22:A:PRO:HD2	8	0.75
(2,274)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HD2	3	0.75
(2,174)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD11	1	0.75
(2,174)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD12	1	0.75
(2,174)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD13	1	0.75
(2,145)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG12	5	0.75
(2,145)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG12	8	0.75
(1,520)	1:11:A:TRP:HZ3	1:24:A:PRO:HG3	4	0.75
(1,518)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HE1	3	0.75
(1,518)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HE2	3	0.75
(1,510)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HD3	5	0.75

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,510)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HD3	5	0.75
(1,510)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HD3	5	0.75
(1,507)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	9	0.75
(1,507)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	9	0.75
(1,507)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	9	0.75
(1,505)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HD3	9	0.75
(1,505)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HD3	9	0.75
(1,505)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HD3	9	0.75
(1,453)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HB3	6	0.75
(1,453)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HB3	6	0.75
(1,453)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HB3	6	0.75
(1,437)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG2	8	0.75
(1,437)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG2	8	0.75
(1,437)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG2	8	0.75
(1,437)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG3	8	0.75
(1,437)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG3	8	0.75
(1,437)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG3	8	0.75
(1,362)	1:24:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	1	0.75
(1,342)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:H	6	0.75
(1,342)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:H	6	0.75
(1,342)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:H	6	0.75
(1,340)	1:10:A:GLN:HG2	1:13:A:LYS:H	1	0.75
(1,340)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:H	1	0.75
(1,340)	1:10:A:GLN:HG2	1:13:A:LYS:H	5	0.75
(1,340)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:H	5	0.75
(1,325)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HE3	10	0.75
(1,325)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HE3	10	0.75
(1,324)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HZ3	5	0.75
(1,324)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HZ3	5	0.75
(1,320)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HE3	9	0.75
(1,267)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD21	8	0.75
(1,267)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD22	8	0.75
(1,267)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD23	8	0.75
(1,267)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD21	8	0.75
(1,267)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD22	8	0.75
(1,267)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD23	8	0.75
(1,245)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB2	10	0.75
(1,245)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB2	10	0.75
(1,172)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HB3	2	0.75
(1,141)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:HB2	3	0.75
(1,136)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD21	1	0.75
(1,136)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD22	1	0.75

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,136)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD23	1	0.75
(1,3)	1:4:A:ALA:H	1:4:A:ALA:HA	1	0.75
(4,179)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HB	3	0.74
(4,179)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HB	3	0.74
(4,179)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HB	3	0.74
(4,179)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HB	8	0.74
(4,179)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HB	8	0.74
(4,179)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HB	8	0.74
(4,177)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HG3	10	0.74
(4,166)	1:12:A:LEU:HG	1:16:A:GLY:HA2	4	0.74
(4,158)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:HZ3	5	0.74
(4,158)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:HZ3	5	0.74
(4,139)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HB2	10	0.74
(4,139)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HB2	10	0.74
(4,139)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HB2	10	0.74
(4,139)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HB3	10	0.74
(4,139)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HB3	10	0.74
(4,139)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HB3	10	0.74
(4,136)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA2	1	0.74
(4,136)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA2	1	0.74
(4,136)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA2	1	0.74
(4,136)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA2	5	0.74
(4,136)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA2	5	0.74
(4,136)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA2	5	0.74
(4,11)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD2	1	0.74
(4,11)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD3	1	0.74
(4,8)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	1	0.74
(4,8)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	1	0.74
(4,7)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE1	1	0.74
(4,7)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE2	1	0.74
(3,267)	1:24:A:PRO:HG3	1:25:A:SER:H	5	0.74
(3,117)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG12	2	0.74
(3,117)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG12	3	0.74
(3,117)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG12	4	0.74
(2,528)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HB	3	0.74
(2,528)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HB	3	0.74
(2,528)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HB	3	0.74
(2,528)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HB	8	0.74
(2,528)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HB	8	0.74
(2,528)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HB	8	0.74
(2,526)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HG3	10	0.74
(2,498)	1:12:A:LEU:HG	1:16:A:GLY:HA2	4	0.74

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,476)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:HZ3	5	0.74
(2,476)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:HZ3	5	0.74
(2,441)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HB2	10	0.74
(2,441)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HB2	10	0.74
(2,441)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HB2	10	0.74
(2,441)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HB3	10	0.74
(2,441)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HB3	10	0.74
(2,441)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HB3	10	0.74
(2,436)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA2	1	0.74
(2,436)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA2	1	0.74
(2,436)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA2	1	0.74
(2,436)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA2	5	0.74
(2,436)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA2	5	0.74
(2,436)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA2	5	0.74
(2,363)	1:24:A:PRO:HG3	1:25:A:SER:H	5	0.74
(2,145)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG12	2	0.74
(2,145)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG12	3	0.74
(2,145)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG12	4	0.74
(2,33)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD2	1	0.74
(2,33)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD3	1	0.74
(2,24)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	1	0.74
(2,24)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	1	0.74
(2,21)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE1	1	0.74
(2,21)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE2	1	0.74
(1,529)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HB3	5	0.74
(1,520)	1:11:A:TRP:HZ3	1:24:A:PRO:HG3	1	0.74
(1,491)	1:8:A:TYR:HB2	1:24:A:PRO:HB3	9	0.74
(1,467)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG11	8	0.74
(1,467)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG12	8	0.74
(1,467)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG13	8	0.74
(1,386)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HB3	1	0.74
(1,378)	1:11:A:TRP:HA	1:14:A:ASP:HB3	10	0.74
(1,321)	1:11:A:TRP:HE3	1:24:A:PRO:HD2	9	0.74
(1,321)	1:11:A:TRP:HE3	1:24:A:PRO:HD2	10	0.74
(1,317)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	10	0.74
(1,272)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD3	3	0.74
(1,262)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	10	0.74
(1,262)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	10	0.74
(1,262)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	10	0.74
(1,262)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	10	0.74
(1,262)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	10	0.74
(1,262)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	10	0.74

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,237)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HB2	9	0.74
(1,237)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HB2	9	0.74
(1,172)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HB3	1	0.74
(1,141)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:HB2	8	0.74
(1,48)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG3	4	0.74
(4,177)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HG3	6	0.73
(4,170)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	1	0.73
(4,170)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	1	0.73
(4,170)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	1	0.73
(4,146)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB3	5	0.73
(4,146)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB3	5	0.73
(4,146)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB3	5	0.73
(4,139)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HB2	2	0.73
(4,139)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HB2	2	0.73
(4,139)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HB2	2	0.73
(4,139)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HB3	2	0.73
(4,139)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HB3	2	0.73
(4,139)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HB3	2	0.73
(4,114)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	2	0.73
(4,114)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	2	0.73
(4,114)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	10	0.73
(4,114)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	10	0.73
(4,83)	1:10:A:GLN:HG2	1:13:A:LYS:H	7	0.73
(4,83)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:H	7	0.73
(4,33)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD11	3	0.73
(4,33)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD12	3	0.73
(4,33)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD13	3	0.73
(4,33)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD11	7	0.73
(4,33)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD12	7	0.73
(4,33)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD13	7	0.73
(4,33)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD11	9	0.73
(4,33)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD12	9	0.73
(4,33)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD13	9	0.73
(4,33)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD11	10	0.73
(4,33)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD12	10	0.73
(4,33)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD13	10	0.73
(4,22)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HG	1	0.73
(4,18)	1:24:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	7	0.73
(3,311)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HD2	6	0.73
(3,311)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HD2	6	0.73
(3,311)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HD2	6	0.73
(3,285)	1:14:A:ASP:HB2	1:19:A:SER:HB3	6	0.73

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,283)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HD3	9	0.73
(3,218)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HD2	10	0.73
(3,206)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB3	3	0.73
(3,206)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB3	3	0.73
(2,526)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HG3	6	0.73
(2,507)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	1	0.73
(2,507)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	1	0.73
(2,507)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	1	0.73
(2,458)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HD2	6	0.73
(2,458)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HD2	6	0.73
(2,458)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HD2	6	0.73
(2,454)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB3	5	0.73
(2,454)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB3	5	0.73
(2,454)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB3	5	0.73
(2,441)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HB2	2	0.73
(2,441)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HB2	2	0.73
(2,441)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HB2	2	0.73
(2,441)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HB3	2	0.73
(2,441)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HB3	2	0.73
(2,441)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HB3	2	0.73
(2,402)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	2	0.73
(2,402)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	2	0.73
(2,402)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	10	0.73
(2,402)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	10	0.73
(2,397)	1:14:A:ASP:HB2	1:19:A:SER:HB3	6	0.73
(2,393)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HD3	9	0.73
(2,340)	1:10:A:GLN:HG2	1:13:A:LYS:H	7	0.73
(2,340)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:H	7	0.73
(2,274)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HD2	10	0.73
(2,256)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB3	3	0.73
(2,256)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB3	3	0.73
(2,174)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD11	3	0.73
(2,174)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD12	3	0.73
(2,174)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD13	3	0.73
(2,174)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD11	7	0.73
(2,174)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD12	7	0.73
(2,174)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD13	7	0.73
(2,174)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD11	9	0.73
(2,174)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD12	9	0.73
(2,174)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD13	9	0.73
(2,174)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD11	10	0.73
(2,174)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD12	10	0.73

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,174)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD13	10	0.73
(2,123)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HG	1	0.73
(2,96)	1:24:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	7	0.73
(1,529)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HB3	7	0.73
(1,507)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	10	0.73
(1,507)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	10	0.73
(1,507)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	10	0.73
(1,487)	1:8:A:TYR:HB2	1:24:A:PRO:HA	6	0.73
(1,448)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG11	4	0.73
(1,448)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG12	4	0.73
(1,448)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG13	4	0.73
(1,448)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG11	4	0.73
(1,448)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG12	4	0.73
(1,448)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG13	4	0.73
(1,448)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG11	9	0.73
(1,448)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG12	9	0.73
(1,448)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG13	9	0.73
(1,448)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG11	9	0.73
(1,448)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG12	9	0.73
(1,448)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG13	9	0.73
(1,413)	1:1:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD2	10	0.73
(1,413)	1:1:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD3	10	0.73
(1,413)	1:1:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD2	10	0.73
(1,413)	1:1:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD3	10	0.73
(1,357)	1:11:A:TRP:H	1:24:A:PRO:HB3	2	0.73
(1,317)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	9	0.73
(1,294)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD21	9	0.73
(1,294)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD22	9	0.73
(1,294)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD23	9	0.73
(1,172)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HB3	3	0.73
(1,142)	1:8:A:TYR:H	1:8:A:TYR:HB3	1	0.73
(1,100)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HD2	9	0.73
(1,100)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HD2	10	0.73
(1,48)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG3	1	0.73
(1,48)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG3	3	0.73
(1,41)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HB3	3	0.73
(1,2)	1:4:A:ALA:H	1:4:A:ALA:HB1	5	0.73
(1,2)	1:4:A:ALA:H	1:4:A:ALA:HB2	5	0.73
(1,2)	1:4:A:ALA:H	1:4:A:ALA:HB3	5	0.73
(1,2)	1:4:A:ALA:H	1:4:A:ALA:HB1	7	0.73
(1,2)	1:4:A:ALA:H	1:4:A:ALA:HB2	7	0.73
(1,2)	1:4:A:ALA:H	1:4:A:ALA:HB3	7	0.73

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,143)	1:12:A:LEU:HD11	1:14:A:ASP:HB2	9	0.72
(4,143)	1:12:A:LEU:HD12	1:14:A:ASP:HB2	9	0.72
(4,143)	1:12:A:LEU:HD13	1:14:A:ASP:HB2	9	0.72
(4,114)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	9	0.72
(4,114)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	9	0.72
(4,93)	1:9:A:ILE:HB	1:11:A:TRP:H	2	0.72
(4,67)	1:11:A:TRP:HZ3	1:23:A:PRO:HB2	9	0.72
(4,33)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD11	5	0.72
(4,33)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD12	5	0.72
(4,33)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD13	5	0.72
(4,33)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD11	6	0.72
(4,33)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD12	6	0.72
(4,33)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD13	6	0.72
(4,33)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD11	8	0.72
(4,33)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD12	8	0.72
(4,33)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD13	8	0.72
(3,231)	1:11:A:TRP:HZ3	1:23:A:PRO:HG2	6	0.72
(3,45)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HD2	3	0.72
(2,449)	1:12:A:LEU:HD11	1:14:A:ASP:HB2	9	0.72
(2,449)	1:12:A:LEU:HD12	1:14:A:ASP:HB2	9	0.72
(2,449)	1:12:A:LEU:HD13	1:14:A:ASP:HB2	9	0.72
(2,402)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	9	0.72
(2,402)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	9	0.72
(2,354)	1:9:A:ILE:HB	1:11:A:TRP:H	2	0.72
(2,303)	1:11:A:TRP:HZ3	1:23:A:PRO:HB2	9	0.72
(2,292)	1:11:A:TRP:HZ3	1:23:A:PRO:HG2	6	0.72
(2,174)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD11	5	0.72
(2,174)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD12	5	0.72
(2,174)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD13	5	0.72
(2,174)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD11	6	0.72
(2,174)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD12	6	0.72
(2,174)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD13	6	0.72
(2,174)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD11	8	0.72
(2,174)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD12	8	0.72
(2,174)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD13	8	0.72
(2,56)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HD2	3	0.72
(1,520)	1:11:A:TRP:HZ3	1:24:A:PRO:HG3	3	0.72
(1,520)	1:11:A:TRP:HZ3	1:24:A:PRO:HG3	7	0.72
(1,520)	1:11:A:TRP:HZ3	1:24:A:PRO:HG3	9	0.72
(1,484)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HD1	8	0.72
(1,484)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HD2	8	0.72
(1,470)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	4	0.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,470)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	4	0.72
(1,470)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	4	0.72
(1,420)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	6	0.72
(1,420)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	6	0.72
(1,420)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	6	0.72
(1,386)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HB3	3	0.72
(1,325)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HE3	2	0.72
(1,325)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HE3	2	0.72
(1,321)	1:11:A:TRP:HE3	1:24:A:PRO:HD2	8	0.72
(1,320)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HE3	6	0.72
(1,208)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HG3	2	0.72
(1,172)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HB3	4	0.72
(1,172)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HB3	7	0.72
(1,136)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD21	7	0.72
(1,136)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD22	7	0.72
(1,136)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD23	7	0.72
(1,48)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG3	10	0.72
(1,41)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HB3	2	0.72
(1,41)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HB3	4	0.72
(1,41)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HB3	8	0.72
(1,41)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HB3	9	0.72
(1,41)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HB3	10	0.72
(1,18)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD11	6	0.72
(1,18)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD12	6	0.72
(1,18)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD13	6	0.72
(4,177)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HG3	2	0.71
(4,160)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HE1	7	0.71
(4,160)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HE2	7	0.71
(4,148)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	5	0.71
(4,148)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	5	0.71
(4,148)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	5	0.71
(4,50)	1:7:A:LEU:HG	1:8:A:TYR:HD1	9	0.71
(4,50)	1:7:A:LEU:HG	1:8:A:TYR:HD2	9	0.71
(4,18)	1:24:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	8	0.71
(3,294)	1:10:A:GLN:HG2	1:13:A:LYS:HD2	2	0.71
(3,294)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:HD2	2	0.71
(3,294)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:HD3	2	0.71
(3,267)	1:24:A:PRO:HG3	1:25:A:SER:H	6	0.71
(3,265)	1:21:A:ARG:H	1:22:A:PRO:HD2	7	0.71
(3,45)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HD2	6	0.71
(2,526)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HG3	2	0.71
(2,483)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HE1	7	0.71

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,483)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HE2	7	0.71
(2,459)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	5	0.71
(2,459)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	5	0.71
(2,459)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	5	0.71
(2,422)	1:10:A:GLN:HG2	1:13:A:LYS:HD2	2	0.71
(2,422)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:HD2	2	0.71
(2,422)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:HD3	2	0.71
(2,363)	1:24:A:PRO:HG3	1:25:A:SER:H	6	0.71
(2,360)	1:21:A:ARG:H	1:22:A:PRO:HD2	7	0.71
(2,254)	1:7:A:LEU:HG	1:8:A:TYR:HD1	9	0.71
(2,254)	1:7:A:LEU:HG	1:8:A:TYR:HD2	9	0.71
(2,96)	1:24:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	8	0.71
(2,56)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HD2	6	0.71
(1,520)	1:11:A:TRP:HZ3	1:24:A:PRO:HG3	10	0.71
(1,491)	1:8:A:TYR:HB2	1:24:A:PRO:HB3	8	0.71
(1,456)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA3	10	0.71
(1,456)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA3	10	0.71
(1,456)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA3	10	0.71
(1,428)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	4	0.71
(1,428)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	4	0.71
(1,428)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	4	0.71
(1,428)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	4	0.71
(1,428)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	4	0.71
(1,428)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	4	0.71
(1,428)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	4	0.71
(1,428)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	4	0.71
(1,428)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	4	0.71
(1,368)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD3	3	0.71
(1,365)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:H	2	0.71
(1,365)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:H	2	0.71
(1,365)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:H	2	0.71
(1,317)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	8	0.71
(1,305)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HG2	7	0.71
(1,272)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD3	1	0.71
(1,268)	1:11:A:TRP:HZ2	1:22:A:PRO:HA	9	0.71
(1,266)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD21	3	0.71
(1,266)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD22	3	0.71
(1,266)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD23	3	0.71
(1,266)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD21	3	0.71
(1,266)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD22	3	0.71
(1,266)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD23	3	0.71
(1,250)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG2	5	0.71

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,250)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG2	5	0.71
(1,172)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HB3	9	0.71
(1,141)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:HB2	1	0.71
(1,136)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD21	2	0.71
(1,136)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD22	2	0.71
(1,136)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD23	2	0.71
(1,136)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD21	3	0.71
(1,136)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD22	3	0.71
(1,136)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD23	3	0.71
(1,136)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD21	4	0.71
(1,136)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD22	4	0.71
(1,136)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD23	4	0.71
(1,48)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG3	2	0.71
(4,99)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG2	9	0.7
(4,99)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG3	9	0.7
(4,62)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD11	10	0.7
(4,62)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD12	10	0.7
(4,62)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD13	10	0.7
(4,22)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HG	2	0.7
(4,22)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HG	6	0.7
(4,22)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HG	7	0.7
(4,10)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE2	8	0.7
(4,10)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE3	8	0.7
(3,81)	1:24:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD2	1	0.7
(2,370)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG2	9	0.7
(2,370)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG3	9	0.7
(2,293)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD11	10	0.7
(2,293)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD12	10	0.7
(2,293)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD13	10	0.7
(2,123)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HG	2	0.7
(2,123)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HG	6	0.7
(2,123)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HG	7	0.7
(2,99)	1:24:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD2	1	0.7
(2,31)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE2	8	0.7
(2,31)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE3	8	0.7
(1,529)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HB3	1	0.7
(1,529)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HB3	4	0.7
(1,519)	1:8:A:TYR:HE1	1:25:A:SER:HA	7	0.7
(1,519)	1:8:A:TYR:HE2	1:25:A:SER:HA	7	0.7
(1,507)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	8	0.7
(1,507)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	8	0.7
(1,507)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	8	0.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,505)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HD3	7	0.7
(1,505)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HD3	7	0.7
(1,505)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HD3	7	0.7
(1,341)	1:10:A:GLN:HB2	1:13:A:LYS:H	4	0.7
(1,341)	1:10:A:GLN:HB2	1:13:A:LYS:H	6	0.7
(1,320)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HE3	2	0.7
(1,320)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HE3	5	0.7
(1,303)	1:11:A:TRP:HZ3	1:23:A:PRO:HB2	6	0.7
(1,286)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG3	2	0.7
(1,272)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD3	2	0.7
(1,259)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:HE1	2	0.7
(1,259)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:HE2	2	0.7
(1,259)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:HE1	2	0.7
(1,259)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:HE2	2	0.7
(1,259)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:HE1	2	0.7
(1,259)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:HE2	2	0.7
(1,258)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:HD1	2	0.7
(1,258)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:HD2	2	0.7
(1,258)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:HD1	2	0.7
(1,258)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:HD2	2	0.7
(1,258)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:HD1	2	0.7
(1,258)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:HD2	2	0.7
(1,258)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:HD1	10	0.7
(1,258)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:HD2	10	0.7
(1,258)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:HD1	10	0.7
(1,258)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:HD2	10	0.7
(1,258)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:HD1	10	0.7
(1,258)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:HD2	10	0.7
(1,172)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HB3	5	0.7
(1,172)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HB3	6	0.7
(1,172)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HB3	10	0.7
(1,136)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD21	10	0.7
(1,136)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD22	10	0.7
(1,136)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD23	10	0.7
(1,87)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD3	1	0.7
(1,87)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD3	2	0.7
(1,41)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HB3	1	0.7
(1,41)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HB3	7	0.7
(1,36)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HB2	9	0.7
(1,30)	1:14:A:ASP:H	1:14:A:ASP:HB3	10	0.7
(1,3)	1:4:A:ALA:H	1:4:A:ALA:HA	6	0.7
(4,136)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA2	4	0.69

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,136)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA2	4	0.69
(4,136)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA2	4	0.69
(4,99)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG2	10	0.69
(4,99)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG3	10	0.69
(4,22)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HG	3	0.69
(4,22)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HG	5	0.69
(3,286)	1:14:A:ASP:HB2	1:19:A:SER:HB2	8	0.69
(2,436)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA2	4	0.69
(2,436)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA2	4	0.69
(2,436)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA2	4	0.69
(2,398)	1:14:A:ASP:HB2	1:19:A:SER:HB2	8	0.69
(2,370)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG2	10	0.69
(2,370)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG3	10	0.69
(2,123)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HG	3	0.69
(2,123)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HG	5	0.69
(1,491)	1:8:A:TYR:HB2	1:24:A:PRO:HB3	10	0.69
(1,445)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HG2	4	0.69
(1,445)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HG2	4	0.69
(1,445)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HG2	4	0.69
(1,445)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HG3	4	0.69
(1,445)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HG3	4	0.69
(1,445)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HG3	4	0.69
(1,440)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HB2	2	0.69
(1,440)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HB2	2	0.69
(1,440)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HB2	2	0.69
(1,440)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HB3	2	0.69
(1,440)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HB3	2	0.69
(1,440)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HB3	2	0.69
(1,440)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HB2	10	0.69
(1,440)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HB2	10	0.69
(1,440)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HB2	10	0.69
(1,440)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HB3	10	0.69
(1,440)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HB3	10	0.69
(1,440)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HB3	10	0.69
(1,391)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HD2	3	0.69
(1,372)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB1	6	0.69
(1,372)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB2	6	0.69
(1,372)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB3	6	0.69
(1,339)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:H	5	0.69
(1,330)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HG2	3	0.69
(1,286)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG3	5	0.69
(1,283)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG3	4	0.69

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,272)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD3	5	0.69
(1,258)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:HD1	9	0.69
(1,258)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:HD2	9	0.69
(1,258)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:HD1	9	0.69
(1,258)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:HD2	9	0.69
(1,258)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:HD1	9	0.69
(1,258)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:HD2	9	0.69
(1,230)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HA	6	0.69
(1,230)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HA	6	0.69
(1,208)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HG3	8	0.69
(1,201)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HG3	4	0.69
(1,172)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HB3	8	0.69
(1,155)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HA	1	0.69
(1,155)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HA	7	0.69
(1,36)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HB2	3	0.69
(1,36)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HB2	10	0.69
(1,29)	1:14:A:ASP:H	1:14:A:ASP:HB2	6	0.69
(4,179)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HB	4	0.68
(4,179)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HB	4	0.68
(4,179)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HB	4	0.68
(4,114)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	3	0.68
(4,114)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	3	0.68
(4,67)	1:11:A:TRP:HZ3	1:23:A:PRO:HB2	10	0.68
(4,22)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HG	9	0.68
(4,22)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HG	10	0.68
(4,18)	1:24:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	9	0.68
(4,18)	1:24:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	10	0.68
(3,311)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HD2	5	0.68
(3,311)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HD2	5	0.68
(3,311)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HD2	5	0.68
(3,206)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB3	5	0.68
(3,206)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB3	5	0.68
(2,528)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HB	4	0.68
(2,528)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HB	4	0.68
(2,528)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HB	4	0.68
(2,458)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HD2	5	0.68
(2,458)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HD2	5	0.68
(2,458)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HD2	5	0.68
(2,402)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	3	0.68
(2,402)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	3	0.68
(2,303)	1:11:A:TRP:HZ3	1:23:A:PRO:HB2	10	0.68
(2,256)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB3	5	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,256)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB3	5	0.68
(2,123)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HG	9	0.68
(2,123)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HG	10	0.68
(2,96)	1:24:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	9	0.68
(2,96)	1:24:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	10	0.68
(1,518)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HE1	10	0.68
(1,518)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HE2	10	0.68
(1,445)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HG2	9	0.68
(1,445)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HG2	9	0.68
(1,445)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HG2	9	0.68
(1,445)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HG3	9	0.68
(1,445)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HG3	9	0.68
(1,445)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HG3	9	0.68
(1,424)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	4	0.68
(1,424)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	4	0.68
(1,424)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	4	0.68
(1,424)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB1	4	0.68
(1,424)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB2	4	0.68
(1,424)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB3	4	0.68
(1,400)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD2	6	0.68
(1,365)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:H	3	0.68
(1,365)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:H	3	0.68
(1,365)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:H	3	0.68
(1,330)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HG2	8	0.68
(1,325)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HE3	9	0.68
(1,325)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HE3	9	0.68
(1,317)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	6	0.68
(1,305)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HG2	8	0.68
(1,286)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG3	9	0.68
(1,271)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD3	1	0.68
(1,268)	1:11:A:TRP:HZ2	1:22:A:PRO:HA	10	0.68
(1,208)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HG3	7	0.68
(1,88)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HB3	3	0.68
(1,88)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HB3	4	0.68
(1,48)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG3	6	0.68
(1,48)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG3	9	0.68
(1,41)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HB3	5	0.68
(1,41)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HB3	6	0.68
(1,39)	1:11:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HB2	5	0.68
(1,36)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HB2	2	0.68
(1,36)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HB2	4	0.68
(1,29)	1:14:A:ASP:H	1:14:A:ASP:HB2	7	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,153)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HD11	5	0.67
(4,153)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HD12	5	0.67
(4,153)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HD13	5	0.67
(4,136)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA2	3	0.67
(4,136)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA2	3	0.67
(4,136)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA2	3	0.67
(4,52)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	2	0.67
(4,52)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	2	0.67
(4,52)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	2	0.67
(4,52)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	2	0.67
(4,52)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	2	0.67
(4,52)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	2	0.67
(4,52)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	10	0.67
(4,52)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	10	0.67
(4,52)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	10	0.67
(4,52)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	10	0.67
(4,52)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	10	0.67
(4,52)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	10	0.67
(4,50)	1:7:A:LEU:HG	1:8:A:TYR:HD1	2	0.67
(4,50)	1:7:A:LEU:HG	1:8:A:TYR:HD2	2	0.67
(4,21)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	5	0.67
(4,10)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE2	10	0.67
(4,10)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE3	10	0.67
(3,81)	1:24:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD2	2	0.67
(2,466)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HD11	5	0.67
(2,466)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HD12	5	0.67
(2,466)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HD13	5	0.67
(2,436)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA2	3	0.67
(2,436)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA2	3	0.67
(2,436)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA2	3	0.67
(2,261)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	2	0.67
(2,261)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	2	0.67
(2,261)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	2	0.67
(2,261)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	2	0.67
(2,261)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	2	0.67
(2,261)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	2	0.67
(2,261)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	10	0.67
(2,261)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	10	0.67
(2,261)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	10	0.67
(2,261)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	10	0.67
(2,261)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	10	0.67
(2,261)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	10	0.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,254)	1:7:A:LEU:HG	1:8:A:TYR:HD1	2	0.67
(2,254)	1:7:A:LEU:HG	1:8:A:TYR:HD2	2	0.67
(2,111)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	5	0.67
(2,99)	1:24:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD2	2	0.67
(2,31)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE2	10	0.67
(2,31)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE3	10	0.67
(1,505)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HD3	5	0.67
(1,505)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HD3	5	0.67
(1,505)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HD3	5	0.67
(1,461)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD21	5	0.67
(1,461)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD22	5	0.67
(1,461)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD23	5	0.67
(1,445)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HG2	10	0.67
(1,445)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HG2	10	0.67
(1,445)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HG2	10	0.67
(1,445)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HG3	10	0.67
(1,445)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HG3	10	0.67
(1,445)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HG3	10	0.67
(1,368)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD3	2	0.67
(1,368)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD3	8	0.67
(1,305)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HG2	4	0.67
(1,286)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG3	10	0.67
(1,266)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD21	8	0.67
(1,266)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD22	8	0.67
(1,266)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD23	8	0.67
(1,266)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD21	8	0.67
(1,266)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD22	8	0.67
(1,266)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD23	8	0.67
(1,253)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HG2	7	0.67
(1,253)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HG2	7	0.67
(1,141)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:HB2	2	0.67
(1,136)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD21	9	0.67
(1,136)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD22	9	0.67
(1,136)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD23	9	0.67
(1,88)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HB3	5	0.67
(1,88)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HB3	9	0.67
(1,88)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HB3	10	0.67
(1,74)	1:20:A:GLY:HA2	1:20:A:GLY:HA3	5	0.67
(1,74)	1:20:A:GLY:HA2	1:20:A:GLY:HA3	6	0.67
(1,74)	1:20:A:GLY:HA2	1:20:A:GLY:HA3	9	0.67
(1,74)	1:20:A:GLY:HA2	1:20:A:GLY:HA3	10	0.67
(1,48)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG3	7	0.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,131)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG11	9	0.66
(4,131)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG12	9	0.66
(4,131)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG13	9	0.66
(4,131)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG11	9	0.66
(4,131)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG12	9	0.66
(4,131)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG13	9	0.66
(4,131)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG11	9	0.66
(4,131)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG12	9	0.66
(4,131)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG13	9	0.66
(4,24)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD21	5	0.66
(4,24)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD22	5	0.66
(4,24)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD23	5	0.66
(4,24)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD21	8	0.66
(4,24)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD22	8	0.66
(4,24)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD23	8	0.66
(4,21)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	6	0.66
(4,10)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE2	3	0.66
(4,10)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE3	3	0.66
(3,294)	1:10:A:GLN:HG2	1:13:A:LYS:HD2	10	0.66
(3,294)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:HD2	10	0.66
(3,294)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:HD3	10	0.66
(3,286)	1:14:A:ASP:HB2	1:19:A:SER:HB2	3	0.66
(3,117)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG12	7	0.66
(3,81)	1:24:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD2	3	0.66
(2,427)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG11	9	0.66
(2,427)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG12	9	0.66
(2,427)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG13	9	0.66
(2,427)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG11	9	0.66
(2,427)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG12	9	0.66
(2,427)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG13	9	0.66
(2,427)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG11	9	0.66
(2,427)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG12	9	0.66
(2,427)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG13	9	0.66
(2,422)	1:10:A:GLN:HG2	1:13:A:LYS:HD2	10	0.66
(2,422)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:HD2	10	0.66
(2,422)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:HD3	10	0.66
(2,398)	1:14:A:ASP:HB2	1:19:A:SER:HB2	3	0.66
(2,145)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG12	7	0.66
(2,129)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD21	5	0.66
(2,129)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD22	5	0.66
(2,129)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD23	5	0.66
(2,129)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD21	8	0.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,129)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD22	8	0.66
(2,129)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD23	8	0.66
(2,111)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	6	0.66
(2,99)	1:24:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD2	3	0.66
(2,31)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE2	3	0.66
(2,31)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE3	3	0.66
(1,531)	1:7:A:LEU:HB2	1:24:A:PRO:HA	7	0.66
(1,507)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	2	0.66
(1,507)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	2	0.66
(1,507)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	2	0.66
(1,453)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HB3	1	0.66
(1,453)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HB3	1	0.66
(1,453)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HB3	1	0.66
(1,444)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HB2	7	0.66
(1,438)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG21	8	0.66
(1,438)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG22	8	0.66
(1,438)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG23	8	0.66
(1,424)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	10	0.66
(1,424)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	10	0.66
(1,424)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	10	0.66
(1,424)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB1	10	0.66
(1,424)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB2	10	0.66
(1,424)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB3	10	0.66
(1,415)	1:7:A:LEU:HB2	1:8:A:TYR:HB3	1	0.66
(1,400)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD2	3	0.66
(1,368)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD3	1	0.66
(1,365)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:H	8	0.66
(1,365)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:H	8	0.66
(1,365)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:H	8	0.66
(1,348)	1:8:A:TYR:H	1:9:A:ILE:HD11	2	0.66
(1,348)	1:8:A:TYR:H	1:9:A:ILE:HD12	2	0.66
(1,348)	1:8:A:TYR:H	1:9:A:ILE:HD13	2	0.66
(1,320)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HE3	1	0.66
(1,320)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HE3	3	0.66
(1,317)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	7	0.66
(1,273)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD3	6	0.66
(1,88)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HB3	1	0.66
(1,88)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HB3	2	0.66
(1,88)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HB3	6	0.66
(1,74)	1:20:A:GLY:HA2	1:20:A:GLY:HA3	1	0.66
(1,74)	1:20:A:GLY:HA2	1:20:A:GLY:HA3	2	0.66
(1,74)	1:20:A:GLY:HA2	1:20:A:GLY:HA3	3	0.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,74)	1:20:A:GLY:HA2	1:20:A:GLY:HA3	4	0.66
(1,74)	1:20:A:GLY:HA2	1:20:A:GLY:HA3	7	0.66
(1,74)	1:20:A:GLY:HA2	1:20:A:GLY:HA3	8	0.66
(1,55)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HD3	8	0.66
(1,39)	1:11:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HB2	1	0.66
(1,36)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HB2	8	0.66
(1,30)	1:14:A:ASP:H	1:14:A:ASP:HB3	6	0.66
(4,146)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB3	6	0.65
(4,146)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB3	6	0.65
(4,146)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB3	6	0.65
(4,136)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA2	2	0.65
(4,136)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA2	2	0.65
(4,136)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA2	2	0.65
(4,77)	1:11:A:TRP:HE1	1:12:A:LEU:HD11	9	0.65
(4,77)	1:11:A:TRP:HE1	1:12:A:LEU:HD12	9	0.65
(4,77)	1:11:A:TRP:HE1	1:12:A:LEU:HD13	9	0.65
(4,42)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HA	9	0.65
(4,42)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HA	9	0.65
(4,24)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD21	2	0.65
(4,24)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD22	2	0.65
(4,24)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD23	2	0.65
(4,24)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD21	6	0.65
(4,24)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD22	6	0.65
(4,24)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD23	6	0.65
(4,22)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HG	4	0.65
(3,286)	1:14:A:ASP:HB2	1:19:A:SER:HB2	1	0.65
(3,117)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG12	1	0.65
(3,81)	1:24:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD2	4	0.65
(2,454)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB3	6	0.65
(2,454)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB3	6	0.65
(2,454)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB3	6	0.65
(2,436)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA2	2	0.65
(2,436)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA2	2	0.65
(2,436)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA2	2	0.65
(2,398)	1:14:A:ASP:HB2	1:19:A:SER:HB2	1	0.65
(2,329)	1:11:A:TRP:HE1	1:12:A:LEU:HD11	9	0.65
(2,329)	1:11:A:TRP:HE1	1:12:A:LEU:HD12	9	0.65
(2,329)	1:11:A:TRP:HE1	1:12:A:LEU:HD13	9	0.65
(2,235)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HA	9	0.65
(2,235)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HA	9	0.65
(2,145)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG12	1	0.65
(2,129)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD21	2	0.65

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,129)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD22	2	0.65
(2,129)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD23	2	0.65
(2,129)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD21	6	0.65
(2,129)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD22	6	0.65
(2,129)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD23	6	0.65
(2,123)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HG	4	0.65
(2,99)	1:24:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD2	4	0.65
(1,507)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	3	0.65
(1,507)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	3	0.65
(1,507)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	3	0.65
(1,475)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:HE3	5	0.65
(1,475)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:HE3	5	0.65
(1,453)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HB3	7	0.65
(1,453)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HB3	7	0.65
(1,453)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HB3	7	0.65
(1,424)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	2	0.65
(1,424)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	2	0.65
(1,424)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	2	0.65
(1,424)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB1	2	0.65
(1,424)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB2	2	0.65
(1,424)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB3	2	0.65
(1,348)	1:8:A:TYR:H	1:9:A:ILE:HD11	8	0.65
(1,348)	1:8:A:TYR:H	1:9:A:ILE:HD12	8	0.65
(1,348)	1:8:A:TYR:H	1:9:A:ILE:HD13	8	0.65
(1,325)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HE3	6	0.65
(1,325)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HE3	6	0.65
(1,321)	1:11:A:TRP:HE3	1:24:A:PRO:HD2	5	0.65
(1,294)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD21	8	0.65
(1,294)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD22	8	0.65
(1,294)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD23	8	0.65
(1,286)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG3	3	0.65
(1,271)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD3	5	0.65
(1,237)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HB2	10	0.65
(1,237)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HB2	10	0.65
(1,203)	1:15:A:GLY:H	1:15:A:GLY:HA2	7	0.65
(1,142)	1:8:A:TYR:H	1:8:A:TYR:HB3	7	0.65
(1,48)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG3	5	0.65
(1,30)	1:14:A:ASP:H	1:14:A:ASP:HB3	3	0.65
(4,179)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HB	9	0.64
(4,179)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HB	9	0.64
(4,179)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HB	9	0.64
(4,148)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	3	0.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,148)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	3	0.64
(4,148)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	3	0.64
(4,148)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	7	0.64
(4,148)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	7	0.64
(4,148)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	7	0.64
(4,113)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD2	9	0.64
(4,113)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD2	9	0.64
(4,113)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD2	10	0.64
(4,113)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD2	10	0.64
(4,24)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD21	1	0.64
(4,24)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD22	1	0.64
(4,24)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD23	1	0.64
(4,24)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD21	4	0.64
(4,24)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD22	4	0.64
(4,24)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD23	4	0.64
(4,24)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD21	10	0.64
(4,24)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD22	10	0.64
(4,24)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD23	10	0.64
(4,18)	1:24:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	1	0.64
(4,18)	1:24:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	3	0.64
(4,18)	1:24:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	4	0.64
(4,15)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD2	2	0.64
(4,15)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD2	3	0.64
(4,10)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE2	9	0.64
(4,10)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE3	9	0.64
(2,528)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HB	9	0.64
(2,528)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HB	9	0.64
(2,528)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HB	9	0.64
(2,459)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	3	0.64
(2,459)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	3	0.64
(2,459)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	3	0.64
(2,459)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	7	0.64
(2,459)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	7	0.64
(2,459)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	7	0.64
(2,401)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD2	9	0.64
(2,401)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD2	9	0.64
(2,401)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD2	10	0.64
(2,401)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD2	10	0.64
(2,129)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD21	1	0.64
(2,129)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD22	1	0.64
(2,129)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD23	1	0.64
(2,129)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD21	4	0.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,129)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD22	4	0.64
(2,129)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD23	4	0.64
(2,129)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD21	10	0.64
(2,129)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD22	10	0.64
(2,129)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD23	10	0.64
(2,96)	1:24:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	1	0.64
(2,96)	1:24:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	3	0.64
(2,96)	1:24:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	4	0.64
(2,80)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD2	2	0.64
(2,80)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD2	3	0.64
(2,31)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE2	9	0.64
(2,31)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE3	9	0.64
(1,445)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HG2	2	0.64
(1,445)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HG2	2	0.64
(1,445)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HG2	2	0.64
(1,445)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HG3	2	0.64
(1,445)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HG3	2	0.64
(1,445)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HG3	2	0.64
(1,440)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HB2	3	0.64
(1,440)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HB2	3	0.64
(1,440)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HB2	3	0.64
(1,440)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HB3	3	0.64
(1,440)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HB3	3	0.64
(1,440)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HB3	3	0.64
(1,424)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	3	0.64
(1,424)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	3	0.64
(1,424)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	3	0.64
(1,424)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB1	3	0.64
(1,424)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB2	3	0.64
(1,424)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB3	3	0.64
(1,379)	1:11:A:TRP:HA	1:14:A:ASP:HB2	10	0.64
(1,368)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD3	7	0.64
(1,321)	1:11:A:TRP:HE3	1:24:A:PRO:HD2	1	0.64
(1,317)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	3	0.64
(1,272)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD3	4	0.64
(1,268)	1:11:A:TRP:HZ2	1:22:A:PRO:HA	5	0.64
(1,252)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	1	0.64
(1,252)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	1	0.64
(1,88)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HB3	7	0.64
(1,71)	1:19:A:SER:HB2	1:19:A:SER:HB3	6	0.64
(1,48)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG3	8	0.64
(1,30)	1:14:A:ASP:H	1:14:A:ASP:HB3	1	0.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,11)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HB	6	0.64
(4,148)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	2	0.63
(4,148)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	2	0.63
(4,148)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	2	0.63
(4,113)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD2	5	0.63
(4,113)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD2	5	0.63
(4,99)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG2	6	0.63
(4,99)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG3	6	0.63
(4,93)	1:9:A:ILE:HB	1:11:A:TRP:H	3	0.63
(4,24)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD21	3	0.63
(4,24)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD22	3	0.63
(4,24)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD23	3	0.63
(4,24)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD21	9	0.63
(4,24)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD22	9	0.63
(4,24)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD23	9	0.63
(4,18)	1:24:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	2	0.63
(4,15)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD2	1	0.63
(2,459)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	2	0.63
(2,459)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	2	0.63
(2,459)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	2	0.63
(2,401)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD2	5	0.63
(2,401)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD2	5	0.63
(2,370)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG2	6	0.63
(2,370)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG3	6	0.63
(2,354)	1:9:A:ILE:HB	1:11:A:TRP:H	3	0.63
(2,129)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD21	3	0.63
(2,129)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD22	3	0.63
(2,129)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD23	3	0.63
(2,129)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD21	9	0.63
(2,129)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD22	9	0.63
(2,129)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD23	9	0.63
(2,96)	1:24:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	2	0.63
(2,80)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD2	1	0.63
(1,446)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD21	7	0.63
(1,446)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD22	7	0.63
(1,446)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD23	7	0.63
(1,446)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD21	7	0.63
(1,446)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD22	7	0.63
(1,446)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD23	7	0.63
(1,445)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HG2	5	0.63
(1,445)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HG2	5	0.63
(1,445)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HG2	5	0.63

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,445)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HG3	5	0.63
(1,445)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HG3	5	0.63
(1,445)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HG3	5	0.63
(1,420)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	4	0.63
(1,420)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	4	0.63
(1,420)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	4	0.63
(1,406)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HB3	3	0.63
(1,406)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HB3	4	0.63
(1,366)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:H	3	0.63
(1,366)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:H	3	0.63
(1,366)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:H	3	0.63
(1,341)	1:10:A:GLN:HB2	1:13:A:LYS:H	3	0.63
(1,321)	1:11:A:TRP:HE3	1:24:A:PRO:HD2	6	0.63
(1,321)	1:11:A:TRP:HE3	1:24:A:PRO:HD2	7	0.63
(1,320)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HE3	7	0.63
(1,317)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	4	0.63
(1,298)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD21	4	0.63
(1,298)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD22	4	0.63
(1,298)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD23	4	0.63
(1,296)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD11	7	0.63
(1,296)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD12	7	0.63
(1,296)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD13	7	0.63
(1,289)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	8	0.63
(1,284)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB3	7	0.63
(1,267)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD21	10	0.63
(1,267)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD22	10	0.63
(1,267)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD23	10	0.63
(1,267)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD21	10	0.63
(1,267)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD22	10	0.63
(1,267)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD23	10	0.63
(1,223)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG3	9	0.63
(1,202)	1:15:A:GLY:H	1:15:A:GLY:HA3	10	0.63
(1,141)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:HB2	7	0.63
(1,136)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD21	6	0.63
(1,136)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD22	6	0.63
(1,136)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD23	6	0.63
(1,88)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HB3	8	0.63
(1,55)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HD3	9	0.63
(1,18)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD11	5	0.63
(1,18)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD12	5	0.63
(1,18)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD13	5	0.63
(1,11)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HB	7	0.63

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,177)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HG3	5	0.62
(4,148)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	4	0.62
(4,148)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	4	0.62
(4,148)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	4	0.62
(4,62)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD11	9	0.62
(4,62)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD12	9	0.62
(4,62)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD13	9	0.62
(4,46)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HD1	3	0.62
(4,46)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HD2	3	0.62
(4,46)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HD1	3	0.62
(4,46)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HD2	3	0.62
(4,24)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD21	7	0.62
(4,24)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD22	7	0.62
(4,24)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD23	7	0.62
(4,15)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD2	7	0.62
(3,294)	1:10:A:GLN:HG2	1:13:A:LYS:HD2	4	0.62
(3,294)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:HD2	4	0.62
(3,294)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:HD3	4	0.62
(3,206)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB3	10	0.62
(3,206)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB3	10	0.62
(2,526)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HG3	5	0.62
(2,459)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	4	0.62
(2,459)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	4	0.62
(2,459)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	4	0.62
(2,422)	1:10:A:GLN:HG2	1:13:A:LYS:HD2	4	0.62
(2,422)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:HD2	4	0.62
(2,422)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:HD3	4	0.62
(2,293)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD11	9	0.62
(2,293)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD12	9	0.62
(2,293)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD13	9	0.62
(2,256)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB3	10	0.62
(2,256)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB3	10	0.62
(2,242)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HD1	3	0.62
(2,242)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HD2	3	0.62
(2,242)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HD1	3	0.62
(2,242)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HD2	3	0.62
(2,129)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD21	7	0.62
(2,129)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD22	7	0.62
(2,129)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD23	7	0.62
(2,80)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD2	7	0.62
(1,400)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD2	1	0.62
(1,396)	1:8:A:TYR:HB3	1:23:A:PRO:HD3	4	0.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,396)	1:23:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HD3	4	0.62
(1,341)	1:10:A:GLN:HB2	1:13:A:LYS:H	5	0.62
(1,339)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:H	6	0.62
(1,324)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HZ3	3	0.62
(1,324)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HZ3	3	0.62
(1,317)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	2	0.62
(1,296)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD11	6	0.62
(1,296)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD12	6	0.62
(1,296)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD13	6	0.62
(1,272)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD3	6	0.62
(1,245)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB2	9	0.62
(1,245)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB2	9	0.62
(1,237)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HB2	1	0.62
(1,237)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HB2	1	0.62
(1,237)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HB2	2	0.62
(1,237)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HB2	2	0.62
(1,71)	1:19:A:SER:HB2	1:19:A:SER:HB3	1	0.62
(1,71)	1:19:A:SER:HB2	1:19:A:SER:HB3	2	0.62
(1,71)	1:19:A:SER:HB2	1:19:A:SER:HB3	3	0.62
(1,71)	1:19:A:SER:HB2	1:19:A:SER:HB3	4	0.62
(1,71)	1:19:A:SER:HB2	1:19:A:SER:HB3	5	0.62
(1,71)	1:19:A:SER:HB2	1:19:A:SER:HB3	7	0.62
(1,71)	1:19:A:SER:HB2	1:19:A:SER:HB3	8	0.62
(1,71)	1:19:A:SER:HB2	1:19:A:SER:HB3	9	0.62
(1,71)	1:19:A:SER:HB2	1:19:A:SER:HB3	10	0.62
(1,55)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HD3	3	0.62
(1,55)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HD3	5	0.62
(1,55)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HD3	6	0.62
(1,39)	1:11:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HB2	2	0.62
(1,30)	1:14:A:ASP:H	1:14:A:ASP:HB3	5	0.62
(1,11)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HB	1	0.62
(4,177)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HG3	8	0.61
(4,99)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG2	5	0.61
(4,99)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG3	5	0.61
(4,46)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HD1	8	0.61
(4,46)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HD2	8	0.61
(4,46)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HD1	8	0.61
(4,46)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HD2	8	0.61
(4,22)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HG	8	0.61
(4,15)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD2	8	0.61
(4,10)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE2	2	0.61
(4,10)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE3	2	0.61

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,45)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HD2	7	0.61
(2,526)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HG3	8	0.61
(2,370)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG2	5	0.61
(2,370)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG3	5	0.61
(2,242)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HD1	8	0.61
(2,242)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HD2	8	0.61
(2,242)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HD1	8	0.61
(2,242)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HD2	8	0.61
(2,123)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HG	8	0.61
(2,80)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD2	8	0.61
(2,56)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HD2	7	0.61
(2,31)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE2	2	0.61
(2,31)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE3	2	0.61
(1,406)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HB3	1	0.61
(1,406)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HB3	2	0.61
(1,406)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HB3	9	0.61
(1,406)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HB3	10	0.61
(1,398)	1:14:A:ASP:HB2	1:19:A:SER:HB2	6	0.61
(1,386)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HB3	10	0.61
(1,366)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:H	4	0.61
(1,366)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:H	4	0.61
(1,366)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:H	4	0.61
(1,348)	1:8:A:TYR:H	1:9:A:ILE:HD11	9	0.61
(1,348)	1:8:A:TYR:H	1:9:A:ILE:HD12	9	0.61
(1,348)	1:8:A:TYR:H	1:9:A:ILE:HD13	9	0.61
(1,341)	1:10:A:GLN:HB2	1:13:A:LYS:H	1	0.61
(1,325)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HE3	1	0.61
(1,325)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HE3	1	0.61
(1,320)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HE3	8	0.61
(1,317)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	5	0.61
(1,313)	1:11:A:TRP:HE3	1:24:A:PRO:HA	6	0.61
(1,299)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD21	6	0.61
(1,299)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD22	6	0.61
(1,299)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD23	6	0.61
(1,296)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD11	1	0.61
(1,296)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD12	1	0.61
(1,296)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD13	1	0.61
(1,296)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD11	5	0.61
(1,296)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD12	5	0.61
(1,296)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD13	5	0.61
(1,140)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:HB3	4	0.61
(1,55)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HD3	1	0.61

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,55)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HD3	2	0.61
(1,55)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HD3	4	0.61
(1,55)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HD3	7	0.61
(1,55)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HD3	10	0.61
(1,36)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HB2	1	0.61
(1,36)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HB2	6	0.61
(1,34)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HG2	6	0.61
(1,11)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HB	8	0.61
(4,179)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HB	10	0.6
(4,179)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HB	10	0.6
(4,179)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HB	10	0.6
(4,148)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	1	0.6
(4,148)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	1	0.6
(4,148)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	1	0.6
(4,110)	1:23:A:PRO:HG2	1:25:A:SER:HB2	5	0.6
(4,110)	1:23:A:PRO:HG2	1:25:A:SER:HB3	5	0.6
(4,87)	1:12:A:LEU:HD11	1:14:A:ASP:H	2	0.6
(4,87)	1:12:A:LEU:HD12	1:14:A:ASP:H	2	0.6
(4,87)	1:12:A:LEU:HD13	1:14:A:ASP:H	2	0.6
(4,54)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE1	3	0.6
(4,54)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE2	3	0.6
(4,54)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE1	3	0.6
(4,54)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE2	3	0.6
(4,54)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE1	3	0.6
(4,54)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE2	3	0.6
(4,39)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HA	9	0.6
(4,39)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HA	9	0.6
(2,528)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HB	10	0.6
(2,528)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HB	10	0.6
(2,528)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HB	10	0.6
(2,459)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	1	0.6
(2,459)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	1	0.6
(2,459)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	1	0.6
(2,392)	1:23:A:PRO:HG2	1:25:A:SER:HB2	5	0.6
(2,392)	1:23:A:PRO:HG2	1:25:A:SER:HB3	5	0.6
(2,346)	1:12:A:LEU:HD11	1:14:A:ASP:H	2	0.6
(2,346)	1:12:A:LEU:HD12	1:14:A:ASP:H	2	0.6
(2,346)	1:12:A:LEU:HD13	1:14:A:ASP:H	2	0.6
(2,263)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE1	3	0.6
(2,263)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE2	3	0.6
(2,263)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE1	3	0.6
(2,263)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE2	3	0.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,263)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE1	3	0.6
(2,263)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE2	3	0.6
(2,229)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HA	9	0.6
(2,229)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HA	9	0.6
(1,445)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HG2	1	0.6
(1,445)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HG2	1	0.6
(1,445)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HG2	1	0.6
(1,445)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HG3	1	0.6
(1,445)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HG3	1	0.6
(1,445)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HG3	1	0.6
(1,438)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG21	9	0.6
(1,438)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG22	9	0.6
(1,438)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG23	9	0.6
(1,424)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	6	0.6
(1,424)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	6	0.6
(1,424)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	6	0.6
(1,424)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB1	6	0.6
(1,424)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB2	6	0.6
(1,424)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB3	6	0.6
(1,401)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD2	4	0.6
(1,401)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD2	4	0.6
(1,366)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:H	2	0.6
(1,366)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:H	2	0.6
(1,366)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:H	2	0.6
(1,340)	1:10:A:GLN:HG2	1:13:A:LYS:H	6	0.6
(1,340)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:H	6	0.6
(1,320)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HE3	4	0.6
(1,317)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	1	0.6
(1,311)	1:11:A:TRP:HD1	1:19:A:SER:HB3	9	0.6
(1,302)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD11	10	0.6
(1,302)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD12	10	0.6
(1,302)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD13	10	0.6
(1,296)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD11	10	0.6
(1,296)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD12	10	0.6
(1,296)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD13	10	0.6
(1,268)	1:11:A:TRP:HZ2	1:22:A:PRO:HA	3	0.6
(1,267)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD21	4	0.6
(1,267)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD22	4	0.6
(1,267)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD23	4	0.6
(1,267)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD21	4	0.6
(1,267)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD22	4	0.6
(1,267)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD23	4	0.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,262)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	9	0.6
(1,262)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	9	0.6
(1,262)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	9	0.6
(1,262)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	9	0.6
(1,262)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	9	0.6
(1,262)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	9	0.6
(1,245)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB2	3	0.6
(1,245)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB2	3	0.6
(1,201)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HG3	2	0.6
(1,189)	1:13:A:LYS:HE2	1:13:A:LYS:HG2	6	0.6
(1,189)	1:13:A:LYS:HE3	1:13:A:LYS:HG2	6	0.6
(1,36)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HB2	5	0.6
(1,36)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HB2	7	0.6
(1,30)	1:14:A:ASP:H	1:14:A:ASP:HB3	7	0.6
(4,170)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	7	0.59
(4,170)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	7	0.59
(4,170)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	7	0.59
(4,113)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD2	1	0.59
(4,113)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD2	1	0.59
(4,16)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD3	6	0.59
(3,211)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD11	1	0.59
(3,211)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD12	1	0.59
(3,211)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD13	1	0.59
(3,211)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD11	1	0.59
(3,211)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD12	1	0.59
(3,211)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD13	1	0.59
(3,207)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HG	3	0.59
(3,207)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HG	3	0.59
(2,507)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	7	0.59
(2,507)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	7	0.59
(2,507)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	7	0.59
(2,401)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD2	1	0.59
(2,401)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD2	1	0.59
(2,265)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD11	1	0.59
(2,265)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD12	1	0.59
(2,265)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD13	1	0.59
(2,265)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD11	1	0.59
(2,265)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD12	1	0.59
(2,265)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD13	1	0.59
(2,257)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HG	3	0.59
(2,257)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HG	3	0.59
(2,81)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD3	6	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,518)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HE1	4	0.59
(1,518)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HE2	4	0.59
(1,424)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	9	0.59
(1,424)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	9	0.59
(1,424)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	9	0.59
(1,424)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB1	9	0.59
(1,424)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB2	9	0.59
(1,424)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB3	9	0.59
(1,357)	1:11:A:TRP:H	1:24:A:PRO:HB3	6	0.59
(1,296)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD11	2	0.59
(1,296)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD12	2	0.59
(1,296)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD13	2	0.59
(1,289)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	7	0.59
(1,255)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HG	10	0.59
(1,255)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HG	10	0.59
(1,223)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG3	10	0.59
(1,201)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HG3	1	0.59
(1,164)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HG2	9	0.59
(1,164)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HG3	9	0.59
(1,40)	1:11:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HB3	2	0.59
(4,113)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD2	3	0.58
(4,113)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD2	3	0.58
(4,90)	1:13:A:LYS:HG3	1:14:A:ASP:H	7	0.58
(4,51)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HD1	5	0.58
(4,51)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HD2	5	0.58
(4,51)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HD1	5	0.58
(4,51)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HD2	5	0.58
(4,51)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HD1	5	0.58
(4,51)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HD2	5	0.58
(3,267)	1:24:A:PRO:HG3	1:25:A:SER:H	1	0.58
(2,401)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD2	3	0.58
(2,401)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD2	3	0.58
(2,363)	1:24:A:PRO:HG3	1:25:A:SER:H	1	0.58
(2,351)	1:13:A:LYS:HG3	1:14:A:ASP:H	7	0.58
(2,260)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HD1	5	0.58
(2,260)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HD2	5	0.58
(2,260)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HD1	5	0.58
(2,260)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HD2	5	0.58
(2,260)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HD1	5	0.58
(2,260)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HD2	5	0.58
(1,510)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HD3	9	0.58
(1,510)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HD3	9	0.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,510)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HD3	9	0.58
(1,456)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA3	8	0.58
(1,456)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA3	8	0.58
(1,456)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA3	8	0.58
(1,441)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HB2	8	0.58
(1,441)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HB2	8	0.58
(1,441)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HB2	8	0.58
(1,441)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HB3	8	0.58
(1,441)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HB3	8	0.58
(1,441)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HB3	8	0.58
(1,339)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:H	1	0.58
(1,284)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB3	4	0.58
(1,272)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD3	9	0.58
(1,201)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HG3	8	0.58
(1,164)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HG2	1	0.58
(1,164)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HG3	1	0.58
(1,164)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HG2	8	0.58
(1,164)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HG3	8	0.58
(1,87)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD3	4	0.58
(1,85)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD3	4	0.58
(1,45)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HD2	8	0.58
(1,45)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HD3	8	0.58
(1,40)	1:11:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HB3	9	0.58
(1,39)	1:11:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HB2	4	0.58
(1,18)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD11	7	0.58
(1,18)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD12	7	0.58
(1,18)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD13	7	0.58
(1,11)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HB	5	0.58
(4,16)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD3	5	0.57
(3,294)	1:10:A:GLN:HG2	1:13:A:LYS:HD2	9	0.57
(3,294)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:HD2	9	0.57
(3,294)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:HD3	9	0.57
(3,45)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HD2	4	0.57
(2,422)	1:10:A:GLN:HG2	1:13:A:LYS:HD2	9	0.57
(2,422)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:HD2	9	0.57
(2,422)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:HD3	9	0.57
(2,81)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD3	5	0.57
(2,56)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HD2	4	0.57
(1,485)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HA	9	0.57
(1,473)	1:13:A:LYS:HB2	1:14:A:ASP:H	1	0.57
(1,473)	1:13:A:LYS:HB3	1:14:A:ASP:H	1	0.57
(1,448)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG11	8	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,448)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG12	8	0.57
(1,448)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG13	8	0.57
(1,448)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG11	8	0.57
(1,448)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG12	8	0.57
(1,448)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG13	8	0.57
(1,402)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	8	0.57
(1,402)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	8	0.57
(1,400)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD2	5	0.57
(1,330)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HG2	2	0.57
(1,272)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD3	7	0.57
(1,271)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD3	2	0.57
(1,237)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HB2	6	0.57
(1,237)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HB2	6	0.57
(1,205)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HB3	1	0.57
(1,205)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HB3	2	0.57
(1,205)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HB3	3	0.57
(1,205)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HB3	5	0.57
(1,205)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HB3	6	0.57
(1,205)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HB3	7	0.57
(1,202)	1:15:A:GLY:H	1:15:A:GLY:HA3	6	0.57
(1,87)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD3	6	0.57
(1,39)	1:11:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HB2	7	0.57
(4,153)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HD11	8	0.56
(4,153)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HD12	8	0.56
(4,153)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HD13	8	0.56
(4,46)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HD1	10	0.56
(4,46)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HD2	10	0.56
(4,46)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HD1	10	0.56
(4,46)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HD2	10	0.56
(4,16)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD3	9	0.56
(4,16)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD3	10	0.56
(2,466)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HD11	8	0.56
(2,466)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HD12	8	0.56
(2,466)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HD13	8	0.56
(2,242)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HD1	10	0.56
(2,242)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HD2	10	0.56
(2,242)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HD1	10	0.56
(2,242)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HD2	10	0.56
(2,81)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD3	9	0.56
(2,81)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD3	10	0.56
(1,505)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HD3	10	0.56
(1,505)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HD3	10	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,505)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HD3	10	0.56
(1,424)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	1	0.56
(1,424)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	1	0.56
(1,424)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	1	0.56
(1,424)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB1	1	0.56
(1,424)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB2	1	0.56
(1,424)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB3	1	0.56
(1,424)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	8	0.56
(1,424)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	8	0.56
(1,424)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	8	0.56
(1,424)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB1	8	0.56
(1,424)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB2	8	0.56
(1,424)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB3	8	0.56
(1,406)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HB3	5	0.56
(1,366)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:H	7	0.56
(1,366)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:H	7	0.56
(1,366)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:H	7	0.56
(1,303)	1:11:A:TRP:HZ3	1:23:A:PRO:HB2	7	0.56
(1,299)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD21	5	0.56
(1,299)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD22	5	0.56
(1,299)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD23	5	0.56
(1,252)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	5	0.56
(1,252)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	5	0.56
(1,230)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HA	7	0.56
(1,230)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HA	7	0.56
(1,205)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HB3	4	0.56
(1,205)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HB3	8	0.56
(1,205)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HB3	9	0.56
(1,205)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HB3	10	0.56
(1,164)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HG2	3	0.56
(1,164)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HG3	3	0.56
(1,164)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HG2	10	0.56
(1,164)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HG3	10	0.56
(1,34)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HG2	5	0.56
(1,30)	1:14:A:ASP:H	1:14:A:ASP:HB3	8	0.56
(1,18)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD11	3	0.56
(1,18)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD12	3	0.56
(1,18)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD13	3	0.56
(1,18)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD11	8	0.56
(1,18)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD12	8	0.56
(1,18)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD13	8	0.56
(1,18)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD11	10	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,18)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD12	10	0.56
(1,18)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD13	10	0.56
(3,287)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	4	0.55
(3,211)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD11	6	0.55
(3,211)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD12	6	0.55
(3,211)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD13	6	0.55
(3,211)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD11	6	0.55
(3,211)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD12	6	0.55
(3,211)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD13	6	0.55
(2,399)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	4	0.55
(2,265)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD11	6	0.55
(2,265)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD12	6	0.55
(2,265)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD13	6	0.55
(2,265)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD11	6	0.55
(2,265)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD12	6	0.55
(2,265)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD13	6	0.55
(1,487)	1:8:A:TYR:HB2	1:24:A:PRO:HA	1	0.55
(1,473)	1:13:A:LYS:HB2	1:14:A:ASP:H	5	0.55
(1,473)	1:13:A:LYS:HB3	1:14:A:ASP:H	5	0.55
(1,437)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG2	9	0.55
(1,437)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG2	9	0.55
(1,437)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG2	9	0.55
(1,437)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG3	9	0.55
(1,437)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG3	9	0.55
(1,437)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG3	9	0.55
(1,413)	1:1:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD2	7	0.55
(1,413)	1:1:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD3	7	0.55
(1,413)	1:1:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD2	7	0.55
(1,413)	1:1:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD3	7	0.55
(1,406)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HB3	8	0.55
(1,394)	1:23:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HD2	1	0.55
(1,394)	1:23:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HD2	3	0.55
(1,374)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	2	0.55
(1,374)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB3	2	0.55
(1,331)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB2	1	0.55
(1,296)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD11	3	0.55
(1,296)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD12	3	0.55
(1,296)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD13	3	0.55
(1,255)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HG	3	0.55
(1,255)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HG	3	0.55
(1,223)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG3	8	0.55
(1,202)	1:15:A:GLY:H	1:15:A:GLY:HA3	4	0.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,202)	1:15:A:GLY:H	1:15:A:GLY:HA3	9	0.55
(1,40)	1:11:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HB3	4	0.55
(1,40)	1:11:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HB3	10	0.55
(1,39)	1:11:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HB2	6	0.55
(1,18)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD11	9	0.55
(1,18)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD12	9	0.55
(1,18)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD13	9	0.55
(4,123)	1:23:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HB2	5	0.54
(4,113)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD2	2	0.54
(4,113)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD2	2	0.54
(3,228)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	6	0.54
(3,211)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD11	7	0.54
(3,211)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD12	7	0.54
(3,211)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD13	7	0.54
(3,211)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD11	7	0.54
(3,211)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD12	7	0.54
(3,211)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD13	7	0.54
(3,207)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HG	5	0.54
(3,207)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HG	5	0.54
(2,414)	1:23:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HB2	5	0.54
(2,401)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD2	2	0.54
(2,401)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD2	2	0.54
(2,287)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	6	0.54
(2,265)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD11	7	0.54
(2,265)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD12	7	0.54
(2,265)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD13	7	0.54
(2,265)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD11	7	0.54
(2,265)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD12	7	0.54
(2,265)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD13	7	0.54
(2,257)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HG	5	0.54
(2,257)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HG	5	0.54
(1,445)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HG2	6	0.54
(1,445)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HG2	6	0.54
(1,445)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HG2	6	0.54
(1,445)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HG3	6	0.54
(1,445)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HG3	6	0.54
(1,445)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HG3	6	0.54
(1,438)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG21	4	0.54
(1,438)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG22	4	0.54
(1,438)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG23	4	0.54
(1,400)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD2	9	0.54
(1,341)	1:10:A:GLN:HB2	1:13:A:LYS:H	2	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,341)	1:10:A:GLN:HB2	1:13:A:LYS:H	8	0.54
(1,296)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD11	4	0.54
(1,296)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD12	4	0.54
(1,296)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD13	4	0.54
(1,296)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD11	9	0.54
(1,296)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD12	9	0.54
(1,296)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD13	9	0.54
(1,271)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD3	9	0.54
(1,202)	1:15:A:GLY:H	1:15:A:GLY:HA3	1	0.54
(1,164)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HG2	6	0.54
(1,164)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HG3	6	0.54
(1,22)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HD1	1	0.54
(1,22)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HD2	1	0.54
(4,62)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD11	5	0.53
(4,62)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD12	5	0.53
(4,62)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD13	5	0.53
(4,18)	1:24:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	6	0.53
(4,16)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD3	8	0.53
(3,267)	1:24:A:PRO:HG3	1:25:A:SER:H	2	0.53
(3,267)	1:24:A:PRO:HG3	1:25:A:SER:H	3	0.53
(3,13)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD21	1	0.53
(3,13)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD22	1	0.53
(3,13)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD23	1	0.53
(3,13)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD21	5	0.53
(3,13)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD22	5	0.53
(3,13)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD23	5	0.53
(2,363)	1:24:A:PRO:HG3	1:25:A:SER:H	2	0.53
(2,363)	1:24:A:PRO:HG3	1:25:A:SER:H	3	0.53
(2,293)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD11	5	0.53
(2,293)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD12	5	0.53
(2,293)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD13	5	0.53
(2,96)	1:24:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	6	0.53
(2,81)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD3	8	0.53
(2,19)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD21	1	0.53
(2,19)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD22	1	0.53
(2,19)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD23	1	0.53
(2,19)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD21	5	0.53
(2,19)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD22	5	0.53
(2,19)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD23	5	0.53
(1,531)	1:7:A:LEU:HB2	1:24:A:PRO:HA	6	0.53
(1,450)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HE2	6	0.53
(1,450)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HE2	6	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,450)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HE2	6	0.53
(1,450)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HE3	6	0.53
(1,450)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HE3	6	0.53
(1,450)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HE3	6	0.53
(1,406)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HB3	6	0.53
(1,402)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	7	0.53
(1,402)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	7	0.53
(1,400)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD2	10	0.53
(1,394)	1:23:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HD2	9	0.53
(1,348)	1:8:A:TYR:H	1:9:A:ILE:HD11	1	0.53
(1,348)	1:8:A:TYR:H	1:9:A:ILE:HD12	1	0.53
(1,348)	1:8:A:TYR:H	1:9:A:ILE:HD13	1	0.53
(1,339)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:H	7	0.53
(1,331)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB2	2	0.53
(1,273)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD3	5	0.53
(1,247)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB3	9	0.53
(1,247)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB3	9	0.53
(1,242)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HD1	6	0.53
(1,242)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HD2	6	0.53
(1,242)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HD1	6	0.53
(1,242)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HD2	6	0.53
(1,235)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HA	5	0.53
(1,235)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HA	5	0.53
(1,202)	1:15:A:GLY:H	1:15:A:GLY:HA3	3	0.53
(1,202)	1:15:A:GLY:H	1:15:A:GLY:HA3	8	0.53
(1,201)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HG3	3	0.53
(1,164)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HG2	2	0.53
(1,164)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HG3	2	0.53
(1,118)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:H	6	0.53
(1,118)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:H	6	0.53
(4,62)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD11	8	0.52
(4,62)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD12	8	0.52
(4,62)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD13	8	0.52
(4,34)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD21	9	0.52
(4,34)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD22	9	0.52
(4,34)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD23	9	0.52
(4,34)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD21	10	0.52
(4,34)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD22	10	0.52
(4,34)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD23	10	0.52
(4,16)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD3	7	0.52
(4,15)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD2	9	0.52
(4,15)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD2	10	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,326)	1:21:A:ARG:HG2	1:22:A:PRO:HD3	2	0.52
(3,207)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HG	8	0.52
(3,207)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HG	8	0.52
(3,152)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HE2	1	0.52
(3,152)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HE3	1	0.52
(3,152)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HE3	1	0.52
(3,13)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD21	7	0.52
(3,13)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD22	7	0.52
(3,13)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD23	7	0.52
(2,489)	1:21:A:ARG:HG2	1:22:A:PRO:HD3	2	0.52
(2,293)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD11	8	0.52
(2,293)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD12	8	0.52
(2,293)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD13	8	0.52
(2,257)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HG	8	0.52
(2,257)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HG	8	0.52
(2,187)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HE2	1	0.52
(2,187)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HE3	1	0.52
(2,187)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HE3	1	0.52
(2,178)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD21	9	0.52
(2,178)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD22	9	0.52
(2,178)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD23	9	0.52
(2,178)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD21	10	0.52
(2,178)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD22	10	0.52
(2,178)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD23	10	0.52
(2,81)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD3	7	0.52
(2,80)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD2	9	0.52
(2,80)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD2	10	0.52
(2,19)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD21	7	0.52
(2,19)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD22	7	0.52
(2,19)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD23	7	0.52
(1,505)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HD3	2	0.52
(1,505)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HD3	2	0.52
(1,505)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HD3	2	0.52
(1,488)	1:22:A:PRO:HD2	1:22:A:PRO:HD3	4	0.52
(1,450)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HE2	5	0.52
(1,450)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HE2	5	0.52
(1,450)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HE2	5	0.52
(1,450)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HE3	5	0.52
(1,450)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HE3	5	0.52
(1,450)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HE3	5	0.52
(1,398)	1:14:A:ASP:HB2	1:19:A:SER:HB2	10	0.52
(1,394)	1:23:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HD2	10	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,350)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:H	5	0.52
(1,350)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:H	5	0.52
(1,350)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:H	5	0.52
(1,348)	1:8:A:TYR:H	1:9:A:ILE:HD11	10	0.52
(1,348)	1:8:A:TYR:H	1:9:A:ILE:HD12	10	0.52
(1,348)	1:8:A:TYR:H	1:9:A:ILE:HD13	10	0.52
(1,233)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HE1	5	0.52
(1,233)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HE2	5	0.52
(1,164)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HG2	4	0.52
(1,164)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HG3	4	0.52
(1,164)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HG2	5	0.52
(1,164)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HG3	5	0.52
(1,164)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HG2	7	0.52
(1,164)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HG3	7	0.52
(1,112)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HA	4	0.52
(1,40)	1:11:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HB3	3	0.52
(4,34)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD21	4	0.51
(4,34)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD22	4	0.51
(4,34)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD23	4	0.51
(4,34)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD21	8	0.51
(4,34)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD22	8	0.51
(4,34)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD23	8	0.51
(4,15)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD2	5	0.51
(2,178)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD21	4	0.51
(2,178)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD22	4	0.51
(2,178)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD23	4	0.51
(2,178)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD21	8	0.51
(2,178)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD22	8	0.51
(2,178)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD23	8	0.51
(2,80)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD2	5	0.51
(1,490)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HD3	1	0.51
(1,490)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HD3	8	0.51
(1,488)	1:22:A:PRO:HD2	1:22:A:PRO:HD3	5	0.51
(1,488)	1:22:A:PRO:HD2	1:22:A:PRO:HD3	6	0.51
(1,488)	1:22:A:PRO:HD2	1:22:A:PRO:HD3	9	0.51
(1,488)	1:22:A:PRO:HD2	1:22:A:PRO:HD3	10	0.51
(1,440)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HB2	9	0.51
(1,440)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HB2	9	0.51
(1,440)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HB2	9	0.51
(1,440)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HB3	9	0.51
(1,440)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HB3	9	0.51
(1,440)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HB3	9	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,397)	1:14:A:ASP:HB2	1:19:A:SER:HB3	5	0.51
(1,313)	1:11:A:TRP:HE3	1:24:A:PRO:HA	7	0.51
(1,296)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD11	8	0.51
(1,296)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD12	8	0.51
(1,296)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD13	8	0.51
(1,271)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD3	10	0.51
(1,245)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB2	2	0.51
(1,245)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB2	2	0.51
(4,177)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HG3	7	0.5
(4,93)	1:9:A:ILE:HB	1:11:A:TRP:H	10	0.5
(4,80)	1:11:A:TRP:HE1	1:24:A:PRO:HD2	8	0.5
(4,18)	1:24:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	5	0.5
(4,15)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD2	6	0.5
(3,220)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD2	4	0.5
(3,207)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HG	4	0.5
(3,207)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HG	4	0.5
(2,526)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HG3	7	0.5
(2,354)	1:9:A:ILE:HB	1:11:A:TRP:H	10	0.5
(2,334)	1:11:A:TRP:HE1	1:24:A:PRO:HD2	8	0.5
(2,277)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD2	4	0.5
(2,257)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HG	4	0.5
(2,257)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HG	4	0.5
(2,96)	1:24:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	5	0.5
(2,80)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD2	6	0.5
(1,505)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HD3	3	0.5
(1,505)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HD3	3	0.5
(1,505)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HD3	3	0.5
(1,505)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HD3	6	0.5
(1,505)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HD3	6	0.5
(1,505)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HD3	6	0.5
(1,490)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HD3	5	0.5
(1,490)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HD3	7	0.5
(1,484)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HD1	9	0.5
(1,484)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HD2	9	0.5
(1,394)	1:23:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HD2	5	0.5
(1,271)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD3	3	0.5
(1,237)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HB2	7	0.5
(1,237)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HB2	7	0.5
(1,155)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HA	4	0.5
(1,112)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HA	3	0.5
(1,112)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HA	5	0.5
(1,39)	1:11:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HB2	3	0.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,20)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HD1	5	0.5
(1,20)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HD2	5	0.5
(1,12)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG11	9	0.5
(1,12)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG12	9	0.5
(1,12)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG13	9	0.5
(4,117)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:HB3	1	0.49
(4,117)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:HB3	1	0.49
(4,117)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:HB3	1	0.49
(4,99)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG2	4	0.49
(4,99)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG3	4	0.49
(4,93)	1:9:A:ILE:HB	1:11:A:TRP:H	9	0.49
(4,46)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HD1	1	0.49
(4,46)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HD2	1	0.49
(4,46)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HD1	1	0.49
(4,46)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HD2	1	0.49
(4,42)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HA	8	0.49
(4,42)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HA	8	0.49
(4,34)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD21	2	0.49
(4,34)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD22	2	0.49
(4,34)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD23	2	0.49
(4,34)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD21	3	0.49
(4,34)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD22	3	0.49
(4,34)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD23	3	0.49
(4,16)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD3	1	0.49
(3,344)	1:8:A:TYR:HE1	1:25:A:SER:HA	3	0.49
(3,344)	1:8:A:TYR:HE2	1:25:A:SER:HA	3	0.49
(3,263)	1:10:A:GLN:HB2	1:11:A:TRP:H	8	0.49
(3,228)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	4	0.49
(3,13)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD21	6	0.49
(3,13)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD22	6	0.49
(3,13)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD23	6	0.49
(2,519)	1:8:A:TYR:HE1	1:25:A:SER:HA	3	0.49
(2,519)	1:8:A:TYR:HE2	1:25:A:SER:HA	3	0.49
(2,407)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:HB3	1	0.49
(2,407)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:HB3	1	0.49
(2,407)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:HB3	1	0.49
(2,370)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG2	4	0.49
(2,370)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG3	4	0.49
(2,358)	1:10:A:GLN:HB2	1:11:A:TRP:H	8	0.49
(2,354)	1:9:A:ILE:HB	1:11:A:TRP:H	9	0.49
(2,287)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	4	0.49
(2,242)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HD1	1	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,242)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HD2	1	0.49
(2,242)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HD1	1	0.49
(2,242)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HD2	1	0.49
(2,235)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HA	8	0.49
(2,235)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HA	8	0.49
(2,178)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD21	2	0.49
(2,178)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD22	2	0.49
(2,178)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD23	2	0.49
(2,178)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD21	3	0.49
(2,178)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD22	3	0.49
(2,178)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD23	3	0.49
(2,81)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD3	1	0.49
(2,19)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD21	6	0.49
(2,19)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD22	6	0.49
(2,19)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD23	6	0.49
(1,490)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HD3	2	0.49
(1,490)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HD3	3	0.49
(1,490)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HD3	6	0.49
(1,488)	1:22:A:PRO:HD2	1:22:A:PRO:HD3	1	0.49
(1,488)	1:22:A:PRO:HD2	1:22:A:PRO:HD3	2	0.49
(1,488)	1:22:A:PRO:HD2	1:22:A:PRO:HD3	3	0.49
(1,440)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HB2	7	0.49
(1,440)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HB2	7	0.49
(1,440)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HB2	7	0.49
(1,440)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HB3	7	0.49
(1,440)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HB3	7	0.49
(1,440)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HB3	7	0.49
(1,438)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG21	10	0.49
(1,438)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG22	10	0.49
(1,438)	1:5:A:VAL:HB	1:9:A:ILE:HG23	10	0.49
(1,406)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HB3	7	0.49
(1,396)	1:8:A:TYR:HB3	1:23:A:PRO:HD3	1	0.49
(1,396)	1:23:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HD3	1	0.49
(1,358)	1:10:A:GLN:HB2	1:11:A:TRP:H	2	0.49
(1,302)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD11	9	0.49
(1,302)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD12	9	0.49
(1,302)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD13	9	0.49
(1,298)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD21	2	0.49
(1,298)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD22	2	0.49
(1,298)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD23	2	0.49
(1,201)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HG3	6	0.49
(1,155)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HA	3	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,112)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HA	2	0.49
(1,64)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG2	4	0.49
(1,64)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG3	4	0.49
(1,64)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG2	7	0.49
(1,64)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG3	7	0.49
(1,40)	1:11:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HB3	8	0.49
(4,136)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA2	8	0.48
(4,136)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA2	8	0.48
(4,136)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA2	8	0.48
(4,112)	1:23:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HD3	7	0.48
(4,112)	1:23:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HD3	8	0.48
(4,62)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD11	1	0.48
(4,62)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD12	1	0.48
(4,62)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD13	1	0.48
(4,52)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	9	0.48
(4,52)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	9	0.48
(4,52)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	9	0.48
(4,52)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	9	0.48
(4,52)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	9	0.48
(4,52)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	9	0.48
(4,34)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD21	7	0.48
(4,34)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD22	7	0.48
(4,34)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD23	7	0.48
(4,16)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD3	2	0.48
(4,16)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD3	3	0.48
(4,7)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE1	5	0.48
(4,7)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE2	5	0.48
(3,326)	1:21:A:ARG:HG2	1:22:A:PRO:HD3	3	0.48
(3,326)	1:21:A:ARG:HG2	1:22:A:PRO:HD3	9	0.48
(3,326)	1:21:A:ARG:HG2	1:22:A:PRO:HD3	10	0.48
(3,294)	1:10:A:GLN:HG2	1:13:A:LYS:HD2	8	0.48
(3,294)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:HD2	8	0.48
(3,294)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:HD3	8	0.48
(3,267)	1:24:A:PRO:HG3	1:25:A:SER:H	7	0.48
(2,489)	1:21:A:ARG:HG2	1:22:A:PRO:HD3	3	0.48
(2,489)	1:21:A:ARG:HG2	1:22:A:PRO:HD3	9	0.48
(2,489)	1:21:A:ARG:HG2	1:22:A:PRO:HD3	10	0.48
(2,436)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA2	8	0.48
(2,436)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA2	8	0.48
(2,436)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA2	8	0.48
(2,422)	1:10:A:GLN:HG2	1:13:A:LYS:HD2	8	0.48
(2,422)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:HD2	8	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,422)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:HD3	8	0.48
(2,396)	1:23:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HD3	7	0.48
(2,396)	1:23:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HD3	8	0.48
(2,363)	1:24:A:PRO:HG3	1:25:A:SER:H	7	0.48
(2,293)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD11	1	0.48
(2,293)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD12	1	0.48
(2,293)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD13	1	0.48
(2,261)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	9	0.48
(2,261)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	9	0.48
(2,261)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	9	0.48
(2,261)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	9	0.48
(2,261)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	9	0.48
(2,261)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	9	0.48
(2,178)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD21	7	0.48
(2,178)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD22	7	0.48
(2,178)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD23	7	0.48
(2,81)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD3	2	0.48
(2,81)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD3	3	0.48
(2,21)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE1	5	0.48
(2,21)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE2	5	0.48
(1,490)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HD3	4	0.48
(1,490)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HD3	9	0.48
(1,488)	1:22:A:PRO:HD2	1:22:A:PRO:HD3	7	0.48
(1,488)	1:22:A:PRO:HD2	1:22:A:PRO:HD3	8	0.48
(1,435)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:HG	1	0.48
(1,435)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:HG	1	0.48
(1,435)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:HG	1	0.48
(1,386)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HB3	5	0.48
(1,369)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HB2	7	0.48
(1,365)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:H	1	0.48
(1,365)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:H	1	0.48
(1,365)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:H	1	0.48
(1,357)	1:11:A:TRP:H	1:24:A:PRO:HB3	8	0.48
(1,202)	1:15:A:GLY:H	1:15:A:GLY:HA3	5	0.48
(1,189)	1:13:A:LYS:HE2	1:13:A:LYS:HG2	5	0.48
(1,189)	1:13:A:LYS:HE3	1:13:A:LYS:HG2	5	0.48
(1,18)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD11	1	0.48
(1,18)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD12	1	0.48
(1,18)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD13	1	0.48
(1,18)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD11	2	0.48
(1,18)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD12	2	0.48
(1,18)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD13	2	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,166)	1:12:A:LEU:HG	1:16:A:GLY:HA2	1	0.47
(4,163)	1:8:A:TYR:HB2	1:24:A:PRO:HA	2	0.47
(4,163)	1:8:A:TYR:HB2	1:24:A:PRO:HA	3	0.47
(4,163)	1:8:A:TYR:HB2	1:24:A:PRO:HA	4	0.47
(4,93)	1:9:A:ILE:HB	1:11:A:TRP:H	8	0.47
(4,79)	1:11:A:TRP:HE1	1:23:A:PRO:HA	8	0.47
(4,77)	1:11:A:TRP:HE1	1:12:A:LEU:HD11	6	0.47
(4,77)	1:11:A:TRP:HE1	1:12:A:LEU:HD12	6	0.47
(4,77)	1:11:A:TRP:HE1	1:12:A:LEU:HD13	6	0.47
(4,67)	1:11:A:TRP:HZ3	1:23:A:PRO:HB2	3	0.47
(4,62)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD11	2	0.47
(4,62)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD12	2	0.47
(4,62)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD13	2	0.47
(4,54)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE1	9	0.47
(4,54)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE2	9	0.47
(4,54)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE1	9	0.47
(4,54)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE2	9	0.47
(4,54)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE1	9	0.47
(4,54)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE2	9	0.47
(4,34)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD21	1	0.47
(4,34)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD22	1	0.47
(4,34)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD23	1	0.47
(4,34)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD21	6	0.47
(4,34)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD22	6	0.47
(4,34)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD23	6	0.47
(4,16)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD3	4	0.47
(4,7)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE1	7	0.47
(4,7)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE2	7	0.47
(4,2)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	1	0.47
(4,2)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	1	0.47
(4,2)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	1	0.47
(4,2)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	5	0.47
(4,2)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	5	0.47
(4,2)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	5	0.47
(4,2)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	7	0.47
(4,2)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	7	0.47
(4,2)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	7	0.47
(2,498)	1:12:A:LEU:HG	1:16:A:GLY:HA2	1	0.47
(2,487)	1:8:A:TYR:HB2	1:24:A:PRO:HA	2	0.47
(2,487)	1:8:A:TYR:HB2	1:24:A:PRO:HA	3	0.47
(2,487)	1:8:A:TYR:HB2	1:24:A:PRO:HA	4	0.47
(2,354)	1:9:A:ILE:HB	1:11:A:TRP:H	8	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,333)	1:11:A:TRP:HE1	1:23:A:PRO:HA	8	0.47
(2,329)	1:11:A:TRP:HE1	1:12:A:LEU:HD11	6	0.47
(2,329)	1:11:A:TRP:HE1	1:12:A:LEU:HD12	6	0.47
(2,329)	1:11:A:TRP:HE1	1:12:A:LEU:HD13	6	0.47
(2,303)	1:11:A:TRP:HZ3	1:23:A:PRO:HB2	3	0.47
(2,293)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD11	2	0.47
(2,293)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD12	2	0.47
(2,293)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD13	2	0.47
(2,263)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE1	9	0.47
(2,263)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE2	9	0.47
(2,263)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE1	9	0.47
(2,263)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE2	9	0.47
(2,263)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE1	9	0.47
(2,263)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE2	9	0.47
(2,178)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD21	1	0.47
(2,178)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD22	1	0.47
(2,178)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD23	1	0.47
(2,178)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD21	6	0.47
(2,178)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD22	6	0.47
(2,178)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD23	6	0.47
(2,81)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD3	4	0.47
(2,21)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE1	7	0.47
(2,21)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE2	7	0.47
(2,13)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	1	0.47
(2,13)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	1	0.47
(2,13)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	1	0.47
(2,13)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	5	0.47
(2,13)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	5	0.47
(2,13)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	5	0.47
(2,13)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	7	0.47
(2,13)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	7	0.47
(2,13)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	7	0.47
(1,490)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HD3	10	0.47
(1,484)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HD1	4	0.47
(1,484)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HD2	4	0.47
(1,435)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:HG	6	0.47
(1,435)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:HG	6	0.47
(1,435)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:HG	6	0.47
(1,428)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	2	0.47
(1,428)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	2	0.47
(1,428)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	2	0.47
(1,428)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	2	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,428)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	2	0.47
(1,428)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	2	0.47
(1,428)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	2	0.47
(1,428)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	2	0.47
(1,428)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	2	0.47
(1,413)	1:1:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD2	3	0.47
(1,413)	1:1:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD3	3	0.47
(1,413)	1:1:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD2	3	0.47
(1,413)	1:1:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD3	3	0.47
(1,402)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	6	0.47
(1,402)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	6	0.47
(1,369)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HB2	8	0.47
(1,358)	1:10:A:GLN:HB2	1:11:A:TRP:H	1	0.47
(1,331)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB2	4	0.47
(1,298)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD21	10	0.47
(1,298)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD22	10	0.47
(1,298)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD23	10	0.47
(1,268)	1:11:A:TRP:HZ2	1:22:A:PRO:HA	2	0.47
(1,266)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD21	4	0.47
(1,266)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD22	4	0.47
(1,266)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD23	4	0.47
(1,266)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD21	4	0.47
(1,266)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD22	4	0.47
(1,266)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD23	4	0.47
(1,261)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	6	0.47
(1,261)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	6	0.47
(1,261)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	6	0.47
(1,261)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	6	0.47
(1,261)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	6	0.47
(1,261)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	6	0.47
(1,237)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HB2	8	0.47
(1,237)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HB2	8	0.47
(1,155)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HA	2	0.47
(1,155)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HA	8	0.47
(1,155)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HA	10	0.47
(1,140)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:HB3	8	0.47
(1,112)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HA	1	0.47
(1,112)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HA	9	0.47
(1,64)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG2	3	0.47
(1,64)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG3	3	0.47
(1,64)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG2	9	0.47
(1,64)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG3	9	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,6)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HB	8	0.47
(4,174)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HA	1	0.46
(4,174)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HA	1	0.46
(4,174)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HA	1	0.46
(4,166)	1:12:A:LEU:HG	1:16:A:GLY:HA2	2	0.46
(4,153)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HD11	10	0.46
(4,153)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HD12	10	0.46
(4,153)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HD13	10	0.46
(4,123)	1:23:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HB2	1	0.46
(4,117)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:HB3	7	0.46
(4,117)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:HB3	7	0.46
(4,117)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:HB3	7	0.46
(4,108)	1:7:A:LEU:HG	1:8:A:TYR:HA	6	0.46
(4,90)	1:13:A:LYS:HG3	1:14:A:ASP:H	5	0.46
(4,90)	1:13:A:LYS:HG3	1:14:A:ASP:H	6	0.46
(4,79)	1:11:A:TRP:HE1	1:23:A:PRO:HA	7	0.46
(4,62)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD11	4	0.46
(4,62)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD12	4	0.46
(4,62)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD13	4	0.46
(4,54)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE1	10	0.46
(4,54)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE2	10	0.46
(4,54)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE1	10	0.46
(4,54)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE2	10	0.46
(4,54)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE1	10	0.46
(4,54)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE2	10	0.46
(4,50)	1:7:A:LEU:HG	1:8:A:TYR:HD1	7	0.46
(4,50)	1:7:A:LEU:HG	1:8:A:TYR:HD2	7	0.46
(4,34)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD21	5	0.46
(4,34)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD22	5	0.46
(4,34)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD23	5	0.46
(4,14)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG2	6	0.46
(4,14)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG3	6	0.46
(4,12)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG2	7	0.46
(4,12)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG3	7	0.46
(3,326)	1:21:A:ARG:HG2	1:22:A:PRO:HD3	6	0.46
(3,294)	1:10:A:GLN:HG2	1:13:A:LYS:HD2	5	0.46
(3,294)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:HD2	5	0.46
(3,294)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:HD3	5	0.46
(3,267)	1:24:A:PRO:HG3	1:25:A:SER:H	4	0.46
(3,220)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD2	3	0.46
(3,176)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD3	5	0.46
(3,176)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HD3	5	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,175)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD2	6	0.46
(3,175)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD2	10	0.46
(2,512)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HA	1	0.46
(2,512)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HA	1	0.46
(2,512)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HA	1	0.46
(2,498)	1:12:A:LEU:HG	1:16:A:GLY:HA2	2	0.46
(2,489)	1:21:A:ARG:HG2	1:22:A:PRO:HD3	6	0.46
(2,466)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HD11	10	0.46
(2,466)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HD12	10	0.46
(2,466)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HD13	10	0.46
(2,422)	1:10:A:GLN:HG2	1:13:A:LYS:HD2	5	0.46
(2,422)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:HD2	5	0.46
(2,422)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:HD3	5	0.46
(2,414)	1:23:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HB2	1	0.46
(2,407)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:HB3	7	0.46
(2,407)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:HB3	7	0.46
(2,407)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:HB3	7	0.46
(2,385)	1:7:A:LEU:HG	1:8:A:TYR:HA	6	0.46
(2,363)	1:24:A:PRO:HG3	1:25:A:SER:H	4	0.46
(2,351)	1:13:A:LYS:HG3	1:14:A:ASP:H	5	0.46
(2,351)	1:13:A:LYS:HG3	1:14:A:ASP:H	6	0.46
(2,333)	1:11:A:TRP:HE1	1:23:A:PRO:HA	7	0.46
(2,293)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD11	4	0.46
(2,293)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD12	4	0.46
(2,293)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD13	4	0.46
(2,277)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD2	3	0.46
(2,263)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE1	10	0.46
(2,263)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE2	10	0.46
(2,263)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE1	10	0.46
(2,263)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE2	10	0.46
(2,263)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE1	10	0.46
(2,263)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE2	10	0.46
(2,254)	1:7:A:LEU:HG	1:8:A:TYR:HD1	7	0.46
(2,254)	1:7:A:LEU:HG	1:8:A:TYR:HD2	7	0.46
(2,212)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD3	5	0.46
(2,212)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HD3	5	0.46
(2,211)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD2	6	0.46
(2,211)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD2	10	0.46
(2,178)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD21	5	0.46
(2,178)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD22	5	0.46
(2,178)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD23	5	0.46
(2,78)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG2	6	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,78)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG3	6	0.46
(2,58)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG2	7	0.46
(2,58)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG3	7	0.46
(1,513)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD11	7	0.46
(1,513)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD12	7	0.46
(1,513)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD13	7	0.46
(1,502)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB2	7	0.46
(1,502)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB2	7	0.46
(1,502)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB2	7	0.46
(1,448)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG11	1	0.46
(1,448)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG12	1	0.46
(1,448)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG13	1	0.46
(1,448)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG11	1	0.46
(1,448)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG12	1	0.46
(1,448)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG13	1	0.46
(1,440)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HB2	4	0.46
(1,440)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HB2	4	0.46
(1,440)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HB2	4	0.46
(1,440)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HB3	4	0.46
(1,440)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HB3	4	0.46
(1,440)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HB3	4	0.46
(1,397)	1:14:A:ASP:HB2	1:19:A:SER:HB3	3	0.46
(1,394)	1:23:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HD2	2	0.46
(1,369)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HB2	2	0.46
(1,358)	1:10:A:GLN:HB2	1:11:A:TRP:H	4	0.46
(1,341)	1:10:A:GLN:HB2	1:13:A:LYS:H	7	0.46
(1,301)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD11	10	0.46
(1,301)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD12	10	0.46
(1,301)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD13	10	0.46
(1,298)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD21	7	0.46
(1,298)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD22	7	0.46
(1,298)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD23	7	0.46
(1,252)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	6	0.46
(1,252)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	6	0.46
(1,242)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HD1	4	0.46
(1,242)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HD2	4	0.46
(1,242)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HD1	4	0.46
(1,242)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HD2	4	0.46
(1,198)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HB2	5	0.46
(1,198)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HB3	5	0.46
(1,198)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HB2	7	0.46
(1,198)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HB3	7	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,196)	1:13:A:LYS:HG2	1:13:A:LYS:HG3	2	0.46
(1,196)	1:13:A:LYS:HG2	1:13:A:LYS:HG3	3	0.46
(1,196)	1:13:A:LYS:HG2	1:13:A:LYS:HG3	4	0.46
(1,196)	1:13:A:LYS:HG2	1:13:A:LYS:HG3	5	0.46
(1,196)	1:13:A:LYS:HG2	1:13:A:LYS:HG3	6	0.46
(1,196)	1:13:A:LYS:HG2	1:13:A:LYS:HG3	7	0.46
(1,196)	1:13:A:LYS:HG2	1:13:A:LYS:HG3	8	0.46
(1,196)	1:13:A:LYS:HG2	1:13:A:LYS:HG3	9	0.46
(1,196)	1:13:A:LYS:HG2	1:13:A:LYS:HG3	10	0.46
(1,160)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD11	6	0.46
(1,160)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD12	6	0.46
(1,160)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD13	6	0.46
(1,112)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HA	7	0.46
(1,112)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HA	8	0.46
(1,108)	1:22:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	10	0.46
(1,68)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HB2	8	0.46
(1,64)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG2	1	0.46
(1,64)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG3	1	0.46
(1,64)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG2	2	0.46
(1,64)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG3	2	0.46
(1,64)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG2	8	0.46
(1,64)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG3	8	0.46
(1,64)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG2	10	0.46
(1,64)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG3	10	0.46
(1,28)	1:14:A:ASP:HB2	1:14:A:ASP:HB3	1	0.46
(1,28)	1:14:A:ASP:HB2	1:14:A:ASP:HB3	5	0.46
(1,28)	1:14:A:ASP:HB2	1:14:A:ASP:HB3	7	0.46
(1,28)	1:14:A:ASP:HB2	1:14:A:ASP:HB3	9	0.46
(1,22)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HD1	7	0.46
(1,22)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HD2	7	0.46
(4,153)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HD11	2	0.45
(4,153)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HD12	2	0.45
(4,153)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HD13	2	0.45
(4,153)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HD11	4	0.45
(4,153)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HD12	4	0.45
(4,153)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HD13	4	0.45
(4,146)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB3	7	0.45
(4,146)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB3	7	0.45
(4,146)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB3	7	0.45
(4,143)	1:12:A:LEU:HD11	1:14:A:ASP:HB2	4	0.45
(4,143)	1:12:A:LEU:HD12	1:14:A:ASP:HB2	4	0.45
(4,143)	1:12:A:LEU:HD13	1:14:A:ASP:HB2	4	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,104)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:HB2	5	0.45
(4,104)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:HB3	5	0.45
(4,104)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:HB2	7	0.45
(4,104)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:HB3	7	0.45
(4,104)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:HB2	8	0.45
(4,104)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:HB3	8	0.45
(4,89)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:H	5	0.45
(4,89)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:H	5	0.45
(4,89)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:H	5	0.45
(4,62)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD11	6	0.45
(4,62)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD12	6	0.45
(4,62)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD13	6	0.45
(4,36)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD3	3	0.45
(4,21)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	2	0.45
(3,326)	1:21:A:ARG:HG2	1:22:A:PRO:HD3	5	0.45
(3,267)	1:24:A:PRO:HG3	1:25:A:SER:H	8	0.45
(3,220)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD2	1	0.45
(3,220)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD2	2	0.45
(3,215)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD2	3	0.45
(3,13)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD21	3	0.45
(3,13)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD22	3	0.45
(3,13)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD23	3	0.45
(2,489)	1:21:A:ARG:HG2	1:22:A:PRO:HD3	5	0.45
(2,466)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HD11	2	0.45
(2,466)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HD12	2	0.45
(2,466)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HD13	2	0.45
(2,466)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HD11	4	0.45
(2,466)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HD12	4	0.45
(2,466)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HD13	4	0.45
(2,454)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB3	7	0.45
(2,454)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB3	7	0.45
(2,454)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB3	7	0.45
(2,449)	1:12:A:LEU:HD11	1:14:A:ASP:HB2	4	0.45
(2,449)	1:12:A:LEU:HD12	1:14:A:ASP:HB2	4	0.45
(2,449)	1:12:A:LEU:HD13	1:14:A:ASP:HB2	4	0.45
(2,380)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:HB2	5	0.45
(2,380)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:HB3	5	0.45
(2,380)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:HB2	7	0.45
(2,380)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:HB3	7	0.45
(2,380)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:HB2	8	0.45
(2,380)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:HB3	8	0.45
(2,363)	1:24:A:PRO:HG3	1:25:A:SER:H	8	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,349)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:H	5	0.45
(2,349)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:H	5	0.45
(2,349)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:H	5	0.45
(2,293)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD11	6	0.45
(2,293)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD12	6	0.45
(2,293)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD13	6	0.45
(2,277)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD2	1	0.45
(2,277)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD2	2	0.45
(2,270)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD2	3	0.45
(2,210)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD3	3	0.45
(2,111)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	2	0.45
(2,19)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD21	3	0.45
(2,19)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD22	3	0.45
(2,19)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD23	3	0.45
(1,518)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HE1	9	0.45
(1,518)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HE2	9	0.45
(1,501)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB3	5	0.45
(1,501)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB3	5	0.45
(1,501)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB3	5	0.45
(1,437)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG2	10	0.45
(1,437)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG2	10	0.45
(1,437)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG2	10	0.45
(1,437)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG3	10	0.45
(1,437)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG3	10	0.45
(1,437)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG3	10	0.45
(1,427)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG11	5	0.45
(1,427)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG12	5	0.45
(1,427)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG13	5	0.45
(1,427)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG11	5	0.45
(1,427)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG12	5	0.45
(1,427)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG13	5	0.45
(1,427)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG11	5	0.45
(1,427)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG12	5	0.45
(1,427)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG13	5	0.45
(1,369)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HB2	1	0.45
(1,357)	1:11:A:TRP:H	1:24:A:PRO:HB3	4	0.45
(1,342)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:H	3	0.45
(1,342)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:H	3	0.45
(1,342)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:H	3	0.45
(1,284)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB3	8	0.45
(1,255)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HG	4	0.45
(1,255)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HG	4	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,211)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD2	9	0.45
(1,211)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HD2	9	0.45
(1,196)	1:13:A:LYS:HG2	1:13:A:LYS:HG3	1	0.45
(1,155)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HA	9	0.45
(1,136)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD21	5	0.45
(1,136)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD22	5	0.45
(1,136)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD23	5	0.45
(1,112)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HA	10	0.45
(1,108)	1:22:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	9	0.45
(1,64)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG2	5	0.45
(1,64)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG3	5	0.45
(1,64)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG2	6	0.45
(1,64)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG3	6	0.45
(1,39)	1:11:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HB2	8	0.45
(1,34)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HG2	4	0.45
(1,28)	1:14:A:ASP:HB2	1:14:A:ASP:HB3	2	0.45
(1,28)	1:14:A:ASP:HB2	1:14:A:ASP:HB3	3	0.45
(1,28)	1:14:A:ASP:HB2	1:14:A:ASP:HB3	4	0.45
(1,28)	1:14:A:ASP:HB2	1:14:A:ASP:HB3	6	0.45
(1,28)	1:14:A:ASP:HB2	1:14:A:ASP:HB3	8	0.45
(1,28)	1:14:A:ASP:HB2	1:14:A:ASP:HB3	10	0.45
(4,166)	1:12:A:LEU:HG	1:16:A:GLY:HA2	3	0.44
(4,165)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG3	4	0.44
(4,153)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HD11	9	0.44
(4,153)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HD12	9	0.44
(4,153)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HD13	9	0.44
(4,146)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB3	1	0.44
(4,146)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB3	1	0.44
(4,146)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB3	1	0.44
(4,93)	1:9:A:ILE:HB	1:11:A:TRP:H	7	0.44
(4,36)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD3	7	0.44
(4,14)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG2	5	0.44
(4,14)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG3	5	0.44
(4,14)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG2	7	0.44
(4,14)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG3	7	0.44
(4,14)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG2	8	0.44
(4,14)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG3	8	0.44
(4,2)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	6	0.44
(4,2)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	6	0.44
(4,2)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	6	0.44
(3,326)	1:21:A:ARG:HG2	1:22:A:PRO:HD3	1	0.44
(3,175)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD2	9	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,498)	1:12:A:LEU:HG	1:16:A:GLY:HA2	3	0.44
(2,492)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG3	4	0.44
(2,489)	1:21:A:ARG:HG2	1:22:A:PRO:HD3	1	0.44
(2,466)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HD11	9	0.44
(2,466)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HD12	9	0.44
(2,466)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HD13	9	0.44
(2,454)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB3	1	0.44
(2,454)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB3	1	0.44
(2,454)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB3	1	0.44
(2,354)	1:9:A:ILE:HB	1:11:A:TRP:H	7	0.44
(2,211)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD2	9	0.44
(2,210)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD3	7	0.44
(2,78)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG2	5	0.44
(2,78)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG3	5	0.44
(2,78)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG2	7	0.44
(2,78)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG3	7	0.44
(2,78)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG2	8	0.44
(2,78)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG3	8	0.44
(2,13)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	6	0.44
(2,13)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	6	0.44
(2,13)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	6	0.44
(1,501)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB3	1	0.44
(1,501)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB3	1	0.44
(1,501)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB3	1	0.44
(1,501)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB3	9	0.44
(1,501)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB3	9	0.44
(1,501)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB3	9	0.44
(1,492)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG3	7	0.44
(1,483)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HE1	6	0.44
(1,483)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HE2	6	0.44
(1,473)	1:13:A:LYS:HB2	1:14:A:ASP:H	3	0.44
(1,473)	1:13:A:LYS:HB3	1:14:A:ASP:H	3	0.44
(1,467)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG11	4	0.44
(1,467)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG12	4	0.44
(1,467)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG13	4	0.44
(1,428)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	3	0.44
(1,428)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	3	0.44
(1,428)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	3	0.44
(1,428)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	3	0.44
(1,428)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	3	0.44
(1,428)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	3	0.44
(1,428)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	3	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,428)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	3	0.44
(1,428)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	3	0.44
(1,409)	1:23:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	6	0.44
(1,397)	1:14:A:ASP:HB2	1:19:A:SER:HB3	8	0.44
(1,273)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD3	8	0.44
(1,272)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD3	10	0.44
(1,224)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HB2	2	0.44
(1,224)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HB3	2	0.44
(1,224)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HB2	6	0.44
(1,224)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HB3	6	0.44
(1,203)	1:15:A:GLY:H	1:15:A:GLY:HA2	5	0.44
(1,198)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HB2	6	0.44
(1,198)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HB3	6	0.44
(1,180)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HB3	1	0.44
(1,180)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HB3	2	0.44
(1,180)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HB3	3	0.44
(1,180)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HB3	4	0.44
(1,180)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HB3	5	0.44
(1,180)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HB3	6	0.44
(1,180)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HB3	7	0.44
(1,180)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HB3	8	0.44
(1,180)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HB3	9	0.44
(1,180)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HB3	10	0.44
(1,142)	1:8:A:TYR:H	1:8:A:TYR:HB3	6	0.44
(1,126)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HB3	1	0.44
(1,126)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HB3	2	0.44
(1,126)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HB3	4	0.44
(1,101)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HG2	5	0.44
(1,68)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HB2	3	0.44
(1,66)	1:18:A:SER:HA	1:18:A:SER:HB2	3	0.44
(1,66)	1:18:A:SER:HA	1:18:A:SER:HB3	3	0.44
(1,66)	1:18:A:SER:HA	1:18:A:SER:HB2	7	0.44
(1,66)	1:18:A:SER:HA	1:18:A:SER:HB3	7	0.44
(1,61)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG2	7	0.44
(1,61)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG3	7	0.44
(1,40)	1:11:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HB3	1	0.44
(4,161)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HA	4	0.43
(4,111)	1:23:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HD2	7	0.43
(4,78)	1:11:A:TRP:HE1	1:22:A:PRO:HG2	2	0.43
(4,78)	1:11:A:TRP:HE1	1:22:A:PRO:HG3	2	0.43
(4,78)	1:11:A:TRP:HE1	1:22:A:PRO:HG2	3	0.43
(4,78)	1:11:A:TRP:HE1	1:22:A:PRO:HG3	3	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,78)	1:11:A:TRP:HE1	1:22:A:PRO:HG2	6	0.43
(4,78)	1:11:A:TRP:HE1	1:22:A:PRO:HG3	6	0.43
(4,77)	1:11:A:TRP:HE1	1:12:A:LEU:HD11	5	0.43
(4,77)	1:11:A:TRP:HE1	1:12:A:LEU:HD12	5	0.43
(4,77)	1:11:A:TRP:HE1	1:12:A:LEU:HD13	5	0.43
(4,77)	1:11:A:TRP:HE1	1:12:A:LEU:HD11	8	0.43
(4,77)	1:11:A:TRP:HE1	1:12:A:LEU:HD12	8	0.43
(4,77)	1:11:A:TRP:HE1	1:12:A:LEU:HD13	8	0.43
(4,52)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	8	0.43
(4,52)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	8	0.43
(4,52)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	8	0.43
(4,52)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	8	0.43
(4,52)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	8	0.43
(4,52)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	8	0.43
(4,36)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD3	1	0.43
(4,21)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	3	0.43
(4,14)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG2	10	0.43
(4,14)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG3	10	0.43
(3,215)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD2	10	0.43
(2,485)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HA	4	0.43
(2,394)	1:23:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HD2	7	0.43
(2,332)	1:11:A:TRP:HE1	1:22:A:PRO:HG2	2	0.43
(2,332)	1:11:A:TRP:HE1	1:22:A:PRO:HG3	2	0.43
(2,332)	1:11:A:TRP:HE1	1:22:A:PRO:HG2	3	0.43
(2,332)	1:11:A:TRP:HE1	1:22:A:PRO:HG3	3	0.43
(2,332)	1:11:A:TRP:HE1	1:22:A:PRO:HG2	6	0.43
(2,332)	1:11:A:TRP:HE1	1:22:A:PRO:HG3	6	0.43
(2,329)	1:11:A:TRP:HE1	1:12:A:LEU:HD11	5	0.43
(2,329)	1:11:A:TRP:HE1	1:12:A:LEU:HD12	5	0.43
(2,329)	1:11:A:TRP:HE1	1:12:A:LEU:HD13	5	0.43
(2,329)	1:11:A:TRP:HE1	1:12:A:LEU:HD11	8	0.43
(2,329)	1:11:A:TRP:HE1	1:12:A:LEU:HD12	8	0.43
(2,329)	1:11:A:TRP:HE1	1:12:A:LEU:HD13	8	0.43
(2,270)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD2	10	0.43
(2,261)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	8	0.43
(2,261)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	8	0.43
(2,261)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	8	0.43
(2,261)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	8	0.43
(2,261)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	8	0.43
(2,261)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	8	0.43
(2,210)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD3	1	0.43
(2,111)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	3	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,78)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG2	10	0.43
(2,78)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG3	10	0.43
(1,510)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HD3	10	0.43
(1,510)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HD3	10	0.43
(1,510)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HD3	10	0.43
(1,505)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HD3	1	0.43
(1,505)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HD3	1	0.43
(1,505)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HD3	1	0.43
(1,501)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB3	2	0.43
(1,501)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB3	2	0.43
(1,501)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB3	2	0.43
(1,486)	1:24:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:HA	1	0.43
(1,473)	1:13:A:LYS:HB2	1:14:A:ASP:H	8	0.43
(1,473)	1:13:A:LYS:HB3	1:14:A:ASP:H	8	0.43
(1,473)	1:13:A:LYS:HB2	1:14:A:ASP:H	10	0.43
(1,473)	1:13:A:LYS:HB3	1:14:A:ASP:H	10	0.43
(1,427)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG11	4	0.43
(1,427)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG12	4	0.43
(1,427)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG13	4	0.43
(1,427)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG11	4	0.43
(1,427)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG12	4	0.43
(1,427)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG13	4	0.43
(1,427)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG11	4	0.43
(1,427)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG12	4	0.43
(1,427)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG13	4	0.43
(1,401)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD2	8	0.43
(1,401)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD2	8	0.43
(1,339)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:H	8	0.43
(1,332)	1:11:A:TRP:HE1	1:22:A:PRO:HG2	8	0.43
(1,332)	1:11:A:TRP:HE1	1:22:A:PRO:HG3	8	0.43
(1,299)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD21	7	0.43
(1,299)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD22	7	0.43
(1,299)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD23	7	0.43
(1,298)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD21	1	0.43
(1,298)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD22	1	0.43
(1,298)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD23	1	0.43
(1,263)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE1	7	0.43
(1,263)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE2	7	0.43
(1,263)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE1	7	0.43
(1,263)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE2	7	0.43
(1,263)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE1	7	0.43
(1,263)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE2	7	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,224)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HB2	3	0.43
(1,224)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HB3	3	0.43
(1,224)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HB2	5	0.43
(1,224)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HB3	5	0.43
(1,224)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HB2	7	0.43
(1,224)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HB3	7	0.43
(1,215)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HG3	4	0.43
(1,215)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HG3	8	0.43
(1,155)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HA	5	0.43
(1,126)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HB3	3	0.43
(1,126)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HB3	5	0.43
(1,126)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HB3	6	0.43
(1,126)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HB3	7	0.43
(1,126)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HB3	8	0.43
(1,126)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HB3	9	0.43
(1,126)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HB3	10	0.43
(1,68)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HB2	2	0.43
(1,68)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HB2	9	0.43
(1,61)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG2	4	0.43
(1,61)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG3	4	0.43
(1,61)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG2	8	0.43
(1,61)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG3	8	0.43
(1,8)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG21	5	0.43
(1,8)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG22	5	0.43
(1,8)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG23	5	0.43
(4,174)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HA	7	0.42
(4,174)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HA	7	0.42
(4,174)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HA	7	0.42
(4,166)	1:12:A:LEU:HG	1:16:A:GLY:HA2	5	0.42
(4,166)	1:12:A:LEU:HG	1:16:A:GLY:HA2	7	0.42
(4,153)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HD11	3	0.42
(4,153)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HD12	3	0.42
(4,153)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HD13	3	0.42
(4,144)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HE2	2	0.42
(4,144)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HE2	2	0.42
(4,144)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HE2	2	0.42
(4,144)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HE3	2	0.42
(4,144)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HE3	2	0.42
(4,144)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HE3	2	0.42
(4,143)	1:12:A:LEU:HD11	1:14:A:ASP:HB2	2	0.42
(4,143)	1:12:A:LEU:HD12	1:14:A:ASP:HB2	2	0.42
(4,143)	1:12:A:LEU:HD13	1:14:A:ASP:HB2	2	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,133)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG13	1	0.42
(4,133)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG13	1	0.42
(4,133)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG13	1	0.42
(4,111)	1:23:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HD2	6	0.42
(4,104)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:HB2	4	0.42
(4,104)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:HB3	4	0.42
(4,103)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	8	0.42
(4,103)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB3	8	0.42
(4,93)	1:9:A:ILE:HB	1:11:A:TRP:H	1	0.42
(4,36)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD3	8	0.42
(4,14)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG2	9	0.42
(4,14)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG3	9	0.42
(4,12)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG2	4	0.42
(4,12)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG3	4	0.42
(4,7)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE1	6	0.42
(4,7)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE2	6	0.42
(3,311)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HD2	8	0.42
(3,311)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HD2	8	0.42
(3,311)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HD2	8	0.42
(3,267)	1:24:A:PRO:HG3	1:25:A:SER:H	9	0.42
(3,267)	1:24:A:PRO:HG3	1:25:A:SER:H	10	0.42
(3,220)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD2	7	0.42
(3,215)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD2	2	0.42
(3,201)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HB3	8	0.42
(3,201)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HB3	8	0.42
(3,81)	1:24:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD2	7	0.42
(3,81)	1:24:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD2	9	0.42
(3,81)	1:24:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD2	10	0.42
(2,512)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HA	7	0.42
(2,512)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HA	7	0.42
(2,512)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HA	7	0.42
(2,498)	1:12:A:LEU:HG	1:16:A:GLY:HA2	5	0.42
(2,498)	1:12:A:LEU:HG	1:16:A:GLY:HA2	7	0.42
(2,466)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HD11	3	0.42
(2,466)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HD12	3	0.42
(2,466)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HD13	3	0.42
(2,458)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HD2	8	0.42
(2,458)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HD2	8	0.42
(2,458)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HD2	8	0.42
(2,450)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HE2	2	0.42
(2,450)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HE2	2	0.42
(2,450)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HE2	2	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,450)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HE3	2	0.42
(2,450)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HE3	2	0.42
(2,450)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HE3	2	0.42
(2,449)	1:12:A:LEU:HD11	1:14:A:ASP:HB2	2	0.42
(2,449)	1:12:A:LEU:HD12	1:14:A:ASP:HB2	2	0.42
(2,449)	1:12:A:LEU:HD13	1:14:A:ASP:HB2	2	0.42
(2,430)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG13	1	0.42
(2,430)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG13	1	0.42
(2,430)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG13	1	0.42
(2,394)	1:23:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HD2	6	0.42
(2,380)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:HB2	4	0.42
(2,380)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:HB3	4	0.42
(2,374)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	8	0.42
(2,374)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB3	8	0.42
(2,363)	1:24:A:PRO:HG3	1:25:A:SER:H	9	0.42
(2,363)	1:24:A:PRO:HG3	1:25:A:SER:H	10	0.42
(2,354)	1:9:A:ILE:HB	1:11:A:TRP:H	1	0.42
(2,277)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD2	7	0.42
(2,270)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD2	2	0.42
(2,248)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HB3	8	0.42
(2,248)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HB3	8	0.42
(2,210)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD3	8	0.42
(2,99)	1:24:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD2	7	0.42
(2,99)	1:24:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD2	9	0.42
(2,99)	1:24:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD2	10	0.42
(2,78)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG2	9	0.42
(2,78)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG3	9	0.42
(2,58)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG2	4	0.42
(2,58)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG3	4	0.42
(2,21)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE1	6	0.42
(2,21)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE2	6	0.42
(1,513)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD11	5	0.42
(1,513)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD12	5	0.42
(1,513)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD13	5	0.42
(1,501)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB3	4	0.42
(1,501)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB3	4	0.42
(1,501)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB3	4	0.42
(1,501)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB3	10	0.42
(1,501)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB3	10	0.42
(1,501)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB3	10	0.42
(1,446)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD21	1	0.42
(1,446)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD22	1	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,446)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD23	1	0.42
(1,446)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD21	1	0.42
(1,446)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD22	1	0.42
(1,446)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD23	1	0.42
(1,446)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD21	9	0.42
(1,446)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD22	9	0.42
(1,446)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD23	9	0.42
(1,446)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD21	9	0.42
(1,446)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD22	9	0.42
(1,446)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD23	9	0.42
(1,366)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:H	9	0.42
(1,366)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:H	9	0.42
(1,366)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:H	9	0.42
(1,268)	1:11:A:TRP:HZ2	1:22:A:PRO:HA	1	0.42
(1,268)	1:11:A:TRP:HZ2	1:22:A:PRO:HA	7	0.42
(1,262)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	8	0.42
(1,262)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	8	0.42
(1,262)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	8	0.42
(1,262)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	8	0.42
(1,262)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	8	0.42
(1,262)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	8	0.42
(1,229)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HA	5	0.42
(1,229)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HA	5	0.42
(1,224)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HB2	1	0.42
(1,224)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HB3	1	0.42
(1,224)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HB2	8	0.42
(1,224)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HB3	8	0.42
(1,223)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG3	7	0.42
(1,215)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HG3	2	0.42
(1,201)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HG3	5	0.42
(1,105)	1:23:A:PRO:HD2	1:23:A:PRO:HG2	4	0.42
(1,101)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HG2	9	0.42
(1,101)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HG2	10	0.42
(1,100)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HD2	4	0.42
(1,68)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HB2	10	0.42
(1,22)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HD1	6	0.42
(1,22)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HD2	6	0.42
(1,18)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD11	4	0.42
(1,18)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD12	4	0.42
(1,18)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD13	4	0.42
(4,150)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HA	7	0.41
(4,150)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HA	7	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,150)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HA	7	0.41
(4,145)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD11	9	0.41
(4,145)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD12	9	0.41
(4,145)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD13	9	0.41
(4,145)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD11	10	0.41
(4,145)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD12	10	0.41
(4,145)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD13	10	0.41
(4,108)	1:7:A:LEU:HG	1:8:A:TYR:HA	8	0.41
(4,104)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:HB2	3	0.41
(4,104)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:HB3	3	0.41
(4,103)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	7	0.41
(4,103)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB3	7	0.41
(4,79)	1:11:A:TRP:HE1	1:23:A:PRO:HA	4	0.41
(4,39)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HA	10	0.41
(4,39)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HA	10	0.41
(4,36)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD3	2	0.41
(4,4)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	6	0.41
(4,4)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	6	0.41
(4,4)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	6	0.41
(3,348)	1:2:A:GLU:HB2	1:2:A:GLU:HG2	9	0.41
(3,201)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HB3	10	0.41
(3,201)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HB3	10	0.41
(2,524)	1:2:A:GLU:HB2	1:2:A:GLU:HG2	9	0.41
(2,462)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HA	7	0.41
(2,462)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HA	7	0.41
(2,462)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HA	7	0.41
(2,452)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD11	9	0.41
(2,452)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD12	9	0.41
(2,452)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD13	9	0.41
(2,452)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD11	10	0.41
(2,452)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD12	10	0.41
(2,452)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD13	10	0.41
(2,385)	1:7:A:LEU:HG	1:8:A:TYR:HA	8	0.41
(2,380)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:HB2	3	0.41
(2,380)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:HB3	3	0.41
(2,374)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	7	0.41
(2,374)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB3	7	0.41
(2,333)	1:11:A:TRP:HE1	1:23:A:PRO:HA	4	0.41
(2,248)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HB3	10	0.41
(2,248)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HB3	10	0.41
(2,229)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HA	10	0.41
(2,229)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HA	10	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,210)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD3	2	0.41
(2,15)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	6	0.41
(2,15)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	6	0.41
(2,15)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	6	0.41
(1,501)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB3	6	0.41
(1,501)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB3	6	0.41
(1,501)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB3	6	0.41
(1,440)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HB2	1	0.41
(1,440)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HB2	1	0.41
(1,440)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HB2	1	0.41
(1,440)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HB3	1	0.41
(1,440)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HB3	1	0.41
(1,440)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HB3	1	0.41
(1,382)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	2	0.41
(1,382)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	10	0.41
(1,373)	1:7:A:LEU:HG	1:24:A:PRO:HA	9	0.41
(1,358)	1:10:A:GLN:HB2	1:11:A:TRP:H	5	0.41
(1,342)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:H	9	0.41
(1,342)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:H	9	0.41
(1,342)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:H	9	0.41
(1,298)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD21	3	0.41
(1,298)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD22	3	0.41
(1,298)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD23	3	0.41
(1,298)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD21	9	0.41
(1,298)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD22	9	0.41
(1,298)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD23	9	0.41
(1,259)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:HE1	9	0.41
(1,259)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:HE2	9	0.41
(1,259)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:HE1	9	0.41
(1,259)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:HE2	9	0.41
(1,259)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:HE1	9	0.41
(1,259)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:HE2	9	0.41
(1,252)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	7	0.41
(1,252)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	7	0.41
(1,224)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HB2	9	0.41
(1,224)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HB3	9	0.41
(1,215)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HG3	7	0.41
(1,203)	1:15:A:GLY:H	1:15:A:GLY:HA2	3	0.41
(1,203)	1:15:A:GLY:H	1:15:A:GLY:HA2	8	0.41
(1,198)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HB2	3	0.41
(1,198)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HB3	3	0.41
(1,198)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HB2	8	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,198)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HB3	8	0.41
(1,189)	1:13:A:LYS:HE2	1:13:A:LYS:HG2	4	0.41
(1,189)	1:13:A:LYS:HE3	1:13:A:LYS:HG2	4	0.41
(1,108)	1:22:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	5	0.41
(1,98)	1:24:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HG3	5	0.41
(1,98)	1:24:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HG3	6	0.41
(1,69)	1:19:A:SER:HA	1:19:A:SER:HB2	2	0.41
(1,69)	1:19:A:SER:HA	1:19:A:SER:HB2	3	0.41
(1,61)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG2	10	0.41
(1,61)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG3	10	0.41
(1,39)	1:11:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HB2	9	0.41
(1,34)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HG2	1	0.41
(4,158)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:HZ3	8	0.4
(4,158)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:HZ3	8	0.4
(4,108)	1:7:A:LEU:HG	1:8:A:TYR:HA	7	0.4
(4,90)	1:13:A:LYS:HG3	1:14:A:ASP:H	3	0.4
(4,62)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD11	7	0.4
(4,62)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD12	7	0.4
(4,62)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD13	7	0.4
(4,51)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HD1	6	0.4
(4,51)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HD2	6	0.4
(4,51)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HD1	6	0.4
(4,51)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HD2	6	0.4
(4,51)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HD1	6	0.4
(4,51)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HD2	6	0.4
(4,50)	1:7:A:LEU:HG	1:8:A:TYR:HD1	1	0.4
(4,50)	1:7:A:LEU:HG	1:8:A:TYR:HD2	1	0.4
(4,21)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	1	0.4
(4,21)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	9	0.4
(4,10)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE2	4	0.4
(4,10)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE3	4	0.4
(4,2)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	8	0.4
(4,2)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	8	0.4
(4,2)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	8	0.4
(3,348)	1:2:A:GLU:HB2	1:2:A:GLU:HG2	3	0.4
(3,348)	1:2:A:GLU:HB2	1:2:A:GLU:HG2	5	0.4
(3,348)	1:2:A:GLU:HB2	1:2:A:GLU:HG2	6	0.4
(3,348)	1:2:A:GLU:HB2	1:2:A:GLU:HG2	8	0.4
(3,348)	1:2:A:GLU:HB2	1:2:A:GLU:HG2	10	0.4
(3,344)	1:8:A:TYR:HE1	1:25:A:SER:HA	4	0.4
(3,344)	1:8:A:TYR:HE2	1:25:A:SER:HA	4	0.4
(3,215)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD2	9	0.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,138)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HB2	8	0.4
(3,138)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HB2	9	0.4
(3,138)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HB2	10	0.4
(3,13)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD21	2	0.4
(3,13)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD22	2	0.4
(3,13)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD23	2	0.4
(2,524)	1:2:A:GLU:HB2	1:2:A:GLU:HG2	3	0.4
(2,524)	1:2:A:GLU:HB2	1:2:A:GLU:HG2	5	0.4
(2,524)	1:2:A:GLU:HB2	1:2:A:GLU:HG2	6	0.4
(2,524)	1:2:A:GLU:HB2	1:2:A:GLU:HG2	8	0.4
(2,524)	1:2:A:GLU:HB2	1:2:A:GLU:HG2	10	0.4
(2,519)	1:8:A:TYR:HE1	1:25:A:SER:HA	4	0.4
(2,519)	1:8:A:TYR:HE2	1:25:A:SER:HA	4	0.4
(2,476)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:HZ3	8	0.4
(2,476)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:HZ3	8	0.4
(2,385)	1:7:A:LEU:HG	1:8:A:TYR:HA	7	0.4
(2,351)	1:13:A:LYS:HG3	1:14:A:ASP:H	3	0.4
(2,293)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD11	7	0.4
(2,293)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD12	7	0.4
(2,293)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD13	7	0.4
(2,270)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD2	9	0.4
(2,260)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HD1	6	0.4
(2,260)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HD2	6	0.4
(2,260)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HD1	6	0.4
(2,260)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HD2	6	0.4
(2,260)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HD1	6	0.4
(2,260)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HD2	6	0.4
(2,254)	1:7:A:LEU:HG	1:8:A:TYR:HD1	1	0.4
(2,254)	1:7:A:LEU:HG	1:8:A:TYR:HD2	1	0.4
(2,170)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HB2	8	0.4
(2,170)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HB2	9	0.4
(2,170)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HB2	10	0.4
(2,111)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	1	0.4
(2,111)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	9	0.4
(2,31)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE2	4	0.4
(2,31)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE3	4	0.4
(2,19)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD21	2	0.4
(2,19)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD22	2	0.4
(2,19)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD23	2	0.4
(2,13)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	8	0.4
(2,13)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	8	0.4
(2,13)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	8	0.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,492)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG3	8	0.4
(1,487)	1:8:A:TYR:HB2	1:24:A:PRO:HA	7	0.4
(1,397)	1:14:A:ASP:HB2	1:19:A:SER:HB3	1	0.4
(1,369)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HB2	3	0.4
(1,366)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:H	10	0.4
(1,366)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:H	10	0.4
(1,366)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:H	10	0.4
(1,342)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:H	2	0.4
(1,342)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:H	2	0.4
(1,342)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:H	2	0.4
(1,301)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD11	9	0.4
(1,301)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD12	9	0.4
(1,301)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD13	9	0.4
(1,224)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HB2	4	0.4
(1,224)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HB3	4	0.4
(1,224)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HB2	10	0.4
(1,224)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HB3	10	0.4
(1,203)	1:15:A:GLY:H	1:15:A:GLY:HA2	9	0.4
(1,173)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD21	6	0.4
(1,173)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD22	6	0.4
(1,173)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD23	6	0.4
(1,155)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HA	6	0.4
(1,112)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HA	6	0.4
(1,101)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HG2	1	0.4
(1,101)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HG2	2	0.4
(1,100)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HD2	3	0.4
(1,61)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG2	9	0.4
(1,61)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG3	9	0.4
(1,39)	1:11:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HB2	10	0.4
(1,6)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HB	1	0.4
(1,5)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HA	4	0.4
(4,161)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HA	2	0.39
(4,156)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	6	0.39
(4,156)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	6	0.39
(4,156)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	6	0.39
(4,131)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG11	8	0.39
(4,131)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG12	8	0.39
(4,131)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG13	8	0.39
(4,131)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG11	8	0.39
(4,131)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG12	8	0.39
(4,131)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG13	8	0.39
(4,131)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG11	8	0.39

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,131)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG12	8	0.39
(4,131)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG13	8	0.39
(4,115)	1:19:A:SER:HB3	1:21:A:ARG:HG2	2	0.39
(4,110)	1:23:A:PRO:HG2	1:25:A:SER:HB2	6	0.39
(4,110)	1:23:A:PRO:HG2	1:25:A:SER:HB3	6	0.39
(4,110)	1:23:A:PRO:HG2	1:25:A:SER:HB2	8	0.39
(4,110)	1:23:A:PRO:HG2	1:25:A:SER:HB3	8	0.39
(4,107)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HB	8	0.39
(4,104)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:HB2	2	0.39
(4,104)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:HB3	2	0.39
(4,67)	1:11:A:TRP:HZ3	1:23:A:PRO:HB2	4	0.39
(4,46)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HD1	9	0.39
(4,46)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HD2	9	0.39
(4,46)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HD1	9	0.39
(4,46)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HD2	9	0.39
(4,4)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	1	0.39
(4,4)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	1	0.39
(4,4)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	1	0.39
(4,2)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	10	0.39
(4,2)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	10	0.39
(4,2)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	10	0.39
(3,294)	1:10:A:GLN:HG2	1:13:A:LYS:HD2	6	0.39
(3,294)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:HD2	6	0.39
(3,294)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:HD3	6	0.39
(3,225)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG2	4	0.39
(3,206)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB3	4	0.39
(3,206)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB3	4	0.39
(3,138)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HB2	4	0.39
(3,45)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HD2	10	0.39
(2,485)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HA	2	0.39
(2,470)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	6	0.39
(2,470)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	6	0.39
(2,470)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	6	0.39
(2,427)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG11	8	0.39
(2,427)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG12	8	0.39
(2,427)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG13	8	0.39
(2,427)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG11	8	0.39
(2,427)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG12	8	0.39
(2,427)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG13	8	0.39
(2,427)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG11	8	0.39
(2,427)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG12	8	0.39
(2,427)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG13	8	0.39

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,422)	1:10:A:GLN:HG2	1:13:A:LYS:HD2	6	0.39
(2,422)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:HD2	6	0.39
(2,422)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:HD3	6	0.39
(2,403)	1:19:A:SER:HB3	1:21:A:ARG:HG2	2	0.39
(2,392)	1:23:A:PRO:HG2	1:25:A:SER:HB2	6	0.39
(2,392)	1:23:A:PRO:HG2	1:25:A:SER:HB3	6	0.39
(2,392)	1:23:A:PRO:HG2	1:25:A:SER:HB2	8	0.39
(2,392)	1:23:A:PRO:HG2	1:25:A:SER:HB3	8	0.39
(2,384)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HB	8	0.39
(2,380)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:HB2	2	0.39
(2,380)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:HB3	2	0.39
(2,303)	1:11:A:TRP:HZ3	1:23:A:PRO:HB2	4	0.39
(2,283)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG2	4	0.39
(2,256)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB3	4	0.39
(2,256)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB3	4	0.39
(2,242)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HD1	9	0.39
(2,242)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HD2	9	0.39
(2,242)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HD1	9	0.39
(2,242)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HD2	9	0.39
(2,170)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HB2	4	0.39
(2,56)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HD2	10	0.39
(2,15)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	1	0.39
(2,15)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	1	0.39
(2,15)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	1	0.39
(2,13)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	10	0.39
(2,13)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	10	0.39
(2,13)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	10	0.39
(1,485)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HA	10	0.39
(1,386)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HB3	9	0.39
(1,380)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:HB2	9	0.39
(1,380)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:HB3	9	0.39
(1,374)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	6	0.39
(1,374)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB3	6	0.39
(1,373)	1:7:A:LEU:HG	1:24:A:PRO:HA	10	0.39
(1,339)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:H	3	0.39
(1,299)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD21	1	0.39
(1,299)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD22	1	0.39
(1,299)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD23	1	0.39
(1,273)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD3	3	0.39
(1,237)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HB2	3	0.39
(1,237)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HB2	3	0.39
(1,229)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HA	1	0.39

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,229)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HA	1	0.39
(1,211)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD2	6	0.39
(1,211)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HD2	6	0.39
(1,203)	1:15:A:GLY:H	1:15:A:GLY:HA2	4	0.39
(1,198)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HB2	2	0.39
(1,198)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HB3	2	0.39
(1,173)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD21	5	0.39
(1,173)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD22	5	0.39
(1,173)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD23	5	0.39
(1,140)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:HB3	10	0.39
(1,108)	1:22:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	1	0.39
(1,101)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HG2	4	0.39
(1,69)	1:19:A:SER:HA	1:19:A:SER:HB2	5	0.39
(1,40)	1:11:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HB3	6	0.39
(1,20)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HD1	6	0.39
(1,20)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HD2	6	0.39
(1,8)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG21	6	0.39
(1,8)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG22	6	0.39
(1,8)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG23	6	0.39
(1,6)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HB	7	0.39
(4,144)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HE2	10	0.38
(4,144)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HE2	10	0.38
(4,144)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HE2	10	0.38
(4,144)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HE3	10	0.38
(4,144)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HE3	10	0.38
(4,144)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HE3	10	0.38
(4,115)	1:19:A:SER:HB3	1:21:A:ARG:HG2	4	0.38
(4,108)	1:7:A:LEU:HG	1:8:A:TYR:HA	2	0.38
(4,104)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:HB2	1	0.38
(4,104)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:HB3	1	0.38
(4,103)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	1	0.38
(4,103)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB3	1	0.38
(4,102)	1:7:A:LEU:HG	1:24:A:PRO:HA	6	0.38
(4,91)	1:21:A:ARG:H	1:22:A:PRO:HB3	3	0.38
(4,62)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD11	3	0.38
(4,62)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD12	3	0.38
(4,62)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD13	3	0.38
(4,21)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	10	0.38
(4,4)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	3	0.38
(4,4)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	3	0.38
(4,4)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	3	0.38
(4,2)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	2	0.38

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,2)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	2	0.38
(4,2)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	2	0.38
(3,348)	1:2:A:GLU:HB2	1:2:A:GLU:HG2	2	0.38
(3,348)	1:2:A:GLU:HB2	1:2:A:GLU:HG2	4	0.38
(3,348)	1:2:A:GLU:HB2	1:2:A:GLU:HG2	7	0.38
(3,344)	1:8:A:TYR:HE1	1:25:A:SER:HA	8	0.38
(3,344)	1:8:A:TYR:HE2	1:25:A:SER:HA	8	0.38
(3,211)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD11	2	0.38
(3,211)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD12	2	0.38
(3,211)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD13	2	0.38
(3,211)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD11	2	0.38
(3,211)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD12	2	0.38
(3,211)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD13	2	0.38
(3,138)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HB2	2	0.38
(3,138)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HB2	3	0.38
(3,138)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HB2	7	0.38
(2,524)	1:2:A:GLU:HB2	1:2:A:GLU:HG2	2	0.38
(2,524)	1:2:A:GLU:HB2	1:2:A:GLU:HG2	4	0.38
(2,524)	1:2:A:GLU:HB2	1:2:A:GLU:HG2	7	0.38
(2,519)	1:8:A:TYR:HE1	1:25:A:SER:HA	8	0.38
(2,519)	1:8:A:TYR:HE2	1:25:A:SER:HA	8	0.38
(2,450)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HE2	10	0.38
(2,450)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HE2	10	0.38
(2,450)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HE2	10	0.38
(2,450)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HE3	10	0.38
(2,450)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HE3	10	0.38
(2,450)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HE3	10	0.38
(2,403)	1:19:A:SER:HB3	1:21:A:ARG:HG2	4	0.38
(2,385)	1:7:A:LEU:HG	1:8:A:TYR:HA	2	0.38
(2,380)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:HB2	1	0.38
(2,380)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:HB3	1	0.38
(2,374)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	1	0.38
(2,374)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB3	1	0.38
(2,373)	1:7:A:LEU:HG	1:24:A:PRO:HA	6	0.38
(2,352)	1:21:A:ARG:H	1:22:A:PRO:HB3	3	0.38
(2,293)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD11	3	0.38
(2,293)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD12	3	0.38
(2,293)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD13	3	0.38
(2,265)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD11	2	0.38
(2,265)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD12	2	0.38
(2,265)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD13	2	0.38
(2,265)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD11	2	0.38

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,265)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD12	2	0.38
(2,265)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD13	2	0.38
(2,170)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HB2	2	0.38
(2,170)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HB2	3	0.38
(2,170)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HB2	7	0.38
(2,111)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	10	0.38
(2,15)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	3	0.38
(2,15)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	3	0.38
(2,15)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	3	0.38
(2,13)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	2	0.38
(2,13)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	2	0.38
(2,13)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	2	0.38
(1,521)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HB3	10	0.38
(1,497)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HG3	8	0.38
(1,493)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HB3	6	0.38
(1,493)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HB3	7	0.38
(1,493)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HB3	8	0.38
(1,493)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HB3	9	0.38
(1,493)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HB3	10	0.38
(1,473)	1:13:A:LYS:HB2	1:14:A:ASP:H	4	0.38
(1,473)	1:13:A:LYS:HB3	1:14:A:ASP:H	4	0.38
(1,444)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HB2	6	0.38
(1,415)	1:7:A:LEU:HB2	1:8:A:TYR:HB3	5	0.38
(1,400)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD2	7	0.38
(1,399)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	3	0.38
(1,397)	1:14:A:ASP:HB2	1:19:A:SER:HB3	7	0.38
(1,382)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	4	0.38
(1,348)	1:8:A:TYR:H	1:9:A:ILE:HD11	4	0.38
(1,348)	1:8:A:TYR:H	1:9:A:ILE:HD12	4	0.38
(1,348)	1:8:A:TYR:H	1:9:A:ILE:HD13	4	0.38
(1,298)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD21	8	0.38
(1,298)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD22	8	0.38
(1,298)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD23	8	0.38
(1,273)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD3	7	0.38
(1,229)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HA	6	0.38
(1,229)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HA	6	0.38
(1,215)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HG3	10	0.38
(1,211)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD2	10	0.38
(1,211)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HD2	10	0.38
(1,203)	1:15:A:GLY:H	1:15:A:GLY:HA2	1	0.38
(1,173)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD21	1	0.38
(1,173)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD22	1	0.38

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,173)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD23	1	0.38
(1,160)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD11	5	0.38
(1,160)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD12	5	0.38
(1,160)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD13	5	0.38
(1,140)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:HB3	2	0.38
(1,101)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HG2	3	0.38
(1,101)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HG2	6	0.38
(1,100)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HD2	2	0.38
(1,68)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HB2	4	0.38
(4,150)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HA	1	0.37
(4,150)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HA	1	0.37
(4,150)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HA	1	0.37
(4,144)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HE2	9	0.37
(4,144)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HE2	9	0.37
(4,144)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HE2	9	0.37
(4,144)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HE3	9	0.37
(4,144)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HE3	9	0.37
(4,144)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HE3	9	0.37
(4,106)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG2	8	0.37
(4,106)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG3	8	0.37
(4,102)	1:7:A:LEU:HG	1:24:A:PRO:HA	1	0.37
(4,90)	1:13:A:LYS:HG3	1:14:A:ASP:H	8	0.37
(4,80)	1:11:A:TRP:HE1	1:24:A:PRO:HD2	5	0.37
(4,80)	1:11:A:TRP:HE1	1:24:A:PRO:HD2	6	0.37
(4,21)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	4	0.37
(4,14)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG2	1	0.37
(4,14)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG3	1	0.37
(4,14)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG2	2	0.37
(4,14)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG3	2	0.37
(4,10)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE2	5	0.37
(4,10)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE3	5	0.37
(4,4)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	9	0.37
(4,4)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	9	0.37
(4,4)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	9	0.37
(4,4)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	10	0.37
(4,4)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	10	0.37
(4,4)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	10	0.37
(4,2)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	3	0.37
(4,2)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	3	0.37
(4,2)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	3	0.37
(4,2)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	9	0.37
(4,2)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	9	0.37

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,2)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	9	0.37
(3,348)	1:2:A:GLU:HB2	1:2:A:GLU:HG2	1	0.37
(3,326)	1:21:A:ARG:HG2	1:22:A:PRO:HD3	4	0.37
(3,220)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD2	5	0.37
(3,138)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HB2	1	0.37
(3,138)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HB2	5	0.37
(3,138)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HB2	6	0.37
(3,45)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HD2	8	0.37
(2,524)	1:2:A:GLU:HB2	1:2:A:GLU:HG2	1	0.37
(2,489)	1:21:A:ARG:HG2	1:22:A:PRO:HD3	4	0.37
(2,462)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HA	1	0.37
(2,462)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HA	1	0.37
(2,462)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HA	1	0.37
(2,450)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HE2	9	0.37
(2,450)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HE2	9	0.37
(2,450)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HE2	9	0.37
(2,450)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HE3	9	0.37
(2,450)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HE3	9	0.37
(2,450)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HE3	9	0.37
(2,383)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG2	8	0.37
(2,383)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG3	8	0.37
(2,373)	1:7:A:LEU:HG	1:24:A:PRO:HA	1	0.37
(2,351)	1:13:A:LYS:HG3	1:14:A:ASP:H	8	0.37
(2,334)	1:11:A:TRP:HE1	1:24:A:PRO:HD2	5	0.37
(2,334)	1:11:A:TRP:HE1	1:24:A:PRO:HD2	6	0.37
(2,277)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD2	5	0.37
(2,170)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HB2	1	0.37
(2,170)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HB2	5	0.37
(2,170)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HB2	6	0.37
(2,111)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	4	0.37
(2,78)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG2	1	0.37
(2,78)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG3	1	0.37
(2,78)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG2	2	0.37
(2,78)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG3	2	0.37
(2,56)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HD2	8	0.37
(2,31)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE2	5	0.37
(2,31)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE3	5	0.37
(2,15)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	9	0.37
(2,15)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	9	0.37
(2,15)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	9	0.37
(2,15)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	10	0.37
(2,15)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	10	0.37

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,15)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	10	0.37
(2,13)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	3	0.37
(2,13)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	3	0.37
(2,13)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	3	0.37
(2,13)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	9	0.37
(2,13)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	9	0.37
(2,13)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	9	0.37
(1,493)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HB3	2	0.37
(1,493)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HB3	3	0.37
(1,493)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HB3	5	0.37
(1,446)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD21	3	0.37
(1,446)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD22	3	0.37
(1,446)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD23	3	0.37
(1,446)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD21	3	0.37
(1,446)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD22	3	0.37
(1,446)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD23	3	0.37
(1,446)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD21	6	0.37
(1,446)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD22	6	0.37
(1,446)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD23	6	0.37
(1,446)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD21	6	0.37
(1,446)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD22	6	0.37
(1,446)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD23	6	0.37
(1,435)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:HG	7	0.37
(1,435)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:HG	7	0.37
(1,435)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:HG	7	0.37
(1,428)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	10	0.37
(1,428)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	10	0.37
(1,428)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	10	0.37
(1,428)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	10	0.37
(1,428)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	10	0.37
(1,428)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	10	0.37
(1,428)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	10	0.37
(1,428)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	10	0.37
(1,428)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	10	0.37
(1,427)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG11	7	0.37
(1,427)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG12	7	0.37
(1,427)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG13	7	0.37
(1,427)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG11	7	0.37
(1,427)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG12	7	0.37
(1,427)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG13	7	0.37
(1,427)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG11	7	0.37
(1,427)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG12	7	0.37

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,427)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG13	7	0.37
(1,373)	1:7:A:LEU:HG	1:24:A:PRO:HA	3	0.37
(1,366)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:H	1	0.37
(1,366)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:H	1	0.37
(1,366)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:H	1	0.37
(1,346)	1:12:A:LEU:HD11	1:14:A:ASP:H	5	0.37
(1,346)	1:12:A:LEU:HD12	1:14:A:ASP:H	5	0.37
(1,346)	1:12:A:LEU:HD13	1:14:A:ASP:H	5	0.37
(1,331)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB2	3	0.37
(1,313)	1:11:A:TRP:HE3	1:24:A:PRO:HA	2	0.37
(1,292)	1:11:A:TRP:HZ3	1:23:A:PRO:HG2	5	0.37
(1,268)	1:11:A:TRP:HZ2	1:22:A:PRO:HA	4	0.37
(1,254)	1:7:A:LEU:HG	1:8:A:TYR:HD1	4	0.37
(1,254)	1:7:A:LEU:HG	1:8:A:TYR:HD2	4	0.37
(1,254)	1:7:A:LEU:HG	1:8:A:TYR:HD1	5	0.37
(1,254)	1:7:A:LEU:HG	1:8:A:TYR:HD2	5	0.37
(1,202)	1:15:A:GLY:H	1:15:A:GLY:HA3	2	0.37
(1,202)	1:15:A:GLY:H	1:15:A:GLY:HA3	7	0.37
(1,173)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD21	3	0.37
(1,173)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD22	3	0.37
(1,173)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD23	3	0.37
(1,137)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HB3	2	0.37
(1,101)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HG2	8	0.37
(1,98)	1:24:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HG3	1	0.37
(1,45)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HD2	7	0.37
(1,45)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HD3	7	0.37
(1,40)	1:11:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HB3	5	0.37
(1,40)	1:11:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HB3	7	0.37
(1,17)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG21	1	0.37
(1,17)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG22	1	0.37
(1,17)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG23	1	0.37
(1,17)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG21	7	0.37
(1,17)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG22	7	0.37
(1,17)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG23	7	0.37
(1,6)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HB	9	0.37
(4,166)	1:12:A:LEU:HG	1:16:A:GLY:HA2	6	0.36
(4,158)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:HZ3	7	0.36
(4,158)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:HZ3	7	0.36
(4,144)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HE2	7	0.36
(4,144)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HE2	7	0.36
(4,144)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HE2	7	0.36
(4,144)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HE3	7	0.36

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,144)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HE3	7	0.36
(4,144)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HE3	7	0.36
(4,115)	1:19:A:SER:HB3	1:21:A:ARG:HG2	3	0.36
(4,108)	1:7:A:LEU:HG	1:8:A:TYR:HA	3	0.36
(4,91)	1:21:A:ARG:H	1:22:A:PRO:HB3	1	0.36
(4,90)	1:13:A:LYS:HG3	1:14:A:ASP:H	2	0.36
(4,61)	1:11:A:TRP:HZ3	1:23:A:PRO:HG3	9	0.36
(4,46)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HD1	2	0.36
(4,46)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HD2	2	0.36
(4,46)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HD1	2	0.36
(4,46)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HD2	2	0.36
(4,42)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HA	3	0.36
(4,42)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HA	3	0.36
(4,42)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HA	10	0.36
(4,42)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HA	10	0.36
(4,41)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HE1	7	0.36
(4,41)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HE2	7	0.36
(4,14)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG2	3	0.36
(4,14)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG3	3	0.36
(4,4)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	4	0.36
(4,4)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	4	0.36
(4,4)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	4	0.36
(3,265)	1:21:A:ARG:H	1:22:A:PRO:HD2	4	0.36
(3,261)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:H	8	0.36
(3,261)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:H	8	0.36
(3,261)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:H	8	0.36
(3,218)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HD2	4	0.36
(3,215)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD2	5	0.36
(3,13)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD21	8	0.36
(3,13)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD22	8	0.36
(3,13)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD23	8	0.36
(2,498)	1:12:A:LEU:HG	1:16:A:GLY:HA2	6	0.36
(2,476)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:HZ3	7	0.36
(2,476)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:HZ3	7	0.36
(2,450)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HE2	7	0.36
(2,450)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HE2	7	0.36
(2,450)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HE2	7	0.36
(2,450)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HE3	7	0.36
(2,450)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HE3	7	0.36
(2,450)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HE3	7	0.36
(2,403)	1:19:A:SER:HB3	1:21:A:ARG:HG2	3	0.36
(2,385)	1:7:A:LEU:HG	1:8:A:TYR:HA	3	0.36

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,360)	1:21:A:ARG:H	1:22:A:PRO:HD2	4	0.36
(2,352)	1:21:A:ARG:H	1:22:A:PRO:HB3	1	0.36
(2,351)	1:13:A:LYS:HG3	1:14:A:ASP:H	2	0.36
(2,350)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:H	8	0.36
(2,350)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:H	8	0.36
(2,350)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:H	8	0.36
(2,291)	1:11:A:TRP:HZ3	1:23:A:PRO:HG3	9	0.36
(2,274)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HD2	4	0.36
(2,270)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD2	5	0.36
(2,242)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HD1	2	0.36
(2,242)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HD2	2	0.36
(2,242)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HD1	2	0.36
(2,242)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HD2	2	0.36
(2,235)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HA	3	0.36
(2,235)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HA	3	0.36
(2,235)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HA	10	0.36
(2,235)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HA	10	0.36
(2,233)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HE1	7	0.36
(2,233)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HE2	7	0.36
(2,78)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG2	3	0.36
(2,78)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG3	3	0.36
(2,19)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD21	8	0.36
(2,19)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD22	8	0.36
(2,19)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD23	8	0.36
(2,15)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	4	0.36
(2,15)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	4	0.36
(2,15)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	4	0.36
(1,521)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HB3	8	0.36
(1,513)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD11	8	0.36
(1,513)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD12	8	0.36
(1,513)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD13	8	0.36
(1,502)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB2	3	0.36
(1,502)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB2	3	0.36
(1,502)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB2	3	0.36
(1,493)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HB3	1	0.36
(1,493)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HB3	4	0.36
(1,413)	1:1:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD2	8	0.36
(1,413)	1:1:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD3	8	0.36
(1,413)	1:1:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD2	8	0.36
(1,413)	1:1:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD3	8	0.36
(1,273)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD3	4	0.36
(1,246)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HB2	7	0.36

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,246)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HB2	7	0.36
(1,242)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HD1	7	0.36
(1,242)	1:3:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HD2	7	0.36
(1,242)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HD1	7	0.36
(1,242)	1:3:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HD2	7	0.36
(1,225)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HB3	4	0.36
(1,216)	1:21:A:ARG:HD3	1:21:A:ARG:HG3	5	0.36
(1,203)	1:15:A:GLY:H	1:15:A:GLY:HA2	6	0.36
(1,198)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HB2	4	0.36
(1,198)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HB3	4	0.36
(1,173)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD21	7	0.36
(1,173)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD22	7	0.36
(1,173)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD23	7	0.36
(1,137)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HB3	3	0.36
(1,69)	1:19:A:SER:HA	1:19:A:SER:HB2	8	0.36
(1,61)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG2	3	0.36
(1,61)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG3	3	0.36
(1,44)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HB3	3	0.36
(1,44)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HB3	7	0.36
(1,8)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG21	4	0.36
(1,8)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG22	4	0.36
(1,8)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG23	4	0.36
(1,8)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG21	7	0.36
(1,8)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG22	7	0.36
(1,8)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG23	7	0.36
(1,6)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HB	2	0.36
(4,171)	1:12:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HD2	7	0.35
(4,171)	1:12:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HD2	7	0.35
(4,171)	1:12:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HD2	7	0.35
(4,153)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HD11	7	0.35
(4,153)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HD12	7	0.35
(4,153)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HD13	7	0.35
(4,133)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG13	7	0.35
(4,133)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG13	7	0.35
(4,133)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG13	7	0.35
(4,91)	1:21:A:ARG:H	1:22:A:PRO:HB3	7	0.35
(4,90)	1:13:A:LYS:HG3	1:14:A:ASP:H	4	0.35
(4,61)	1:11:A:TRP:HZ3	1:23:A:PRO:HG3	10	0.35
(3,215)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD2	1	0.35
(3,203)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG3	1	0.35
(3,203)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG3	1	0.35
(3,196)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HD2	3	0.35

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,196)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HD2	3	0.35
(3,195)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HD2	5	0.35
(3,195)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HD2	5	0.35
(3,97)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:H	7	0.35
(2,508)	1:12:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HD2	7	0.35
(2,508)	1:12:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HD2	7	0.35
(2,508)	1:12:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HD2	7	0.35
(2,466)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HD11	7	0.35
(2,466)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HD12	7	0.35
(2,466)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HD13	7	0.35
(2,430)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG13	7	0.35
(2,430)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG13	7	0.35
(2,430)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG13	7	0.35
(2,352)	1:21:A:ARG:H	1:22:A:PRO:HB3	7	0.35
(2,351)	1:13:A:LYS:HG3	1:14:A:ASP:H	4	0.35
(2,291)	1:11:A:TRP:HZ3	1:23:A:PRO:HG3	10	0.35
(2,270)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD2	1	0.35
(2,251)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG3	1	0.35
(2,251)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG3	1	0.35
(2,240)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HD2	3	0.35
(2,240)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HD2	3	0.35
(2,239)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HD2	5	0.35
(2,239)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HD2	5	0.35
(2,118)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:H	7	0.35
(1,531)	1:7:A:LEU:HB2	1:24:A:PRO:HA	1	0.35
(1,497)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HG3	4	0.35
(1,473)	1:13:A:LYS:HB2	1:14:A:ASP:H	6	0.35
(1,473)	1:13:A:LYS:HB3	1:14:A:ASP:H	6	0.35
(1,446)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD21	5	0.35
(1,446)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD22	5	0.35
(1,446)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD23	5	0.35
(1,446)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD21	5	0.35
(1,446)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD22	5	0.35
(1,446)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD23	5	0.35
(1,435)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:HG	9	0.35
(1,435)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:HG	9	0.35
(1,435)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:HG	9	0.35
(1,392)	1:23:A:PRO:HG2	1:25:A:SER:HB2	9	0.35
(1,392)	1:23:A:PRO:HG2	1:25:A:SER:HB3	9	0.35
(1,345)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD11	5	0.35
(1,345)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD12	5	0.35
(1,345)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD13	5	0.35

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,303)	1:11:A:TRP:HZ3	1:23:A:PRO:HB2	8	0.35
(1,225)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HB3	2	0.35
(1,225)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HB3	5	0.35
(1,225)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HB3	6	0.35
(1,225)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HB3	9	0.35
(1,225)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HB3	10	0.35
(1,223)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG3	2	0.35
(1,215)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HG3	6	0.35
(1,182)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HB2	8	0.35
(1,137)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HB3	5	0.35
(1,137)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HB3	8	0.35
(1,137)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HB3	9	0.35
(1,137)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HB3	10	0.35
(1,108)	1:22:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	3	0.35
(1,98)	1:24:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HG3	2	0.35
(1,61)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG2	1	0.35
(1,61)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG3	1	0.35
(1,34)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HG2	2	0.35
(1,17)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG21	2	0.35
(1,17)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG22	2	0.35
(1,17)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG23	2	0.35
(1,17)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG21	3	0.35
(1,17)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG22	3	0.35
(1,17)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG23	3	0.35
(1,12)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG11	7	0.35
(1,12)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG12	7	0.35
(1,12)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG13	7	0.35
(1,6)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HB	10	0.35
(4,158)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:HZ3	3	0.34
(4,158)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:HZ3	3	0.34
(4,119)	1:23:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	8	0.34
(4,79)	1:11:A:TRP:HE1	1:23:A:PRO:HA	5	0.34
(4,78)	1:11:A:TRP:HE1	1:22:A:PRO:HG2	1	0.34
(4,78)	1:11:A:TRP:HE1	1:22:A:PRO:HG3	1	0.34
(4,36)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD3	4	0.34
(4,25)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD11	1	0.34
(4,25)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD12	1	0.34
(4,25)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD13	1	0.34
(4,25)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD11	3	0.34
(4,25)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD12	3	0.34
(4,25)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD13	3	0.34
(4,25)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD11	4	0.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,25)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD12	4	0.34
(4,25)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD13	4	0.34
(4,25)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD11	6	0.34
(4,25)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD12	6	0.34
(4,25)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD13	6	0.34
(4,25)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD11	9	0.34
(4,25)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD12	9	0.34
(4,25)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD13	9	0.34
(4,21)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	8	0.34
(4,17)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD3	6	0.34
(4,12)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG2	8	0.34
(4,12)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG3	8	0.34
(4,12)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG2	9	0.34
(4,12)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG3	9	0.34
(4,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	4	0.34
(4,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	4	0.34
(4,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	4	0.34
(3,203)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG3	7	0.34
(3,203)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG3	7	0.34
(3,144)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD11	5	0.34
(3,144)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD12	5	0.34
(3,144)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD13	5	0.34
(3,13)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD21	4	0.34
(3,13)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD22	4	0.34
(3,13)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD23	4	0.34
(3,13)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD21	9	0.34
(3,13)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD22	9	0.34
(3,13)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD23	9	0.34
(2,476)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:HZ3	3	0.34
(2,476)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:HZ3	3	0.34
(2,409)	1:23:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	8	0.34
(2,333)	1:11:A:TRP:HE1	1:23:A:PRO:HA	5	0.34
(2,332)	1:11:A:TRP:HE1	1:22:A:PRO:HG2	1	0.34
(2,332)	1:11:A:TRP:HE1	1:22:A:PRO:HG3	1	0.34
(2,251)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG3	7	0.34
(2,251)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG3	7	0.34
(2,210)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD3	4	0.34
(2,177)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD11	5	0.34
(2,177)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD12	5	0.34
(2,177)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD13	5	0.34
(2,135)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD11	1	0.34
(2,135)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD12	1	0.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,135)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD13	1	0.34
(2,135)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD11	3	0.34
(2,135)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD12	3	0.34
(2,135)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD13	3	0.34
(2,135)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD11	4	0.34
(2,135)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD12	4	0.34
(2,135)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD13	4	0.34
(2,135)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD11	6	0.34
(2,135)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD12	6	0.34
(2,135)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD13	6	0.34
(2,135)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD11	9	0.34
(2,135)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD12	9	0.34
(2,135)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD13	9	0.34
(2,111)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	8	0.34
(2,85)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD3	6	0.34
(2,58)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG2	8	0.34
(2,58)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG3	8	0.34
(2,58)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG2	9	0.34
(2,58)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG3	9	0.34
(2,19)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD21	4	0.34
(2,19)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD22	4	0.34
(2,19)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD23	4	0.34
(2,19)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD21	9	0.34
(2,19)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD22	9	0.34
(2,19)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD23	9	0.34
(2,7)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	4	0.34
(2,7)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	4	0.34
(2,7)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	4	0.34
(1,505)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HD3	4	0.34
(1,505)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HD3	4	0.34
(1,505)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HD3	4	0.34
(1,391)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HD2	7	0.34
(1,343)	1:12:A:LEU:HD21	1:13:A:LYS:H	9	0.34
(1,343)	1:12:A:LEU:HD22	1:13:A:LYS:H	9	0.34
(1,343)	1:12:A:LEU:HD23	1:13:A:LYS:H	9	0.34
(1,275)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HD3	4	0.34
(1,267)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD21	9	0.34
(1,267)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD22	9	0.34
(1,267)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD23	9	0.34
(1,267)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD21	9	0.34
(1,267)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD22	9	0.34
(1,267)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD23	9	0.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,255)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HG	8	0.34
(1,255)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HG	8	0.34
(1,225)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HB3	1	0.34
(1,225)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HB3	3	0.34
(1,225)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HB3	7	0.34
(1,225)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HB3	8	0.34
(1,215)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HG3	3	0.34
(1,203)	1:15:A:GLY:H	1:15:A:GLY:HA2	10	0.34
(1,173)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD21	2	0.34
(1,173)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD22	2	0.34
(1,173)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD23	2	0.34
(1,101)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HG2	7	0.34
(1,70)	1:19:A:SER:HA	1:19:A:SER:HB3	9	0.34
(1,69)	1:19:A:SER:HA	1:19:A:SER:HB2	4	0.34
(1,69)	1:19:A:SER:HA	1:19:A:SER:HB2	7	0.34
(1,61)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG2	2	0.34
(1,61)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG3	2	0.34
(1,61)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG2	6	0.34
(1,61)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG3	6	0.34
(1,45)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HD2	5	0.34
(1,45)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HD3	5	0.34
(1,17)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG21	4	0.34
(1,17)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG22	4	0.34
(1,17)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG23	4	0.34
(1,17)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG21	5	0.34
(1,17)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG22	5	0.34
(1,17)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG23	5	0.34
(1,17)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG21	8	0.34
(1,17)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG22	8	0.34
(1,17)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG23	8	0.34
(1,12)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG11	1	0.34
(1,12)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG12	1	0.34
(1,12)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG13	1	0.34
(1,6)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HB	3	0.34
(4,146)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB3	9	0.33
(4,146)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB3	9	0.33
(4,146)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB3	9	0.33
(4,140)	1:3:A:GLU:HB2	1:5:A:VAL:HG11	4	0.33
(4,140)	1:3:A:GLU:HB2	1:5:A:VAL:HG12	4	0.33
(4,140)	1:3:A:GLU:HB2	1:5:A:VAL:HG13	4	0.33
(4,140)	1:3:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG11	4	0.33
(4,140)	1:3:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG12	4	0.33

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,140)	1:3:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG13	4	0.33
(4,140)	1:3:A:GLU:HB2	1:5:A:VAL:HG11	8	0.33
(4,140)	1:3:A:GLU:HB2	1:5:A:VAL:HG12	8	0.33
(4,140)	1:3:A:GLU:HB2	1:5:A:VAL:HG13	8	0.33
(4,140)	1:3:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG11	8	0.33
(4,140)	1:3:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG12	8	0.33
(4,140)	1:3:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG13	8	0.33
(4,119)	1:23:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	1	0.33
(4,108)	1:7:A:LEU:HG	1:8:A:TYR:HA	4	0.33
(4,108)	1:7:A:LEU:HG	1:8:A:TYR:HA	10	0.33
(4,25)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD11	2	0.33
(4,25)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD12	2	0.33
(4,25)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD13	2	0.33
(4,21)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	7	0.33
(4,4)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	7	0.33
(4,4)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	7	0.33
(4,4)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	7	0.33
(4,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	3	0.33
(4,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	3	0.33
(4,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	3	0.33
(4,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	5	0.33
(4,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	5	0.33
(4,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	5	0.33
(3,344)	1:8:A:TYR:HE1	1:25:A:SER:HA	10	0.33
(3,344)	1:8:A:TYR:HE2	1:25:A:SER:HA	10	0.33
(3,284)	1:19:A:SER:HB3	1:21:A:ARG:HD2	10	0.33
(3,283)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HD3	6	0.33
(2,519)	1:8:A:TYR:HE1	1:25:A:SER:HA	10	0.33
(2,519)	1:8:A:TYR:HE2	1:25:A:SER:HA	10	0.33
(2,454)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB3	9	0.33
(2,454)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB3	9	0.33
(2,454)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB3	9	0.33
(2,442)	1:3:A:GLU:HB2	1:5:A:VAL:HG11	4	0.33
(2,442)	1:3:A:GLU:HB2	1:5:A:VAL:HG12	4	0.33
(2,442)	1:3:A:GLU:HB2	1:5:A:VAL:HG13	4	0.33
(2,442)	1:3:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG11	4	0.33
(2,442)	1:3:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG12	4	0.33
(2,442)	1:3:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG13	4	0.33
(2,442)	1:3:A:GLU:HB2	1:5:A:VAL:HG11	8	0.33
(2,442)	1:3:A:GLU:HB2	1:5:A:VAL:HG12	8	0.33
(2,442)	1:3:A:GLU:HB2	1:5:A:VAL:HG13	8	0.33
(2,442)	1:3:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG11	8	0.33

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,442)	1:3:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG12	8	0.33
(2,442)	1:3:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG13	8	0.33
(2,409)	1:23:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	1	0.33
(2,395)	1:19:A:SER:HB3	1:21:A:ARG:HD2	10	0.33
(2,393)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HD3	6	0.33
(2,385)	1:7:A:LEU:HG	1:8:A:TYR:HA	4	0.33
(2,385)	1:7:A:LEU:HG	1:8:A:TYR:HA	10	0.33
(2,135)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD11	2	0.33
(2,135)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD12	2	0.33
(2,135)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD13	2	0.33
(2,111)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	7	0.33
(2,15)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	7	0.33
(2,15)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	7	0.33
(2,15)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	7	0.33
(2,7)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	3	0.33
(2,7)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	3	0.33
(2,7)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	3	0.33
(2,7)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	5	0.33
(2,7)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	5	0.33
(2,7)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	5	0.33
(1,521)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HB3	6	0.33
(1,502)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB2	8	0.33
(1,502)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB2	8	0.33
(1,502)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB2	8	0.33
(1,484)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HD1	10	0.33
(1,484)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HD2	10	0.33
(1,446)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD21	10	0.33
(1,446)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD22	10	0.33
(1,446)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD23	10	0.33
(1,446)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD21	10	0.33
(1,446)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD22	10	0.33
(1,446)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD23	10	0.33
(1,399)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	9	0.33
(1,396)	1:8:A:TYR:HB3	1:23:A:PRO:HD3	6	0.33
(1,396)	1:23:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HD3	6	0.33
(1,373)	1:7:A:LEU:HG	1:24:A:PRO:HA	4	0.33
(1,372)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB1	5	0.33
(1,372)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB2	5	0.33
(1,372)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB3	5	0.33
(1,342)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:H	8	0.33
(1,342)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:H	8	0.33
(1,342)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:H	8	0.33

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,322)	1:11:A:TRP:HZ3	1:24:A:PRO:HD2	7	0.33
(1,275)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HD3	7	0.33
(1,223)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG3	3	0.33
(1,182)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HB2	5	0.33
(1,182)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HB2	6	0.33
(1,169)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HA	5	0.33
(1,140)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:HB3	3	0.33
(1,98)	1:24:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HG3	3	0.33
(1,98)	1:24:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HG3	4	0.33
(1,61)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG2	5	0.33
(1,61)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG3	5	0.33
(1,45)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HD2	6	0.33
(1,45)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HD3	6	0.33
(1,21)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE1	9	0.33
(1,21)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE2	9	0.33
(4,175)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HE1	1	0.32
(4,175)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HE2	1	0.32
(4,175)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HE1	7	0.32
(4,175)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HE2	7	0.32
(4,146)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB3	3	0.32
(4,146)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB3	3	0.32
(4,146)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB3	3	0.32
(4,146)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB3	10	0.32
(4,146)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB3	10	0.32
(4,146)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB3	10	0.32
(4,124)	1:7:A:LEU:HB2	1:8:A:TYR:HB3	3	0.32
(4,106)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG2	3	0.32
(4,106)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG3	3	0.32
(4,102)	1:7:A:LEU:HG	1:24:A:PRO:HA	7	0.32
(4,78)	1:11:A:TRP:HE1	1:22:A:PRO:HG2	10	0.32
(4,78)	1:11:A:TRP:HE1	1:22:A:PRO:HG3	10	0.32
(4,61)	1:11:A:TRP:HZ3	1:23:A:PRO:HG3	1	0.32
(4,61)	1:11:A:TRP:HZ3	1:23:A:PRO:HG3	5	0.32
(4,39)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HA	8	0.32
(4,39)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HA	8	0.32
(4,25)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD11	5	0.32
(4,25)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD12	5	0.32
(4,25)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD13	5	0.32
(4,25)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD11	10	0.32
(4,25)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD12	10	0.32
(4,25)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD13	10	0.32
(4,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	2	0.32

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	2	0.32
(4,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	2	0.32
(4,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	6	0.32
(4,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	6	0.32
(4,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	6	0.32
(3,350)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:HB2	4	0.32
(3,350)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:HB2	4	0.32
(3,350)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:HB2	4	0.32
(3,340)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HA	8	0.32
(3,340)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HA	8	0.32
(3,340)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HA	8	0.32
(3,313)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD11	2	0.32
(3,313)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD12	2	0.32
(3,313)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD13	2	0.32
(3,144)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD11	6	0.32
(3,144)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD12	6	0.32
(3,144)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD13	6	0.32
(3,81)	1:24:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD2	8	0.32
(3,31)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG2	3	0.32
(3,31)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG3	3	0.32
(2,530)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:HB2	4	0.32
(2,530)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:HB2	4	0.32
(2,530)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:HB2	4	0.32
(2,518)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HE1	1	0.32
(2,518)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HE2	1	0.32
(2,518)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HE1	7	0.32
(2,518)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HE2	7	0.32
(2,514)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HA	8	0.32
(2,514)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HA	8	0.32
(2,514)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HA	8	0.32
(2,464)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD11	2	0.32
(2,464)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD12	2	0.32
(2,464)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD13	2	0.32
(2,454)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB3	3	0.32
(2,454)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB3	3	0.32
(2,454)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB3	3	0.32
(2,454)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB3	10	0.32
(2,454)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB3	10	0.32
(2,454)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB3	10	0.32
(2,415)	1:7:A:LEU:HB2	1:8:A:TYR:HB3	3	0.32
(2,383)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG2	3	0.32
(2,383)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG3	3	0.32

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,373)	1:7:A:LEU:HG	1:24:A:PRO:HA	7	0.32
(2,332)	1:11:A:TRP:HE1	1:22:A:PRO:HG2	10	0.32
(2,332)	1:11:A:TRP:HE1	1:22:A:PRO:HG3	10	0.32
(2,291)	1:11:A:TRP:HZ3	1:23:A:PRO:HG3	1	0.32
(2,291)	1:11:A:TRP:HZ3	1:23:A:PRO:HG3	5	0.32
(2,229)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HA	8	0.32
(2,229)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HA	8	0.32
(2,177)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD11	6	0.32
(2,177)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD12	6	0.32
(2,177)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD13	6	0.32
(2,135)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD11	5	0.32
(2,135)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD12	5	0.32
(2,135)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD13	5	0.32
(2,135)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD11	10	0.32
(2,135)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD12	10	0.32
(2,135)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD13	10	0.32
(2,99)	1:24:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD2	8	0.32
(2,42)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG2	3	0.32
(2,42)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG3	3	0.32
(2,7)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	2	0.32
(2,7)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	2	0.32
(2,7)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	2	0.32
(2,7)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	6	0.32
(2,7)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	6	0.32
(2,7)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	6	0.32
(1,521)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HB3	9	0.32
(1,497)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HG3	3	0.32
(1,471)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HA	1	0.32
(1,471)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HA	1	0.32
(1,471)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HA	1	0.32
(1,435)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:HG	3	0.32
(1,435)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:HG	3	0.32
(1,435)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:HG	3	0.32
(1,401)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD2	7	0.32
(1,401)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD2	7	0.32
(1,399)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	2	0.32
(1,399)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	10	0.32
(1,382)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	9	0.32
(1,346)	1:12:A:LEU:HD11	1:14:A:ASP:H	1	0.32
(1,346)	1:12:A:LEU:HD12	1:14:A:ASP:H	1	0.32
(1,346)	1:12:A:LEU:HD13	1:14:A:ASP:H	1	0.32
(1,342)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:H	10	0.32

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,342)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:H	10	0.32
(1,342)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:H	10	0.32
(1,322)	1:11:A:TRP:HZ3	1:24:A:PRO:HD2	1	0.32
(1,283)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG3	1	0.32
(1,237)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HB2	4	0.32
(1,237)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HB2	4	0.32
(1,233)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HE1	6	0.32
(1,233)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HE2	6	0.32
(1,204)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HG2	3	0.32
(1,204)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HG3	3	0.32
(1,169)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HA	6	0.32
(1,140)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:HB3	9	0.32
(1,137)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HB3	6	0.32
(1,137)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HB3	7	0.32
(1,114)	1:25:A:SER:HA	1:25:A:SER:HB2	9	0.32
(1,114)	1:25:A:SER:HA	1:25:A:SER:HB3	9	0.32
(1,100)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HD2	1	0.32
(1,44)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HB3	8	0.32
(1,34)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HG2	9	0.32
(1,20)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HD1	8	0.32
(1,20)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HD2	8	0.32
(1,17)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG21	6	0.32
(1,17)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG22	6	0.32
(1,17)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG23	6	0.32
(1,16)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	1	0.32
(1,16)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	1	0.32
(1,16)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	1	0.32
(1,8)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG21	3	0.32
(1,8)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG22	3	0.32
(1,8)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG23	3	0.32
(1,6)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HB	4	0.32
(1,6)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HB	5	0.32
(4,171)	1:12:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HD2	1	0.31
(4,171)	1:12:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HD2	1	0.31
(4,171)	1:12:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HD2	1	0.31
(4,153)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HD11	1	0.31
(4,153)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HD12	1	0.31
(4,153)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HD13	1	0.31
(4,140)	1:3:A:GLU:HB2	1:5:A:VAL:HG11	1	0.31
(4,140)	1:3:A:GLU:HB2	1:5:A:VAL:HG12	1	0.31
(4,140)	1:3:A:GLU:HB2	1:5:A:VAL:HG13	1	0.31
(4,140)	1:3:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG11	1	0.31

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,140)	1:3:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG12	1	0.31
(4,140)	1:3:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG13	1	0.31
(4,140)	1:3:A:GLU:HB2	1:5:A:VAL:HG11	9	0.31
(4,140)	1:3:A:GLU:HB2	1:5:A:VAL:HG12	9	0.31
(4,140)	1:3:A:GLU:HB2	1:5:A:VAL:HG13	9	0.31
(4,140)	1:3:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG11	9	0.31
(4,140)	1:3:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG12	9	0.31
(4,140)	1:3:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG13	9	0.31
(4,124)	1:7:A:LEU:HB2	1:8:A:TYR:HB3	8	0.31
(4,110)	1:23:A:PRO:HG2	1:25:A:SER:HB2	4	0.31
(4,110)	1:23:A:PRO:HG2	1:25:A:SER:HB3	4	0.31
(4,110)	1:23:A:PRO:HG2	1:25:A:SER:HB2	7	0.31
(4,110)	1:23:A:PRO:HG2	1:25:A:SER:HB3	7	0.31
(4,90)	1:13:A:LYS:HG3	1:14:A:ASP:H	1	0.31
(4,25)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD11	7	0.31
(4,25)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD12	7	0.31
(4,25)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD13	7	0.31
(4,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	10	0.31
(4,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	10	0.31
(4,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	10	0.31
(3,350)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:HB2	2	0.31
(3,350)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:HB2	2	0.31
(3,350)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:HB2	2	0.31
(3,350)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:HB2	3	0.31
(3,350)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:HB2	3	0.31
(3,350)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:HB2	3	0.31
(3,340)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HA	4	0.31
(3,340)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HA	4	0.31
(3,340)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HA	4	0.31
(3,313)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD11	1	0.31
(3,313)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD12	1	0.31
(3,313)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD13	1	0.31
(3,286)	1:14:A:ASP:HB2	1:19:A:SER:HB2	7	0.31
(3,283)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HD3	2	0.31
(3,241)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HD2	9	0.31
(3,209)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:HE1	4	0.31
(3,209)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:HE2	4	0.31
(3,209)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:HE1	4	0.31
(3,209)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:HE2	4	0.31
(3,209)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:HE1	4	0.31
(3,209)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:HE2	4	0.31
(3,206)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB3	9	0.31

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,206)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB3	9	0.31
(3,203)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG3	6	0.31
(3,203)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG3	6	0.31
(3,13)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD21	10	0.31
(3,13)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD22	10	0.31
(3,13)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD23	10	0.31
(2,530)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:HB2	2	0.31
(2,530)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:HB2	2	0.31
(2,530)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:HB2	2	0.31
(2,530)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:HB2	3	0.31
(2,530)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:HB2	3	0.31
(2,530)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:HB2	3	0.31
(2,514)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HA	4	0.31
(2,514)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HA	4	0.31
(2,514)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HA	4	0.31
(2,508)	1:12:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HD2	1	0.31
(2,508)	1:12:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HD2	1	0.31
(2,508)	1:12:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HD2	1	0.31
(2,466)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HD11	1	0.31
(2,466)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HD12	1	0.31
(2,466)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:HD13	1	0.31
(2,464)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD11	1	0.31
(2,464)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD12	1	0.31
(2,464)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD13	1	0.31
(2,442)	1:3:A:GLU:HB2	1:5:A:VAL:HG11	1	0.31
(2,442)	1:3:A:GLU:HB2	1:5:A:VAL:HG12	1	0.31
(2,442)	1:3:A:GLU:HB2	1:5:A:VAL:HG13	1	0.31
(2,442)	1:3:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG11	1	0.31
(2,442)	1:3:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG12	1	0.31
(2,442)	1:3:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG13	1	0.31
(2,442)	1:3:A:GLU:HB2	1:5:A:VAL:HG11	9	0.31
(2,442)	1:3:A:GLU:HB2	1:5:A:VAL:HG12	9	0.31
(2,442)	1:3:A:GLU:HB2	1:5:A:VAL:HG13	9	0.31
(2,442)	1:3:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG11	9	0.31
(2,442)	1:3:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG12	9	0.31
(2,442)	1:3:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG13	9	0.31
(2,415)	1:7:A:LEU:HB2	1:8:A:TYR:HB3	8	0.31
(2,398)	1:14:A:ASP:HB2	1:19:A:SER:HB2	7	0.31
(2,393)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HD3	2	0.31
(2,392)	1:23:A:PRO:HG2	1:25:A:SER:HB2	4	0.31
(2,392)	1:23:A:PRO:HG2	1:25:A:SER:HB3	4	0.31
(2,392)	1:23:A:PRO:HG2	1:25:A:SER:HB2	7	0.31

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,392)	1:23:A:PRO:HG2	1:25:A:SER:HB3	7	0.31
(2,351)	1:13:A:LYS:HG3	1:14:A:ASP:H	1	0.31
(2,309)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HD2	9	0.31
(2,259)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:HE1	4	0.31
(2,259)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:HE2	4	0.31
(2,259)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:HE1	4	0.31
(2,259)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:HE2	4	0.31
(2,259)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:HE1	4	0.31
(2,259)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:HE2	4	0.31
(2,256)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB3	9	0.31
(2,256)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB3	9	0.31
(2,251)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG3	6	0.31
(2,251)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG3	6	0.31
(2,135)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD11	7	0.31
(2,135)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD12	7	0.31
(2,135)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD13	7	0.31
(2,19)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD21	10	0.31
(2,19)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD22	10	0.31
(2,19)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD23	10	0.31
(2,7)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	10	0.31
(2,7)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	10	0.31
(2,7)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	10	0.31
(1,497)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HG3	2	0.31
(1,497)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HG3	6	0.31
(1,497)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HG3	7	0.31
(1,473)	1:13:A:LYS:HB2	1:14:A:ASP:H	9	0.31
(1,473)	1:13:A:LYS:HB3	1:14:A:ASP:H	9	0.31
(1,422)	1:10:A:GLN:HG2	1:13:A:LYS:HD2	1	0.31
(1,422)	1:10:A:GLN:HG2	1:13:A:LYS:HD3	1	0.31
(1,422)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:HD2	1	0.31
(1,422)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:HD3	1	0.31
(1,420)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	1	0.31
(1,420)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	1	0.31
(1,420)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	1	0.31
(1,391)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HD2	1	0.31
(1,345)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD11	6	0.31
(1,345)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD12	6	0.31
(1,345)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD13	6	0.31
(1,343)	1:12:A:LEU:HD21	1:13:A:LYS:H	10	0.31
(1,343)	1:12:A:LEU:HD22	1:13:A:LYS:H	10	0.31
(1,343)	1:12:A:LEU:HD23	1:13:A:LYS:H	10	0.31
(1,342)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:H	1	0.31

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,342)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:H	1	0.31
(1,342)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:H	1	0.31
(1,302)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD11	6	0.31
(1,302)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD12	6	0.31
(1,302)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD13	6	0.31
(1,292)	1:11:A:TRP:HZ3	1:23:A:PRO:HG2	1	0.31
(1,267)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD21	2	0.31
(1,267)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD22	2	0.31
(1,267)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD23	2	0.31
(1,267)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD21	2	0.31
(1,267)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD22	2	0.31
(1,267)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD23	2	0.31
(1,263)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE1	1	0.31
(1,263)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE2	1	0.31
(1,263)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE1	1	0.31
(1,263)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE2	1	0.31
(1,263)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE1	1	0.31
(1,263)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE2	1	0.31
(1,237)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HB2	5	0.31
(1,237)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HB2	5	0.31
(1,204)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HG2	1	0.31
(1,204)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HG3	1	0.31
(1,182)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HB2	10	0.31
(1,173)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD21	8	0.31
(1,173)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD22	8	0.31
(1,173)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD23	8	0.31
(1,169)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HA	1	0.31
(1,169)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HA	7	0.31
(1,148)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HG13	7	0.31
(1,137)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HB3	1	0.31
(1,137)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HB3	4	0.31
(1,70)	1:19:A:SER:HA	1:19:A:SER:HB3	10	0.31
(1,24)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	3	0.31
(1,24)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	3	0.31
(1,24)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	8	0.31
(1,24)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	8	0.31
(1,17)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG21	9	0.31
(1,17)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG22	9	0.31
(1,17)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG23	9	0.31
(1,17)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG21	10	0.31
(1,17)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG22	10	0.31
(1,17)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG23	10	0.31

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,12)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG11	10	0.31
(1,12)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG12	10	0.31
(1,12)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG13	10	0.31
(1,8)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG21	1	0.31
(1,8)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG22	1	0.31
(1,8)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG23	1	0.31
(1,8)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG21	2	0.31
(1,8)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG22	2	0.31
(1,8)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG23	2	0.31
(4,175)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HE1	6	0.3
(4,175)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HE2	6	0.3
(4,142)	1:3:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG11	5	0.3
(4,142)	1:3:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG12	5	0.3
(4,142)	1:3:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG13	5	0.3
(4,142)	1:3:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG11	5	0.3
(4,142)	1:3:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG12	5	0.3
(4,142)	1:3:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG13	5	0.3
(4,115)	1:19:A:SER:HB3	1:21:A:ARG:HG2	8	0.3
(4,111)	1:23:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HD2	8	0.3
(4,108)	1:7:A:LEU:HG	1:8:A:TYR:HA	9	0.3
(4,91)	1:21:A:ARG:H	1:22:A:PRO:HB3	8	0.3
(4,79)	1:11:A:TRP:HE1	1:23:A:PRO:HA	10	0.3
(4,77)	1:11:A:TRP:HE1	1:12:A:LEU:HD11	1	0.3
(4,77)	1:11:A:TRP:HE1	1:12:A:LEU:HD12	1	0.3
(4,77)	1:11:A:TRP:HE1	1:12:A:LEU:HD13	1	0.3
(4,30)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HB	1	0.3
(4,29)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HG12	1	0.3
(4,17)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD3	5	0.3
(4,12)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG2	10	0.3
(4,12)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG3	10	0.3
(4,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	9	0.3
(4,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	9	0.3
(4,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	9	0.3
(3,334)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB2	9	0.3
(3,334)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB2	9	0.3
(3,334)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB2	9	0.3
(3,334)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB2	10	0.3
(3,334)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB2	10	0.3
(3,334)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB2	10	0.3
(3,283)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HD3	5	0.3
(3,263)	1:10:A:GLN:HB2	1:11:A:TRP:H	3	0.3
(3,241)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HD2	6	0.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,235)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD21	4	0.3
(3,235)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD22	4	0.3
(3,235)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD23	4	0.3
(3,206)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB3	2	0.3
(3,206)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB3	2	0.3
(3,203)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG3	5	0.3
(3,203)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG3	5	0.3
(3,151)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD21	4	0.3
(3,151)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD22	4	0.3
(3,151)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD23	4	0.3
(3,144)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD11	1	0.3
(3,144)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD12	1	0.3
(3,144)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD13	1	0.3
(3,31)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG2	7	0.3
(3,31)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG3	7	0.3
(2,518)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HE1	6	0.3
(2,518)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HE2	6	0.3
(2,502)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB2	9	0.3
(2,502)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB2	9	0.3
(2,502)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB2	9	0.3
(2,502)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB2	10	0.3
(2,502)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB2	10	0.3
(2,502)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB2	10	0.3
(2,447)	1:3:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG11	5	0.3
(2,447)	1:3:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG12	5	0.3
(2,447)	1:3:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG13	5	0.3
(2,447)	1:3:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG11	5	0.3
(2,447)	1:3:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG12	5	0.3
(2,447)	1:3:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG13	5	0.3
(2,403)	1:19:A:SER:HB3	1:21:A:ARG:HG2	8	0.3
(2,394)	1:23:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HD2	8	0.3
(2,393)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HD3	5	0.3
(2,385)	1:7:A:LEU:HG	1:8:A:TYR:HA	9	0.3
(2,358)	1:10:A:GLN:HB2	1:11:A:TRP:H	3	0.3
(2,352)	1:21:A:ARG:H	1:22:A:PRO:HB3	8	0.3
(2,333)	1:11:A:TRP:HE1	1:23:A:PRO:HA	10	0.3
(2,329)	1:11:A:TRP:HE1	1:12:A:LEU:HD11	1	0.3
(2,329)	1:11:A:TRP:HE1	1:12:A:LEU:HD12	1	0.3
(2,329)	1:11:A:TRP:HE1	1:12:A:LEU:HD13	1	0.3
(2,309)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HD2	6	0.3
(2,300)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD21	4	0.3
(2,300)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD22	4	0.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,300)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD23	4	0.3
(2,256)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB3	2	0.3
(2,256)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB3	2	0.3
(2,251)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG3	5	0.3
(2,251)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG3	5	0.3
(2,186)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD21	4	0.3
(2,186)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD22	4	0.3
(2,186)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD23	4	0.3
(2,177)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD11	1	0.3
(2,177)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD12	1	0.3
(2,177)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD13	1	0.3
(2,156)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HB	1	0.3
(2,147)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HG12	1	0.3
(2,85)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD3	5	0.3
(2,58)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG2	10	0.3
(2,58)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG3	10	0.3
(2,42)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG2	7	0.3
(2,42)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG3	7	0.3
(2,7)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	9	0.3
(2,7)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	9	0.3
(2,7)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	9	0.3
(1,521)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HB3	7	0.3
(1,507)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	6	0.3
(1,507)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	6	0.3
(1,507)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	6	0.3
(1,505)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HD3	8	0.3
(1,505)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HD3	8	0.3
(1,505)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HD3	8	0.3
(1,496)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HG2	5	0.3
(1,486)	1:24:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:HA	2	0.3
(1,479)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:H	5	0.3
(1,342)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:H	7	0.3
(1,342)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:H	7	0.3
(1,342)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:H	7	0.3
(1,313)	1:11:A:TRP:HE3	1:24:A:PRO:HA	3	0.3
(1,301)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD11	6	0.3
(1,301)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD12	6	0.3
(1,301)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD13	6	0.3
(1,301)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD11	8	0.3
(1,301)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD12	8	0.3
(1,301)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD13	8	0.3
(1,264)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	8	0.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,264)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	8	0.3
(1,264)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	8	0.3
(1,264)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	8	0.3
(1,264)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	8	0.3
(1,264)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	8	0.3
(1,254)	1:7:A:LEU:HG	1:8:A:TYR:HD1	8	0.3
(1,254)	1:7:A:LEU:HG	1:8:A:TYR:HD2	8	0.3
(1,215)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HG3	9	0.3
(1,204)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HG2	2	0.3
(1,204)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HG3	2	0.3
(1,204)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HG2	5	0.3
(1,204)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HG3	5	0.3
(1,204)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HG2	6	0.3
(1,204)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HG3	6	0.3
(1,204)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HG2	7	0.3
(1,204)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HG3	7	0.3
(1,169)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HA	8	0.3
(1,148)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HG13	1	0.3
(1,105)	1:23:A:PRO:HD2	1:23:A:PRO:HG2	3	0.3
(1,26)	1:14:A:ASP:HA	1:14:A:ASP:HB2	10	0.3
(1,8)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG21	10	0.3
(1,8)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG22	10	0.3
(1,8)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG23	10	0.3
(1,6)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HB	6	0.3
(4,160)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HE1	1	0.29
(4,160)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HE2	1	0.29
(4,158)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:HZ3	10	0.29
(4,158)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:HZ3	10	0.29
(4,150)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HA	5	0.29
(4,150)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HA	5	0.29
(4,150)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HA	5	0.29
(4,146)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB3	4	0.29
(4,146)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB3	4	0.29
(4,146)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB3	4	0.29
(4,146)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB3	8	0.29
(4,146)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB3	8	0.29
(4,146)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB3	8	0.29
(4,140)	1:3:A:GLU:HB2	1:5:A:VAL:HG11	2	0.29
(4,140)	1:3:A:GLU:HB2	1:5:A:VAL:HG12	2	0.29
(4,140)	1:3:A:GLU:HB2	1:5:A:VAL:HG13	2	0.29
(4,140)	1:3:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG11	2	0.29
(4,140)	1:3:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG12	2	0.29

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,140)	1:3:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG13	2	0.29
(4,140)	1:3:A:GLU:HB2	1:5:A:VAL:HG11	3	0.29
(4,140)	1:3:A:GLU:HB2	1:5:A:VAL:HG12	3	0.29
(4,140)	1:3:A:GLU:HB2	1:5:A:VAL:HG13	3	0.29
(4,140)	1:3:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG11	3	0.29
(4,140)	1:3:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG12	3	0.29
(4,140)	1:3:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG13	3	0.29
(4,107)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HB	5	0.29
(4,80)	1:11:A:TRP:HE1	1:24:A:PRO:HD2	3	0.29
(4,79)	1:11:A:TRP:HE1	1:23:A:PRO:HA	9	0.29
(4,4)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	8	0.29
(4,4)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	8	0.29
(4,4)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	8	0.29
(4,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	7	0.29
(4,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	7	0.29
(4,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	7	0.29
(4,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	8	0.29
(4,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	8	0.29
(4,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	8	0.29
(3,350)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:HB2	9	0.29
(3,350)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:HB2	9	0.29
(3,350)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:HB2	9	0.29
(3,220)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD2	6	0.29
(3,207)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HG	1	0.29
(3,207)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HG	1	0.29
(3,207)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HG	2	0.29
(3,207)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HG	2	0.29
(3,196)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HD2	10	0.29
(3,196)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HD2	10	0.29
(3,45)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HD2	9	0.29
(3,31)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG2	8	0.29
(3,31)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG3	8	0.29
(2,530)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:HB2	9	0.29
(2,530)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:HB2	9	0.29
(2,530)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:HB2	9	0.29
(2,483)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HE1	1	0.29
(2,483)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HE2	1	0.29
(2,476)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:HZ3	10	0.29
(2,476)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:HZ3	10	0.29
(2,462)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HA	5	0.29
(2,462)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HA	5	0.29
(2,462)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HA	5	0.29

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,454)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB3	4	0.29
(2,454)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB3	4	0.29
(2,454)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB3	4	0.29
(2,454)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB3	8	0.29
(2,454)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB3	8	0.29
(2,454)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB3	8	0.29
(2,442)	1:3:A:GLU:HB2	1:5:A:VAL:HG11	2	0.29
(2,442)	1:3:A:GLU:HB2	1:5:A:VAL:HG12	2	0.29
(2,442)	1:3:A:GLU:HB2	1:5:A:VAL:HG13	2	0.29
(2,442)	1:3:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG11	2	0.29
(2,442)	1:3:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG12	2	0.29
(2,442)	1:3:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG13	2	0.29
(2,442)	1:3:A:GLU:HB2	1:5:A:VAL:HG11	3	0.29
(2,442)	1:3:A:GLU:HB2	1:5:A:VAL:HG12	3	0.29
(2,442)	1:3:A:GLU:HB2	1:5:A:VAL:HG13	3	0.29
(2,442)	1:3:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG11	3	0.29
(2,442)	1:3:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG12	3	0.29
(2,442)	1:3:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG13	3	0.29
(2,384)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HB	5	0.29
(2,334)	1:11:A:TRP:HE1	1:24:A:PRO:HD2	3	0.29
(2,333)	1:11:A:TRP:HE1	1:23:A:PRO:HA	9	0.29
(2,277)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD2	6	0.29
(2,257)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HG	1	0.29
(2,257)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HG	1	0.29
(2,257)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HG	2	0.29
(2,257)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HG	2	0.29
(2,240)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HD2	10	0.29
(2,240)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HD2	10	0.29
(2,56)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HD2	9	0.29
(2,42)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG2	8	0.29
(2,42)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG3	8	0.29
(2,15)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	8	0.29
(2,15)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	8	0.29
(2,15)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	8	0.29
(2,7)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	7	0.29
(2,7)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	7	0.29
(2,7)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	7	0.29
(2,7)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	8	0.29
(2,7)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	8	0.29
(2,7)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	8	0.29
(1,497)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HG3	1	0.29
(1,496)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HG2	1	0.29

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,413)	1:1:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD2	2	0.29
(1,413)	1:1:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD3	2	0.29
(1,413)	1:1:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD2	2	0.29
(1,413)	1:1:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD3	2	0.29
(1,366)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:H	8	0.29
(1,366)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:H	8	0.29
(1,366)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:H	8	0.29
(1,267)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD21	6	0.29
(1,267)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD22	6	0.29
(1,267)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD23	6	0.29
(1,267)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD21	6	0.29
(1,267)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD22	6	0.29
(1,267)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD23	6	0.29
(1,219)	1:21:A:ARG:HG2	1:21:A:ARG:HG3	4	0.29
(1,204)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HG2	4	0.29
(1,204)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HG3	4	0.29
(1,204)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HG2	8	0.29
(1,204)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HG3	8	0.29
(1,201)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HG3	7	0.29
(1,173)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD21	9	0.29
(1,173)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD22	9	0.29
(1,173)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD23	9	0.29
(1,173)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD21	10	0.29
(1,173)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD22	10	0.29
(1,173)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD23	10	0.29
(1,169)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HA	3	0.29
(1,108)	1:22:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	8	0.29
(1,34)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HG2	10	0.29
(1,26)	1:14:A:ASP:HA	1:14:A:ASP:HB2	6	0.29
(1,25)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	6	0.29
(1,25)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	6	0.29
(1,24)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	10	0.29
(1,24)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	10	0.29
(1,20)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HD1	7	0.29
(1,20)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HD2	7	0.29
(4,161)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HA	8	0.28
(4,158)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:HZ3	6	0.28
(4,158)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:HZ3	6	0.28
(4,124)	1:7:A:LEU:HB2	1:8:A:TYR:HB3	10	0.28
(4,103)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	9	0.28
(4,103)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB3	9	0.28
(4,78)	1:11:A:TRP:HE1	1:22:A:PRO:HG2	9	0.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,78)	1:11:A:TRP:HE1	1:22:A:PRO:HG3	9	0.28
(4,77)	1:11:A:TRP:HE1	1:12:A:LEU:HD11	7	0.28
(4,77)	1:11:A:TRP:HE1	1:12:A:LEU:HD12	7	0.28
(4,77)	1:11:A:TRP:HE1	1:12:A:LEU:HD13	7	0.28
(4,23)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HG	7	0.28
(4,17)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD3	9	0.28
(4,17)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD3	10	0.28
(4,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	1	0.28
(4,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	1	0.28
(4,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	1	0.28
(3,350)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:HB2	10	0.28
(3,350)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:HB2	10	0.28
(3,350)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:HB2	10	0.28
(3,342)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD11	9	0.28
(3,342)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD12	9	0.28
(3,342)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD13	9	0.28
(3,313)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD11	3	0.28
(3,313)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD12	3	0.28
(3,313)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD13	3	0.28
(3,298)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HG3	2	0.28
(3,298)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HG3	2	0.28
(3,298)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HG3	2	0.28
(3,283)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HD3	3	0.28
(3,268)	1:5:A:VAL:H	1:6:A:ARG:HB2	3	0.28
(3,266)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:H	1	0.28
(3,264)	1:10:A:GLN:HG2	1:11:A:TRP:H	9	0.28
(3,264)	1:10:A:GLN:HG3	1:11:A:TRP:H	9	0.28
(3,264)	1:10:A:GLN:HG2	1:11:A:TRP:H	10	0.28
(3,264)	1:10:A:GLN:HG3	1:11:A:TRP:H	10	0.28
(3,207)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HG	10	0.28
(3,207)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HG	10	0.28
(3,144)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD11	7	0.28
(3,144)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD12	7	0.28
(3,144)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD13	7	0.28
(2,530)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:HB2	10	0.28
(2,530)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:HB2	10	0.28
(2,530)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:HB2	10	0.28
(2,516)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD11	9	0.28
(2,516)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD12	9	0.28
(2,516)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD13	9	0.28
(2,485)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HA	8	0.28
(2,476)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:HZ3	6	0.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,476)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:HZ3	6	0.28
(2,464)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD11	3	0.28
(2,464)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD12	3	0.28
(2,464)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD13	3	0.28
(2,431)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HG3	2	0.28
(2,431)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HG3	2	0.28
(2,431)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HG3	2	0.28
(2,415)	1:7:A:LEU:HB2	1:8:A:TYR:HB3	10	0.28
(2,393)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HD3	3	0.28
(2,374)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	9	0.28
(2,374)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB3	9	0.28
(2,364)	1:5:A:VAL:H	1:6:A:ARG:HB2	3	0.28
(2,361)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:H	1	0.28
(2,359)	1:10:A:GLN:HG2	1:11:A:TRP:H	9	0.28
(2,359)	1:10:A:GLN:HG3	1:11:A:TRP:H	9	0.28
(2,359)	1:10:A:GLN:HG2	1:11:A:TRP:H	10	0.28
(2,359)	1:10:A:GLN:HG3	1:11:A:TRP:H	10	0.28
(2,332)	1:11:A:TRP:HE1	1:22:A:PRO:HG2	9	0.28
(2,332)	1:11:A:TRP:HE1	1:22:A:PRO:HG3	9	0.28
(2,329)	1:11:A:TRP:HE1	1:12:A:LEU:HD11	7	0.28
(2,329)	1:11:A:TRP:HE1	1:12:A:LEU:HD12	7	0.28
(2,329)	1:11:A:TRP:HE1	1:12:A:LEU:HD13	7	0.28
(2,257)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HG	10	0.28
(2,257)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HG	10	0.28
(2,177)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD11	7	0.28
(2,177)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD12	7	0.28
(2,177)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD13	7	0.28
(2,125)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HG	7	0.28
(2,85)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD3	9	0.28
(2,85)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD3	10	0.28
(2,7)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	1	0.28
(2,7)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	1	0.28
(2,7)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	1	0.28
(1,506)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	5	0.28
(1,506)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	5	0.28
(1,506)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	5	0.28
(1,497)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HG3	9	0.28
(1,497)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HG3	10	0.28
(1,486)	1:24:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:HA	3	0.28
(1,428)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	9	0.28
(1,428)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	9	0.28
(1,428)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	9	0.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,428)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	9	0.28
(1,428)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	9	0.28
(1,428)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	9	0.28
(1,428)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	9	0.28
(1,428)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	9	0.28
(1,428)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	9	0.28
(1,339)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:H	2	0.28
(1,303)	1:11:A:TRP:HZ3	1:23:A:PRO:HB2	5	0.28
(1,284)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB3	9	0.28
(1,219)	1:21:A:ARG:HG2	1:21:A:ARG:HG3	8	0.28
(1,219)	1:21:A:ARG:HG2	1:21:A:ARG:HG3	10	0.28
(1,218)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG3	9	0.28
(1,218)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HG3	9	0.28
(1,198)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HB2	1	0.28
(1,198)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HB3	1	0.28
(1,198)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HB2	9	0.28
(1,198)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HB3	9	0.28
(1,189)	1:13:A:LYS:HE2	1:13:A:LYS:HG2	2	0.28
(1,189)	1:13:A:LYS:HE3	1:13:A:LYS:HG2	2	0.28
(1,182)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HB2	7	0.28
(1,182)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HB2	9	0.28
(1,148)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HG13	3	0.28
(1,148)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HG13	8	0.28
(1,105)	1:23:A:PRO:HD2	1:23:A:PRO:HG2	9	0.28
(1,105)	1:23:A:PRO:HD2	1:23:A:PRO:HG2	10	0.28
(1,98)	1:24:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HG3	9	0.28
(1,98)	1:24:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HG3	10	0.28
(1,69)	1:19:A:SER:HA	1:19:A:SER:HB2	1	0.28
(1,66)	1:18:A:SER:HA	1:18:A:SER:HB2	10	0.28
(1,66)	1:18:A:SER:HA	1:18:A:SER:HB3	10	0.28
(1,34)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HG2	3	0.28
(1,21)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE1	10	0.28
(1,21)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE2	10	0.28
(1,20)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HD1	3	0.28
(1,20)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HD2	3	0.28
(1,16)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	7	0.28
(1,16)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	7	0.28
(1,16)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	7	0.28
(1,8)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG21	9	0.28
(1,8)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG22	9	0.28
(1,8)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG23	9	0.28
(1,3)	1:4:A:ALA:H	1:4:A:ALA:HA	5	0.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,150)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HA	6	0.27
(4,150)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HA	6	0.27
(4,150)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HA	6	0.27
(4,146)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB3	2	0.27
(4,146)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB3	2	0.27
(4,146)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB3	2	0.27
(4,145)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD11	8	0.27
(4,145)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD12	8	0.27
(4,145)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD13	8	0.27
(4,140)	1:3:A:GLU:HB2	1:5:A:VAL:HG11	6	0.27
(4,140)	1:3:A:GLU:HB2	1:5:A:VAL:HG12	6	0.27
(4,140)	1:3:A:GLU:HB2	1:5:A:VAL:HG13	6	0.27
(4,140)	1:3:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG11	6	0.27
(4,140)	1:3:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG12	6	0.27
(4,140)	1:3:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG13	6	0.27
(4,140)	1:3:A:GLU:HB2	1:5:A:VAL:HG11	10	0.27
(4,140)	1:3:A:GLU:HB2	1:5:A:VAL:HG12	10	0.27
(4,140)	1:3:A:GLU:HB2	1:5:A:VAL:HG13	10	0.27
(4,140)	1:3:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG11	10	0.27
(4,140)	1:3:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG12	10	0.27
(4,140)	1:3:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG13	10	0.27
(4,119)	1:23:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	7	0.27
(4,108)	1:7:A:LEU:HG	1:8:A:TYR:HA	1	0.27
(4,106)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG2	4	0.27
(4,106)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG3	4	0.27
(4,90)	1:13:A:LYS:HG3	1:14:A:ASP:H	9	0.27
(4,80)	1:11:A:TRP:HE1	1:24:A:PRO:HD2	2	0.27
(4,80)	1:11:A:TRP:HE1	1:24:A:PRO:HD2	9	0.27
(4,79)	1:11:A:TRP:HE1	1:23:A:PRO:HA	2	0.27
(4,77)	1:11:A:TRP:HE1	1:12:A:LEU:HD11	2	0.27
(4,77)	1:11:A:TRP:HE1	1:12:A:LEU:HD12	2	0.27
(4,77)	1:11:A:TRP:HE1	1:12:A:LEU:HD13	2	0.27
(4,51)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HD1	3	0.27
(4,51)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HD2	3	0.27
(4,51)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HD1	3	0.27
(4,51)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HD2	3	0.27
(4,51)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HD1	3	0.27
(4,51)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HD2	3	0.27
(4,23)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HG	1	0.27
(4,23)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HG	6	0.27
(4,4)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	2	0.27
(4,4)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	2	0.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,4)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	2	0.27
(3,340)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HA	6	0.27
(3,340)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HA	6	0.27
(3,340)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HA	6	0.27
(3,313)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD11	7	0.27
(3,313)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD12	7	0.27
(3,313)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD13	7	0.27
(3,313)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD11	10	0.27
(3,313)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD12	10	0.27
(3,313)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD13	10	0.27
(3,298)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HG3	3	0.27
(3,298)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HG3	3	0.27
(3,298)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HG3	3	0.27
(3,283)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HD3	1	0.27
(3,266)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:H	2	0.27
(3,241)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HD2	10	0.27
(3,224)	1:11:A:TRP:HZ2	1:24:A:PRO:HD2	7	0.27
(3,202)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG2	3	0.27
(3,202)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG2	3	0.27
(3,185)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG2	5	0.27
(3,151)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD21	2	0.27
(3,151)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD22	2	0.27
(3,151)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD23	2	0.27
(3,85)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD3	5	0.27
(2,514)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HA	6	0.27
(2,514)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HA	6	0.27
(2,514)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HA	6	0.27
(2,464)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD11	7	0.27
(2,464)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD12	7	0.27
(2,464)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD13	7	0.27
(2,464)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD11	10	0.27
(2,464)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD12	10	0.27
(2,464)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD13	10	0.27
(2,462)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HA	6	0.27
(2,462)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HA	6	0.27
(2,462)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HA	6	0.27
(2,454)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB3	2	0.27
(2,454)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB3	2	0.27
(2,454)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB3	2	0.27
(2,452)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD11	8	0.27
(2,452)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD12	8	0.27
(2,452)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD13	8	0.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,442)	1:3:A:GLU:HB2	1:5:A:VAL:HG11	6	0.27
(2,442)	1:3:A:GLU:HB2	1:5:A:VAL:HG12	6	0.27
(2,442)	1:3:A:GLU:HB2	1:5:A:VAL:HG13	6	0.27
(2,442)	1:3:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG11	6	0.27
(2,442)	1:3:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG12	6	0.27
(2,442)	1:3:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG13	6	0.27
(2,442)	1:3:A:GLU:HB2	1:5:A:VAL:HG11	10	0.27
(2,442)	1:3:A:GLU:HB2	1:5:A:VAL:HG12	10	0.27
(2,442)	1:3:A:GLU:HB2	1:5:A:VAL:HG13	10	0.27
(2,442)	1:3:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG11	10	0.27
(2,442)	1:3:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG12	10	0.27
(2,442)	1:3:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG13	10	0.27
(2,431)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HG3	3	0.27
(2,431)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HG3	3	0.27
(2,431)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HG3	3	0.27
(2,409)	1:23:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	7	0.27
(2,393)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HD3	1	0.27
(2,385)	1:7:A:LEU:HG	1:8:A:TYR:HA	1	0.27
(2,383)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG2	4	0.27
(2,383)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG3	4	0.27
(2,361)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:H	2	0.27
(2,351)	1:13:A:LYS:HG3	1:14:A:ASP:H	9	0.27
(2,334)	1:11:A:TRP:HE1	1:24:A:PRO:HD2	2	0.27
(2,334)	1:11:A:TRP:HE1	1:24:A:PRO:HD2	9	0.27
(2,333)	1:11:A:TRP:HE1	1:23:A:PRO:HA	2	0.27
(2,329)	1:11:A:TRP:HE1	1:12:A:LEU:HD11	2	0.27
(2,329)	1:11:A:TRP:HE1	1:12:A:LEU:HD12	2	0.27
(2,329)	1:11:A:TRP:HE1	1:12:A:LEU:HD13	2	0.27
(2,309)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HD2	10	0.27
(2,281)	1:11:A:TRP:HZ2	1:24:A:PRO:HD2	7	0.27
(2,260)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HD1	3	0.27
(2,260)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HD2	3	0.27
(2,260)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HD1	3	0.27
(2,260)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HD2	3	0.27
(2,260)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HD1	3	0.27
(2,260)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HD2	3	0.27
(2,250)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG2	3	0.27
(2,250)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG2	3	0.27
(2,222)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG2	5	0.27
(2,186)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD21	2	0.27
(2,186)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD22	2	0.27
(2,186)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD23	2	0.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,125)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HG	1	0.27
(2,125)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HG	6	0.27
(2,104)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD3	5	0.27
(2,15)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	2	0.27
(2,15)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	2	0.27
(2,15)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	2	0.27
(1,513)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD11	1	0.27
(1,513)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD12	1	0.27
(1,513)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD13	1	0.27
(1,497)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HG3	5	0.27
(1,496)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HG2	6	0.27
(1,435)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:HG	10	0.27
(1,435)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:HG	10	0.27
(1,435)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:HG	10	0.27
(1,374)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	10	0.27
(1,374)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB3	10	0.27
(1,367)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD2	2	0.27
(1,346)	1:12:A:LEU:HD11	1:14:A:ASP:H	8	0.27
(1,346)	1:12:A:LEU:HD12	1:14:A:ASP:H	8	0.27
(1,346)	1:12:A:LEU:HD13	1:14:A:ASP:H	8	0.27
(1,331)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB2	7	0.27
(1,313)	1:11:A:TRP:HE3	1:24:A:PRO:HA	9	0.27
(1,298)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD21	5	0.27
(1,298)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD22	5	0.27
(1,298)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD23	5	0.27
(1,246)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HB2	9	0.27
(1,246)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HB2	9	0.27
(1,223)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG3	4	0.27
(1,219)	1:21:A:ARG:HG2	1:21:A:ARG:HG3	1	0.27
(1,219)	1:21:A:ARG:HG2	1:21:A:ARG:HG3	2	0.27
(1,219)	1:21:A:ARG:HG2	1:21:A:ARG:HG3	3	0.27
(1,219)	1:21:A:ARG:HG2	1:21:A:ARG:HG3	6	0.27
(1,219)	1:21:A:ARG:HG2	1:21:A:ARG:HG3	7	0.27
(1,219)	1:21:A:ARG:HG2	1:21:A:ARG:HG3	9	0.27
(1,218)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG3	5	0.27
(1,218)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HG3	5	0.27
(1,218)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG3	6	0.27
(1,218)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HG3	6	0.27
(1,218)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG3	10	0.27
(1,218)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HG3	10	0.27
(1,211)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD2	1	0.27
(1,211)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HD2	1	0.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,206)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HB2	9	0.27
(1,206)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HB3	9	0.27
(1,204)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HG2	9	0.27
(1,204)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HG3	9	0.27
(1,198)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HB2	10	0.27
(1,198)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HB3	10	0.27
(1,182)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HB2	1	0.27
(1,169)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HA	2	0.27
(1,169)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HA	4	0.27
(1,148)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HG13	2	0.27
(1,148)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HG13	4	0.27
(1,148)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HG13	9	0.27
(1,148)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HG13	10	0.27
(1,105)	1:23:A:PRO:HD2	1:23:A:PRO:HG2	1	0.27
(1,105)	1:23:A:PRO:HD2	1:23:A:PRO:HG2	2	0.27
(1,92)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD2	5	0.27
(1,66)	1:18:A:SER:HA	1:18:A:SER:HB2	5	0.27
(1,66)	1:18:A:SER:HA	1:18:A:SER:HB3	5	0.27
(1,66)	1:18:A:SER:HA	1:18:A:SER:HB2	8	0.27
(1,66)	1:18:A:SER:HA	1:18:A:SER:HB3	8	0.27
(1,25)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	7	0.27
(1,25)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	7	0.27
(1,5)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HA	1	0.27
(1,5)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HA	2	0.27
(4,163)	1:8:A:TYR:HB2	1:24:A:PRO:HA	10	0.26
(4,161)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HA	1	0.26
(4,117)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:HB3	6	0.26
(4,117)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:HB3	6	0.26
(4,117)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:HB3	6	0.26
(4,115)	1:19:A:SER:HB3	1:21:A:ARG:HG2	7	0.26
(4,80)	1:11:A:TRP:HE1	1:24:A:PRO:HD2	10	0.26
(4,51)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HD1	2	0.26
(4,51)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HD2	2	0.26
(4,51)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HD1	2	0.26
(4,51)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HD2	2	0.26
(4,51)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HD1	2	0.26
(4,51)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HD2	2	0.26
(4,30)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HB	7	0.26
(4,29)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HG12	7	0.26
(4,25)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD11	8	0.26
(4,25)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD12	8	0.26
(4,25)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD13	8	0.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,23)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HG	5	0.26
(4,23)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HG	9	0.26
(4,23)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HG	10	0.26
(4,13)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD3	4	0.26
(4,10)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE2	6	0.26
(4,10)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE3	6	0.26
(3,350)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:HB2	7	0.26
(3,350)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:HB2	7	0.26
(3,350)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:HB2	7	0.26
(3,298)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HG3	8	0.26
(3,298)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HG3	8	0.26
(3,298)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HG3	8	0.26
(3,295)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HB	4	0.26
(3,295)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HB	4	0.26
(3,295)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HB	4	0.26
(3,268)	1:5:A:VAL:H	1:6:A:ARG:HB2	9	0.26
(3,266)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:H	3	0.26
(3,220)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD2	8	0.26
(3,219)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	6	0.26
(3,201)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HB3	9	0.26
(3,201)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HB3	9	0.26
(3,199)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB2	4	0.26
(3,199)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB2	4	0.26
(3,151)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD21	1	0.26
(3,151)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD22	1	0.26
(3,151)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD23	1	0.26
(3,97)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:H	5	0.26
(2,530)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:HB2	7	0.26
(2,530)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:HB2	7	0.26
(2,530)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:HB2	7	0.26
(2,487)	1:8:A:TYR:HB2	1:24:A:PRO:HA	10	0.26
(2,485)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HA	1	0.26
(2,431)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HG3	8	0.26
(2,431)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HG3	8	0.26
(2,431)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HG3	8	0.26
(2,423)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HB	4	0.26
(2,423)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HB	4	0.26
(2,423)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HB	4	0.26
(2,407)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:HB3	6	0.26
(2,407)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:HB3	6	0.26
(2,407)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:HB3	6	0.26
(2,403)	1:19:A:SER:HB3	1:21:A:ARG:HG2	7	0.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,364)	1:5:A:VAL:H	1:6:A:ARG:HB2	9	0.26
(2,361)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:H	3	0.26
(2,334)	1:11:A:TRP:HE1	1:24:A:PRO:HD2	10	0.26
(2,277)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD2	8	0.26
(2,276)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	6	0.26
(2,260)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HD1	2	0.26
(2,260)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HD2	2	0.26
(2,260)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HD1	2	0.26
(2,260)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HD2	2	0.26
(2,260)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HD1	2	0.26
(2,260)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HD2	2	0.26
(2,248)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HB3	9	0.26
(2,248)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HB3	9	0.26
(2,245)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB2	4	0.26
(2,245)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB2	4	0.26
(2,186)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD21	1	0.26
(2,186)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD22	1	0.26
(2,186)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD23	1	0.26
(2,156)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HB	7	0.26
(2,147)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HG12	7	0.26
(2,135)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD11	8	0.26
(2,135)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD12	8	0.26
(2,135)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD13	8	0.26
(2,125)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HG	5	0.26
(2,125)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HG	9	0.26
(2,125)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HG	10	0.26
(2,118)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:H	5	0.26
(2,62)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD3	4	0.26
(2,31)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE2	6	0.26
(2,31)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE3	6	0.26
(1,531)	1:7:A:LEU:HB2	1:24:A:PRO:HA	8	0.26
(1,470)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	10	0.26
(1,470)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	10	0.26
(1,470)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	10	0.26
(1,298)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD21	6	0.26
(1,298)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD22	6	0.26
(1,298)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD23	6	0.26
(1,292)	1:11:A:TRP:HZ3	1:23:A:PRO:HG2	9	0.26
(1,264)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	4	0.26
(1,264)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	4	0.26
(1,264)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	4	0.26
(1,264)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	4	0.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,264)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	4	0.26
(1,264)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	4	0.26
(1,219)	1:21:A:ARG:HG2	1:21:A:ARG:HG3	5	0.26
(1,204)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HG2	10	0.26
(1,204)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HG3	10	0.26
(1,182)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HB2	4	0.26
(1,173)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD21	4	0.26
(1,173)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD22	4	0.26
(1,173)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD23	4	0.26
(1,169)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HA	9	0.26
(1,169)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HA	10	0.26
(1,66)	1:18:A:SER:HA	1:18:A:SER:HB2	4	0.26
(1,66)	1:18:A:SER:HA	1:18:A:SER:HB3	4	0.26
(1,66)	1:18:A:SER:HA	1:18:A:SER:HB2	6	0.26
(1,66)	1:18:A:SER:HA	1:18:A:SER:HB3	6	0.26
(1,57)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HB2	2	0.26
(1,57)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HB2	5	0.26
(1,26)	1:14:A:ASP:HA	1:14:A:ASP:HB2	1	0.26
(1,26)	1:14:A:ASP:HA	1:14:A:ASP:HB2	3	0.26
(1,26)	1:14:A:ASP:HA	1:14:A:ASP:HB2	5	0.26
(1,24)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	4	0.26
(1,24)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	4	0.26
(1,16)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	8	0.26
(1,16)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	8	0.26
(1,16)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	8	0.26
(1,8)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG21	8	0.26
(1,8)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG22	8	0.26
(1,8)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG23	8	0.26
(1,5)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HA	3	0.26
(1,3)	1:4:A:ALA:H	1:4:A:ALA:HA	7	0.26
(4,61)	1:11:A:TRP:HZ3	1:23:A:PRO:HG3	3	0.25
(4,55)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD21	5	0.25
(4,55)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD22	5	0.25
(4,55)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD23	5	0.25
(4,55)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD21	5	0.25
(4,55)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD22	5	0.25
(4,55)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD23	5	0.25
(4,41)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HE1	1	0.25
(4,41)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HE2	1	0.25
(4,26)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB3	1	0.25
(4,26)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB3	2	0.25
(4,23)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HG	4	0.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,13)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD3	7	0.25
(4,4)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	5	0.25
(4,4)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	5	0.25
(4,4)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	5	0.25
(3,342)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD11	10	0.25
(3,342)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD12	10	0.25
(3,342)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD13	10	0.25
(3,334)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB2	2	0.25
(3,334)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB2	2	0.25
(3,334)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB2	2	0.25
(3,311)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HD2	9	0.25
(3,311)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HD2	9	0.25
(3,311)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HD2	9	0.25
(3,298)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HG3	7	0.25
(3,298)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HG3	7	0.25
(3,298)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HG3	7	0.25
(3,289)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HD3	10	0.25
(3,268)	1:5:A:VAL:H	1:6:A:ARG:HB2	2	0.25
(3,264)	1:10:A:GLN:HG2	1:11:A:TRP:H	6	0.25
(3,264)	1:10:A:GLN:HG3	1:11:A:TRP:H	6	0.25
(3,225)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG2	7	0.25
(3,218)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HD2	8	0.25
(3,207)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HG	7	0.25
(3,207)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HG	7	0.25
(3,206)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB3	1	0.25
(3,206)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB3	1	0.25
(3,193)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HA	6	0.25
(3,193)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HA	6	0.25
(3,151)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD21	7	0.25
(3,151)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD22	7	0.25
(3,151)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD23	7	0.25
(3,85)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD3	2	0.25
(2,516)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD11	10	0.25
(2,516)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD12	10	0.25
(2,516)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD13	10	0.25
(2,502)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB2	2	0.25
(2,502)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB2	2	0.25
(2,502)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB2	2	0.25
(2,458)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HD2	9	0.25
(2,458)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HD2	9	0.25
(2,458)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HD2	9	0.25
(2,431)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HG3	7	0.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,431)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HG3	7	0.25
(2,431)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HG3	7	0.25
(2,404)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HD3	10	0.25
(2,364)	1:5:A:VAL:H	1:6:A:ARG:HB2	2	0.25
(2,359)	1:10:A:GLN:HG2	1:11:A:TRP:H	6	0.25
(2,359)	1:10:A:GLN:HG3	1:11:A:TRP:H	6	0.25
(2,291)	1:11:A:TRP:HZ3	1:23:A:PRO:HG3	3	0.25
(2,283)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG2	7	0.25
(2,274)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HD2	8	0.25
(2,267)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD21	5	0.25
(2,267)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD22	5	0.25
(2,267)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD23	5	0.25
(2,267)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD21	5	0.25
(2,267)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD22	5	0.25
(2,267)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD23	5	0.25
(2,257)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HG	7	0.25
(2,257)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HG	7	0.25
(2,256)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB3	1	0.25
(2,256)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB3	1	0.25
(2,234)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HA	6	0.25
(2,234)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HA	6	0.25
(2,233)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HE1	1	0.25
(2,233)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HE2	1	0.25
(2,186)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD21	7	0.25
(2,186)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD22	7	0.25
(2,186)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD23	7	0.25
(2,139)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB3	1	0.25
(2,139)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB3	2	0.25
(2,125)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HG	4	0.25
(2,104)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD3	2	0.25
(2,62)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD3	7	0.25
(2,15)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	5	0.25
(2,15)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	5	0.25
(2,15)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	5	0.25
(1,496)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HG2	2	0.25
(1,496)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HG2	3	0.25
(1,496)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HG2	4	0.25
(1,446)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD21	4	0.25
(1,446)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD22	4	0.25
(1,446)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD23	4	0.25
(1,446)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD21	4	0.25
(1,446)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD22	4	0.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,446)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD23	4	0.25
(1,377)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG3	1	0.25
(1,367)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD2	7	0.25
(1,348)	1:8:A:TYR:H	1:9:A:ILE:HD11	6	0.25
(1,348)	1:8:A:TYR:H	1:9:A:ILE:HD12	6	0.25
(1,348)	1:8:A:TYR:H	1:9:A:ILE:HD13	6	0.25
(1,342)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:H	4	0.25
(1,342)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:H	4	0.25
(1,342)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:H	4	0.25
(1,333)	1:11:A:TRP:HE1	1:23:A:PRO:HA	6	0.25
(1,332)	1:11:A:TRP:HE1	1:22:A:PRO:HG2	7	0.25
(1,332)	1:11:A:TRP:HE1	1:22:A:PRO:HG3	7	0.25
(1,331)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB2	8	0.25
(1,322)	1:11:A:TRP:HZ3	1:24:A:PRO:HD2	8	0.25
(1,268)	1:11:A:TRP:HZ2	1:22:A:PRO:HA	8	0.25
(1,264)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	5	0.25
(1,264)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	5	0.25
(1,264)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	5	0.25
(1,264)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	5	0.25
(1,264)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	5	0.25
(1,264)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	5	0.25
(1,206)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HB2	6	0.25
(1,206)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HB3	6	0.25
(1,206)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HB2	10	0.25
(1,206)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HB3	10	0.25
(1,148)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HG13	5	0.25
(1,148)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HG13	6	0.25
(1,108)	1:22:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	2	0.25
(1,105)	1:23:A:PRO:HD2	1:23:A:PRO:HG2	5	0.25
(1,92)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD2	7	0.25
(1,68)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HB2	1	0.25
(1,57)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HB2	1	0.25
(1,45)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HD2	2	0.25
(1,45)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HD3	2	0.25
(1,34)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HG2	8	0.25
(1,26)	1:14:A:ASP:HA	1:14:A:ASP:HB2	8	0.25
(1,12)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG11	2	0.25
(1,12)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG12	2	0.25
(1,12)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG13	2	0.25
(4,171)	1:12:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HD2	5	0.24
(4,171)	1:12:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HD2	5	0.24
(4,171)	1:12:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HD2	5	0.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,171)	1:12:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HD2	6	0.24
(4,171)	1:12:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HD2	6	0.24
(4,171)	1:12:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HD2	6	0.24
(4,158)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:HZ3	1	0.24
(4,158)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:HZ3	1	0.24
(4,144)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HE2	1	0.24
(4,144)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HE2	1	0.24
(4,144)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HE2	1	0.24
(4,144)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HE3	1	0.24
(4,144)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HE3	1	0.24
(4,144)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HE3	1	0.24
(4,124)	1:7:A:LEU:HB2	1:8:A:TYR:HB3	9	0.24
(4,107)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HB	7	0.24
(4,90)	1:13:A:LYS:HG3	1:14:A:ASP:H	10	0.24
(4,80)	1:11:A:TRP:HE1	1:24:A:PRO:HD2	4	0.24
(4,54)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE1	4	0.24
(4,54)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE2	4	0.24
(4,54)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE1	4	0.24
(4,54)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE2	4	0.24
(4,54)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE1	4	0.24
(4,54)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE2	4	0.24
(4,23)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HG	3	0.24
(3,350)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:HB2	1	0.24
(3,350)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:HB2	1	0.24
(3,350)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:HB2	1	0.24
(3,340)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HA	5	0.24
(3,340)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HA	5	0.24
(3,340)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HA	5	0.24
(3,338)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HD3	1	0.24
(3,338)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HD3	1	0.24
(3,338)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HD3	1	0.24
(3,313)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD11	9	0.24
(3,313)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD12	9	0.24
(3,313)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD13	9	0.24
(3,289)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HD3	6	0.24
(3,268)	1:5:A:VAL:H	1:6:A:ARG:HB2	6	0.24
(3,268)	1:5:A:VAL:H	1:6:A:ARG:HB2	10	0.24
(3,264)	1:10:A:GLN:HG2	1:11:A:TRP:H	5	0.24
(3,264)	1:10:A:GLN:HG3	1:11:A:TRP:H	5	0.24
(3,206)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB3	7	0.24
(3,206)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB3	7	0.24
(3,185)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG2	6	0.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,151)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD21	8	0.24
(3,151)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD22	8	0.24
(3,151)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD23	8	0.24
(3,85)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD3	9	0.24
(3,85)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD3	10	0.24
(3,83)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HG3	7	0.24
(2,530)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:HB2	1	0.24
(2,530)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:HB2	1	0.24
(2,530)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:HB2	1	0.24
(2,514)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HA	5	0.24
(2,514)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HA	5	0.24
(2,514)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HA	5	0.24
(2,509)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HD3	1	0.24
(2,509)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HD3	1	0.24
(2,509)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HD3	1	0.24
(2,508)	1:12:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HD2	5	0.24
(2,508)	1:12:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HD2	5	0.24
(2,508)	1:12:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HD2	5	0.24
(2,508)	1:12:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HD2	6	0.24
(2,508)	1:12:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HD2	6	0.24
(2,508)	1:12:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HD2	6	0.24
(2,476)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:HZ3	1	0.24
(2,476)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:HZ3	1	0.24
(2,464)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD11	9	0.24
(2,464)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD12	9	0.24
(2,464)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD13	9	0.24
(2,450)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HE2	1	0.24
(2,450)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HE2	1	0.24
(2,450)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HE2	1	0.24
(2,450)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HE3	1	0.24
(2,450)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HE3	1	0.24
(2,450)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HE3	1	0.24
(2,415)	1:7:A:LEU:HB2	1:8:A:TYR:HB3	9	0.24
(2,404)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HD3	6	0.24
(2,384)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HB	7	0.24
(2,364)	1:5:A:VAL:H	1:6:A:ARG:HB2	6	0.24
(2,364)	1:5:A:VAL:H	1:6:A:ARG:HB2	10	0.24
(2,359)	1:10:A:GLN:HG2	1:11:A:TRP:H	5	0.24
(2,359)	1:10:A:GLN:HG3	1:11:A:TRP:H	5	0.24
(2,351)	1:13:A:LYS:HG3	1:14:A:ASP:H	10	0.24
(2,334)	1:11:A:TRP:HE1	1:24:A:PRO:HD2	4	0.24
(2,263)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE1	4	0.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,263)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE2	4	0.24
(2,263)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE1	4	0.24
(2,263)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE2	4	0.24
(2,263)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE1	4	0.24
(2,263)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE2	4	0.24
(2,256)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB3	7	0.24
(2,256)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB3	7	0.24
(2,222)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG2	6	0.24
(2,186)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD21	8	0.24
(2,186)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD22	8	0.24
(2,186)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD23	8	0.24
(2,125)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HG	3	0.24
(2,104)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD3	9	0.24
(2,104)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD3	10	0.24
(2,102)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HG3	7	0.24
(1,518)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HE1	5	0.24
(1,518)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HE2	5	0.24
(1,507)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	5	0.24
(1,507)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	5	0.24
(1,507)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	5	0.24
(1,485)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HA	3	0.24
(1,440)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HB2	6	0.24
(1,440)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HB2	6	0.24
(1,440)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HB2	6	0.24
(1,440)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HB3	6	0.24
(1,440)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HB3	6	0.24
(1,440)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HB3	6	0.24
(1,435)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:HG	2	0.24
(1,435)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:HG	2	0.24
(1,435)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:HG	2	0.24
(1,428)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	8	0.24
(1,428)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	8	0.24
(1,428)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	8	0.24
(1,428)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	8	0.24
(1,428)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	8	0.24
(1,428)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	8	0.24
(1,428)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	8	0.24
(1,428)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	8	0.24
(1,428)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	8	0.24
(1,420)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	3	0.24
(1,420)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	3	0.24
(1,420)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	3	0.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,400)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD2	8	0.24
(1,360)	1:21:A:ARG:H	1:22:A:PRO:HD2	9	0.24
(1,358)	1:10:A:GLN:HB2	1:11:A:TRP:H	6	0.24
(1,339)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:H	4	0.24
(1,313)	1:11:A:TRP:HE3	1:24:A:PRO:HA	10	0.24
(1,292)	1:11:A:TRP:HZ3	1:23:A:PRO:HG2	10	0.24
(1,283)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG3	3	0.24
(1,259)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:HE1	5	0.24
(1,259)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:HE2	5	0.24
(1,259)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:HE1	5	0.24
(1,259)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:HE2	5	0.24
(1,259)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:HE1	5	0.24
(1,259)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:HE2	5	0.24
(1,245)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB2	5	0.24
(1,245)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB2	5	0.24
(1,206)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HB2	5	0.24
(1,206)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HB3	5	0.24
(1,192)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HD2	1	0.24
(1,192)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HD3	1	0.24
(1,192)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HD2	1	0.24
(1,192)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HD3	1	0.24
(1,188)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HE2	2	0.24
(1,188)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HE3	2	0.24
(1,188)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HE2	2	0.24
(1,188)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HE3	2	0.24
(1,188)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HE2	3	0.24
(1,188)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HE3	3	0.24
(1,188)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HE2	3	0.24
(1,188)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HE3	3	0.24
(1,188)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HE2	7	0.24
(1,188)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HE3	7	0.24
(1,188)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HE2	7	0.24
(1,188)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HE3	7	0.24
(1,188)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HE2	8	0.24
(1,188)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HE3	8	0.24
(1,188)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HE2	8	0.24
(1,188)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HE3	8	0.24
(1,188)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HE2	9	0.24
(1,188)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HE3	9	0.24
(1,188)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HE2	9	0.24
(1,188)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HE3	9	0.24
(1,188)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HE2	10	0.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,188)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HE3	10	0.24
(1,188)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HE2	10	0.24
(1,188)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HE3	10	0.24
(1,92)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD2	6	0.24
(1,57)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HB2	6	0.24
(1,49)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HD2	10	0.24
(1,49)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HD3	10	0.24
(1,49)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HD2	10	0.24
(1,49)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HD3	10	0.24
(1,34)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HG2	7	0.24
(1,26)	1:14:A:ASP:HA	1:14:A:ASP:HB2	7	0.24
(1,23)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HD1	2	0.24
(1,23)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HD2	2	0.24
(1,23)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HD1	4	0.24
(1,23)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HD2	4	0.24
(1,23)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HD1	9	0.24
(1,23)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HD2	9	0.24
(1,16)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	3	0.24
(1,16)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	3	0.24
(1,16)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	3	0.24
(1,12)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG11	3	0.24
(1,12)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG12	3	0.24
(1,12)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG13	3	0.24
(1,12)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG11	5	0.24
(1,12)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG12	5	0.24
(1,12)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG13	5	0.24
(1,5)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HA	7	0.24
(4,174)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HA	3	0.23
(4,174)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HA	3	0.23
(4,174)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HA	3	0.23
(4,174)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HA	5	0.23
(4,174)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HA	5	0.23
(4,174)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HA	5	0.23
(4,144)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HE2	3	0.23
(4,144)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HE2	3	0.23
(4,144)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HE2	3	0.23
(4,144)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HE3	3	0.23
(4,144)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HE3	3	0.23
(4,144)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HE3	3	0.23
(4,110)	1:23:A:PRO:HG2	1:25:A:SER:HB2	2	0.23
(4,110)	1:23:A:PRO:HG2	1:25:A:SER:HB3	2	0.23
(4,106)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG2	1	0.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,106)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG3	1	0.23
(4,79)	1:11:A:TRP:HE1	1:23:A:PRO:HA	3	0.23
(4,78)	1:11:A:TRP:HE1	1:22:A:PRO:HG2	5	0.23
(4,78)	1:11:A:TRP:HE1	1:22:A:PRO:HG3	5	0.23
(4,26)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB3	9	0.23
(3,334)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB2	6	0.23
(3,334)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB2	6	0.23
(3,334)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB2	6	0.23
(3,303)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD11	7	0.23
(3,303)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD12	7	0.23
(3,303)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD13	7	0.23
(3,303)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	7	0.23
(3,303)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	7	0.23
(3,303)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	7	0.23
(3,294)	1:10:A:GLN:HG2	1:13:A:LYS:HD2	7	0.23
(3,294)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:HD2	7	0.23
(3,294)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:HD3	7	0.23
(3,289)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HD3	5	0.23
(3,289)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HD3	9	0.23
(3,266)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:H	4	0.23
(3,227)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HB3	10	0.23
(3,218)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HD2	7	0.23
(3,151)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD21	3	0.23
(3,151)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD22	3	0.23
(3,151)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD23	3	0.23
(3,83)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HG3	3	0.23
(3,83)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HG3	4	0.23
(3,83)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HG3	8	0.23
(2,512)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HA	3	0.23
(2,512)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HA	3	0.23
(2,512)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HA	3	0.23
(2,512)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HA	5	0.23
(2,512)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HA	5	0.23
(2,512)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HA	5	0.23
(2,502)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB2	6	0.23
(2,502)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB2	6	0.23
(2,502)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB2	6	0.23
(2,450)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HE2	3	0.23
(2,450)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HE2	3	0.23
(2,450)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HE2	3	0.23
(2,450)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HE3	3	0.23
(2,450)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HE3	3	0.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,450)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HE3	3	0.23
(2,443)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD11	7	0.23
(2,443)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD12	7	0.23
(2,443)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD13	7	0.23
(2,443)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	7	0.23
(2,443)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	7	0.23
(2,443)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	7	0.23
(2,422)	1:10:A:GLN:HG2	1:13:A:LYS:HD2	7	0.23
(2,422)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:HD2	7	0.23
(2,422)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:HD3	7	0.23
(2,404)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HD3	5	0.23
(2,404)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HD3	9	0.23
(2,392)	1:23:A:PRO:HG2	1:25:A:SER:HB2	2	0.23
(2,392)	1:23:A:PRO:HG2	1:25:A:SER:HB3	2	0.23
(2,383)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG2	1	0.23
(2,383)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG3	1	0.23
(2,361)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:H	4	0.23
(2,333)	1:11:A:TRP:HE1	1:23:A:PRO:HA	3	0.23
(2,332)	1:11:A:TRP:HE1	1:22:A:PRO:HG2	5	0.23
(2,332)	1:11:A:TRP:HE1	1:22:A:PRO:HG3	5	0.23
(2,285)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HB3	10	0.23
(2,274)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HD2	7	0.23
(2,186)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD21	3	0.23
(2,186)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD22	3	0.23
(2,186)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD23	3	0.23
(2,139)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB3	9	0.23
(2,102)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HG3	3	0.23
(2,102)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HG3	4	0.23
(2,102)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HG3	8	0.23
(1,513)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD11	6	0.23
(1,513)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD12	6	0.23
(1,513)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD13	6	0.23
(1,435)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:HG	5	0.23
(1,435)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:HG	5	0.23
(1,435)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:HG	5	0.23
(1,428)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	1	0.23
(1,428)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	1	0.23
(1,428)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	1	0.23
(1,428)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	1	0.23
(1,428)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	1	0.23
(1,428)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	1	0.23
(1,428)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	1	0.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,428)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	1	0.23
(1,428)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	1	0.23
(1,409)	1:23:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	5	0.23
(1,391)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HD2	8	0.23
(1,374)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	4	0.23
(1,374)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB3	4	0.23
(1,369)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HB2	4	0.23
(1,360)	1:21:A:ARG:H	1:22:A:PRO:HD2	5	0.23
(1,346)	1:12:A:LEU:HD11	1:14:A:ASP:H	6	0.23
(1,346)	1:12:A:LEU:HD12	1:14:A:ASP:H	6	0.23
(1,346)	1:12:A:LEU:HD13	1:14:A:ASP:H	6	0.23
(1,283)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG3	6	0.23
(1,264)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	3	0.23
(1,264)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	3	0.23
(1,264)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	3	0.23
(1,264)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	3	0.23
(1,264)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	3	0.23
(1,264)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	3	0.23
(1,188)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HE2	4	0.23
(1,188)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HE3	4	0.23
(1,188)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HE2	4	0.23
(1,188)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HE3	4	0.23
(1,182)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HB2	3	0.23
(1,176)	1:12:A:LEU:HD21	1:12:A:LEU:HG	6	0.23
(1,176)	1:12:A:LEU:HD22	1:12:A:LEU:HG	6	0.23
(1,176)	1:12:A:LEU:HD23	1:12:A:LEU:HG	6	0.23
(1,176)	1:12:A:LEU:HD21	1:12:A:LEU:HG	8	0.23
(1,176)	1:12:A:LEU:HD22	1:12:A:LEU:HG	8	0.23
(1,176)	1:12:A:LEU:HD23	1:12:A:LEU:HG	8	0.23
(1,105)	1:23:A:PRO:HD2	1:23:A:PRO:HG2	6	0.23
(1,105)	1:23:A:PRO:HD2	1:23:A:PRO:HG2	8	0.23
(1,98)	1:24:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HG3	7	0.23
(1,68)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HB2	7	0.23
(1,66)	1:18:A:SER:HA	1:18:A:SER:HB2	2	0.23
(1,66)	1:18:A:SER:HA	1:18:A:SER:HB3	2	0.23
(1,49)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HD2	2	0.23
(1,49)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HD3	2	0.23
(1,49)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HD2	2	0.23
(1,49)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HD3	2	0.23
(1,49)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HD2	3	0.23
(1,49)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HD3	3	0.23
(1,49)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HD2	3	0.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,49)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HD3	3	0.23
(1,45)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HD2	10	0.23
(1,45)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HD3	10	0.23
(1,25)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	1	0.23
(1,25)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	1	0.23
(1,16)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	4	0.23
(1,16)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	4	0.23
(1,16)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	4	0.23
(1,5)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HA	10	0.23
(4,174)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HA	8	0.22
(4,174)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HA	8	0.22
(4,174)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HA	8	0.22
(4,165)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG3	3	0.22
(4,163)	1:8:A:TYR:HB2	1:24:A:PRO:HA	8	0.22
(4,142)	1:3:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG11	8	0.22
(4,142)	1:3:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG12	8	0.22
(4,142)	1:3:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG13	8	0.22
(4,142)	1:3:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG11	8	0.22
(4,142)	1:3:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG12	8	0.22
(4,142)	1:3:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG13	8	0.22
(4,82)	1:8:A:TYR:HB3	1:9:A:ILE:H	7	0.22
(4,77)	1:11:A:TRP:HE1	1:12:A:LEU:HD11	4	0.22
(4,77)	1:11:A:TRP:HE1	1:12:A:LEU:HD12	4	0.22
(4,77)	1:11:A:TRP:HE1	1:12:A:LEU:HD13	4	0.22
(4,61)	1:11:A:TRP:HZ3	1:23:A:PRO:HG3	2	0.22
(4,39)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HA	4	0.22
(4,39)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HA	4	0.22
(4,26)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB3	3	0.22
(4,23)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HG	2	0.22
(3,342)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD11	7	0.22
(3,342)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD12	7	0.22
(3,342)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD13	7	0.22
(3,338)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HD3	2	0.22
(3,338)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HD3	2	0.22
(3,338)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HD3	2	0.22
(3,307)	1:8:A:TYR:HB3	1:9:A:ILE:HD11	4	0.22
(3,307)	1:8:A:TYR:HB3	1:9:A:ILE:HD12	4	0.22
(3,307)	1:8:A:TYR:HB3	1:9:A:ILE:HD13	4	0.22
(3,303)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD11	8	0.22
(3,303)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD12	8	0.22
(3,303)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD13	8	0.22
(3,303)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	8	0.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,303)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	8	0.22
(3,303)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	8	0.22
(3,298)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HG3	4	0.22
(3,298)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HG3	4	0.22
(3,298)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HG3	4	0.22
(3,294)	1:10:A:GLN:HG2	1:13:A:LYS:HD2	3	0.22
(3,294)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:HD2	3	0.22
(3,294)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:HD3	3	0.22
(3,268)	1:5:A:VAL:H	1:6:A:ARG:HB2	5	0.22
(3,263)	1:10:A:GLN:HB2	1:11:A:TRP:H	7	0.22
(3,241)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HD2	5	0.22
(3,191)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HD1	10	0.22
(3,191)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HD2	10	0.22
(3,151)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD21	5	0.22
(3,151)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD22	5	0.22
(3,151)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD23	5	0.22
(3,151)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD21	6	0.22
(3,151)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD22	6	0.22
(3,151)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD23	6	0.22
(3,151)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD21	9	0.22
(3,151)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD22	9	0.22
(3,151)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD23	9	0.22
(3,85)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD3	1	0.22
(3,85)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD3	3	0.22
(3,83)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HG3	2	0.22
(3,36)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG2	5	0.22
(2,516)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD11	7	0.22
(2,516)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD12	7	0.22
(2,516)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD13	7	0.22
(2,512)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HA	8	0.22
(2,512)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HA	8	0.22
(2,512)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HA	8	0.22
(2,509)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HD3	2	0.22
(2,509)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HD3	2	0.22
(2,509)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HD3	2	0.22
(2,492)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG3	3	0.22
(2,487)	1:8:A:TYR:HB2	1:24:A:PRO:HA	8	0.22
(2,451)	1:8:A:TYR:HB3	1:9:A:ILE:HD11	4	0.22
(2,451)	1:8:A:TYR:HB3	1:9:A:ILE:HD12	4	0.22
(2,451)	1:8:A:TYR:HB3	1:9:A:ILE:HD13	4	0.22
(2,447)	1:3:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG11	8	0.22
(2,447)	1:3:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG12	8	0.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,447)	1:3:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG13	8	0.22
(2,447)	1:3:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG11	8	0.22
(2,447)	1:3:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG12	8	0.22
(2,447)	1:3:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG13	8	0.22
(2,443)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD11	8	0.22
(2,443)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD12	8	0.22
(2,443)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD13	8	0.22
(2,443)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	8	0.22
(2,443)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	8	0.22
(2,443)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	8	0.22
(2,431)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HG3	4	0.22
(2,431)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HG3	4	0.22
(2,431)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HG3	4	0.22
(2,422)	1:10:A:GLN:HG2	1:13:A:LYS:HD2	3	0.22
(2,422)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:HD2	3	0.22
(2,422)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:HD3	3	0.22
(2,364)	1:5:A:VAL:H	1:6:A:ARG:HB2	5	0.22
(2,358)	1:10:A:GLN:HB2	1:11:A:TRP:H	7	0.22
(2,338)	1:8:A:TYR:HB3	1:9:A:ILE:H	7	0.22
(2,329)	1:11:A:TRP:HE1	1:12:A:LEU:HD11	4	0.22
(2,329)	1:11:A:TRP:HE1	1:12:A:LEU:HD12	4	0.22
(2,329)	1:11:A:TRP:HE1	1:12:A:LEU:HD13	4	0.22
(2,309)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HD2	5	0.22
(2,291)	1:11:A:TRP:HZ3	1:23:A:PRO:HG3	2	0.22
(2,231)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HD1	10	0.22
(2,231)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HD2	10	0.22
(2,229)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HA	4	0.22
(2,229)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HA	4	0.22
(2,186)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD21	5	0.22
(2,186)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD22	5	0.22
(2,186)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD23	5	0.22
(2,186)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD21	6	0.22
(2,186)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD22	6	0.22
(2,186)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD23	6	0.22
(2,186)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD21	9	0.22
(2,186)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD22	9	0.22
(2,186)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD23	9	0.22
(2,139)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB3	3	0.22
(2,125)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HG	2	0.22
(2,104)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD3	1	0.22
(2,104)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD3	3	0.22
(2,102)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HG3	2	0.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,47)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG2	5	0.22
(1,376)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG2	9	0.22
(1,367)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD2	1	0.22
(1,360)	1:21:A:ARG:H	1:22:A:PRO:HD2	6	0.22
(1,345)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD11	7	0.22
(1,345)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD12	7	0.22
(1,345)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD13	7	0.22
(1,343)	1:12:A:LEU:HD21	1:13:A:LYS:H	4	0.22
(1,343)	1:12:A:LEU:HD22	1:13:A:LYS:H	4	0.22
(1,343)	1:12:A:LEU:HD23	1:13:A:LYS:H	4	0.22
(1,330)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HG2	4	0.22
(1,311)	1:11:A:TRP:HD1	1:19:A:SER:HB3	4	0.22
(1,302)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD11	8	0.22
(1,302)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD12	8	0.22
(1,302)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD13	8	0.22
(1,299)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD21	10	0.22
(1,299)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD22	10	0.22
(1,299)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD23	10	0.22
(1,283)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG3	2	0.22
(1,275)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HD3	8	0.22
(1,267)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD21	1	0.22
(1,267)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD22	1	0.22
(1,267)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD23	1	0.22
(1,267)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD21	1	0.22
(1,267)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD22	1	0.22
(1,267)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD23	1	0.22
(1,248)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HB3	5	0.22
(1,248)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HB3	5	0.22
(1,245)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB2	6	0.22
(1,245)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB2	6	0.22
(1,191)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HG2	7	0.22
(1,191)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HG2	7	0.22
(1,176)	1:12:A:LEU:HD21	1:12:A:LEU:HG	1	0.22
(1,176)	1:12:A:LEU:HD22	1:12:A:LEU:HG	1	0.22
(1,176)	1:12:A:LEU:HD23	1:12:A:LEU:HG	1	0.22
(1,176)	1:12:A:LEU:HD21	1:12:A:LEU:HG	5	0.22
(1,176)	1:12:A:LEU:HD22	1:12:A:LEU:HG	5	0.22
(1,176)	1:12:A:LEU:HD23	1:12:A:LEU:HG	5	0.22
(1,66)	1:18:A:SER:HA	1:18:A:SER:HB2	1	0.22
(1,66)	1:18:A:SER:HA	1:18:A:SER:HB3	1	0.22
(1,57)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HB2	3	0.22
(1,21)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE1	2	0.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,21)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE2	2	0.22
(1,16)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	2	0.22
(1,16)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	2	0.22
(1,16)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	2	0.22
(1,16)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	9	0.22
(1,16)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	9	0.22
(1,16)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	9	0.22
(1,16)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	10	0.22
(1,16)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	10	0.22
(1,16)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	10	0.22
(1,5)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HA	9	0.22
(4,145)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD11	6	0.21
(4,145)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD12	6	0.21
(4,145)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD13	6	0.21
(4,142)	1:3:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG11	7	0.21
(4,142)	1:3:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG12	7	0.21
(4,142)	1:3:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG13	7	0.21
(4,142)	1:3:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG11	7	0.21
(4,142)	1:3:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG12	7	0.21
(4,142)	1:3:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG13	7	0.21
(4,82)	1:8:A:TYR:HB3	1:9:A:ILE:H	6	0.21
(4,42)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HA	4	0.21
(4,42)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HA	4	0.21
(4,29)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HG12	8	0.21
(4,23)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HG	8	0.21
(3,340)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HA	7	0.21
(3,340)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HA	7	0.21
(3,340)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HA	7	0.21
(3,340)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HA	9	0.21
(3,340)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HA	9	0.21
(3,340)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HA	9	0.21
(3,338)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HD3	5	0.21
(3,338)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HD3	5	0.21
(3,338)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HD3	5	0.21
(3,338)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HD3	6	0.21
(3,338)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HD3	6	0.21
(3,338)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HD3	6	0.21
(3,334)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB2	4	0.21
(3,334)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB2	4	0.21
(3,334)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB2	4	0.21
(3,300)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HD2	1	0.21
(3,300)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HD2	1	0.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,300)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HD2	1	0.21
(3,300)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HD3	1	0.21
(3,300)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HD3	1	0.21
(3,300)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HD3	1	0.21
(3,298)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HG3	5	0.21
(3,298)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HG3	5	0.21
(3,298)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HG3	5	0.21
(3,268)	1:5:A:VAL:H	1:6:A:ARG:HB2	1	0.21
(3,268)	1:5:A:VAL:H	1:6:A:ARG:HB2	7	0.21
(3,266)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:H	5	0.21
(3,264)	1:10:A:GLN:HG2	1:11:A:TRP:H	4	0.21
(3,264)	1:10:A:GLN:HG3	1:11:A:TRP:H	4	0.21
(3,225)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG2	8	0.21
(3,224)	1:11:A:TRP:HZ2	1:24:A:PRO:HD2	1	0.21
(3,223)	1:11:A:TRP:HH2	1:24:A:PRO:HD2	4	0.21
(3,207)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HG	6	0.21
(3,207)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HG	6	0.21
(3,151)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD21	10	0.21
(3,151)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD22	10	0.21
(3,151)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD23	10	0.21
(3,144)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD11	3	0.21
(3,144)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD12	3	0.21
(3,144)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD13	3	0.21
(3,85)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD3	6	0.21
(3,83)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HG3	1	0.21
(3,36)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG2	6	0.21
(3,36)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG2	7	0.21
(2,514)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HA	7	0.21
(2,514)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HA	7	0.21
(2,514)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HA	7	0.21
(2,514)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HA	9	0.21
(2,514)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HA	9	0.21
(2,514)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HA	9	0.21
(2,509)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HD3	5	0.21
(2,509)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HD3	5	0.21
(2,509)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HD3	5	0.21
(2,509)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HD3	6	0.21
(2,509)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HD3	6	0.21
(2,509)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HD3	6	0.21
(2,502)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB2	4	0.21
(2,502)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB2	4	0.21
(2,502)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB2	4	0.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,452)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD11	6	0.21
(2,452)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD12	6	0.21
(2,452)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD13	6	0.21
(2,447)	1:3:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG11	7	0.21
(2,447)	1:3:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG12	7	0.21
(2,447)	1:3:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG13	7	0.21
(2,447)	1:3:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG11	7	0.21
(2,447)	1:3:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG12	7	0.21
(2,447)	1:3:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG13	7	0.21
(2,433)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HD2	1	0.21
(2,433)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HD2	1	0.21
(2,433)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HD2	1	0.21
(2,433)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HD3	1	0.21
(2,433)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HD3	1	0.21
(2,433)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HD3	1	0.21
(2,431)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HG3	5	0.21
(2,431)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HG3	5	0.21
(2,431)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HG3	5	0.21
(2,364)	1:5:A:VAL:H	1:6:A:ARG:HB2	1	0.21
(2,364)	1:5:A:VAL:H	1:6:A:ARG:HB2	7	0.21
(2,361)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:H	5	0.21
(2,359)	1:10:A:GLN:HG2	1:11:A:TRP:H	4	0.21
(2,359)	1:10:A:GLN:HG3	1:11:A:TRP:H	4	0.21
(2,338)	1:8:A:TYR:HB3	1:9:A:ILE:H	6	0.21
(2,283)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG2	8	0.21
(2,281)	1:11:A:TRP:HZ2	1:24:A:PRO:HD2	1	0.21
(2,280)	1:11:A:TRP:HH2	1:24:A:PRO:HD2	4	0.21
(2,257)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HG	6	0.21
(2,257)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HG	6	0.21
(2,235)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HA	4	0.21
(2,235)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HA	4	0.21
(2,186)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD21	10	0.21
(2,186)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD22	10	0.21
(2,186)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD23	10	0.21
(2,177)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD11	3	0.21
(2,177)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD12	3	0.21
(2,177)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD13	3	0.21
(2,147)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HG12	8	0.21
(2,125)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HG	8	0.21
(2,104)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD3	6	0.21
(2,102)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HG3	1	0.21
(2,47)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG2	6	0.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,47)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG2	7	0.21
(1,528)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HB	5	0.21
(1,528)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HB	5	0.21
(1,528)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HB	5	0.21
(1,420)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	9	0.21
(1,420)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	9	0.21
(1,420)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	9	0.21
(1,381)	1:3:A:GLU:HA	1:6:A:ARG:HD2	9	0.21
(1,381)	1:3:A:GLU:HA	1:6:A:ARG:HD3	9	0.21
(1,375)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HB2	4	0.21
(1,375)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HB2	5	0.21
(1,373)	1:7:A:LEU:HG	1:24:A:PRO:HA	5	0.21
(1,367)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD2	8	0.21
(1,360)	1:21:A:ARG:H	1:22:A:PRO:HD2	10	0.21
(1,352)	1:21:A:ARG:H	1:22:A:PRO:HB3	4	0.21
(1,343)	1:12:A:LEU:HD21	1:13:A:LYS:H	2	0.21
(1,343)	1:12:A:LEU:HD22	1:13:A:LYS:H	2	0.21
(1,343)	1:12:A:LEU:HD23	1:13:A:LYS:H	2	0.21
(1,303)	1:11:A:TRP:HZ3	1:23:A:PRO:HB2	1	0.21
(1,301)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD11	5	0.21
(1,301)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD12	5	0.21
(1,301)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD13	5	0.21
(1,235)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HA	2	0.21
(1,235)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HA	2	0.21
(1,191)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HG2	3	0.21
(1,191)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HG2	3	0.21
(1,191)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HG2	8	0.21
(1,191)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HG2	8	0.21
(1,176)	1:12:A:LEU:HD21	1:12:A:LEU:HG	2	0.21
(1,176)	1:12:A:LEU:HD22	1:12:A:LEU:HG	2	0.21
(1,176)	1:12:A:LEU:HD23	1:12:A:LEU:HG	2	0.21
(1,176)	1:12:A:LEU:HD21	1:12:A:LEU:HG	3	0.21
(1,176)	1:12:A:LEU:HD22	1:12:A:LEU:HG	3	0.21
(1,176)	1:12:A:LEU:HD23	1:12:A:LEU:HG	3	0.21
(1,176)	1:12:A:LEU:HD21	1:12:A:LEU:HG	7	0.21
(1,176)	1:12:A:LEU:HD22	1:12:A:LEU:HG	7	0.21
(1,176)	1:12:A:LEU:HD23	1:12:A:LEU:HG	7	0.21
(1,176)	1:12:A:LEU:HD21	1:12:A:LEU:HG	9	0.21
(1,176)	1:12:A:LEU:HD22	1:12:A:LEU:HG	9	0.21
(1,176)	1:12:A:LEU:HD23	1:12:A:LEU:HG	9	0.21
(1,108)	1:22:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	7	0.21
(1,105)	1:23:A:PRO:HD2	1:23:A:PRO:HG2	7	0.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,98)	1:24:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HG3	8	0.21
(1,66)	1:18:A:SER:HA	1:18:A:SER:HB2	9	0.21
(1,66)	1:18:A:SER:HA	1:18:A:SER:HB3	9	0.21
(1,49)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HD2	9	0.21
(1,49)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HD3	9	0.21
(1,49)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HD2	9	0.21
(1,49)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HD3	9	0.21
(1,25)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	2	0.21
(1,25)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	2	0.21
(1,25)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	3	0.21
(1,25)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	3	0.21
(1,21)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE1	3	0.21
(1,21)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE2	3	0.21
(1,20)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HD1	10	0.21
(1,20)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HD2	10	0.21
(1,16)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	5	0.21
(1,16)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	5	0.21
(1,16)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	5	0.21
(1,16)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	6	0.21
(1,16)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	6	0.21
(1,16)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	6	0.21
(1,5)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HA	6	0.21
(4,163)	1:8:A:TYR:HB2	1:24:A:PRO:HA	9	0.2
(4,144)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HE2	8	0.2
(4,144)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HE2	8	0.2
(4,144)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HE2	8	0.2
(4,144)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HE3	8	0.2
(4,144)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HE3	8	0.2
(4,144)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HE3	8	0.2
(4,140)	1:3:A:GLU:HB2	1:5:A:VAL:HG11	5	0.2
(4,140)	1:3:A:GLU:HB2	1:5:A:VAL:HG12	5	0.2
(4,140)	1:3:A:GLU:HB2	1:5:A:VAL:HG13	5	0.2
(4,140)	1:3:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG11	5	0.2
(4,140)	1:3:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG12	5	0.2
(4,140)	1:3:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG13	5	0.2
(4,120)	1:3:A:GLU:HB2	1:6:A:ARG:HD3	4	0.2
(4,120)	1:3:A:GLU:HB3	1:6:A:ARG:HD3	4	0.2
(4,107)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HB	9	0.2
(4,105)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	5	0.2
(4,64)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD11	4	0.2
(4,64)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD12	4	0.2
(4,64)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD13	4	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,29)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HG12	4	0.2
(4,29)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HG12	5	0.2
(4,26)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB3	7	0.2
(4,26)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB3	8	0.2
(4,26)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB3	10	0.2
(4,17)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD3	8	0.2
(4,14)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG2	4	0.2
(4,14)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG3	4	0.2
(3,338)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HD3	3	0.2
(3,338)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HD3	3	0.2
(3,338)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HD3	3	0.2
(3,298)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HG3	9	0.2
(3,298)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HG3	9	0.2
(3,298)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HG3	9	0.2
(3,287)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	8	0.2
(3,266)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:H	6	0.2
(3,240)	1:11:A:TRP:HD1	1:24:A:PRO:HD3	3	0.2
(3,207)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HG	9	0.2
(3,207)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HG	9	0.2
(3,206)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB3	6	0.2
(3,206)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB3	6	0.2
(3,201)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HB3	7	0.2
(3,201)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HB3	7	0.2
(3,193)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HA	8	0.2
(3,193)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HA	8	0.2
(3,191)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HD1	8	0.2
(3,191)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HD2	8	0.2
(3,144)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD11	2	0.2
(3,144)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD12	2	0.2
(3,144)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD13	2	0.2
(3,128)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG13	6	0.2
(3,83)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HG3	9	0.2
(3,83)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HG3	10	0.2
(3,36)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG2	8	0.2
(3,36)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG2	9	0.2
(2,509)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HD3	3	0.2
(2,509)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HD3	3	0.2
(2,509)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HD3	3	0.2
(2,487)	1:8:A:TYR:HB2	1:24:A:PRO:HA	9	0.2
(2,450)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HE2	8	0.2
(2,450)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HE2	8	0.2
(2,450)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HE2	8	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,450)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HE3	8	0.2
(2,450)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HE3	8	0.2
(2,450)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HE3	8	0.2
(2,442)	1:3:A:GLU:HB2	1:5:A:VAL:HG11	5	0.2
(2,442)	1:3:A:GLU:HB2	1:5:A:VAL:HG12	5	0.2
(2,442)	1:3:A:GLU:HB2	1:5:A:VAL:HG13	5	0.2
(2,442)	1:3:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG11	5	0.2
(2,442)	1:3:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG12	5	0.2
(2,442)	1:3:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG13	5	0.2
(2,431)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HG3	9	0.2
(2,431)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HG3	9	0.2
(2,431)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HG3	9	0.2
(2,410)	1:3:A:GLU:HB2	1:6:A:ARG:HD3	4	0.2
(2,410)	1:3:A:GLU:HB3	1:6:A:ARG:HD3	4	0.2
(2,399)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	8	0.2
(2,384)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HB	9	0.2
(2,382)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	5	0.2
(2,361)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:H	6	0.2
(2,308)	1:11:A:TRP:HD1	1:24:A:PRO:HD3	3	0.2
(2,297)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD11	4	0.2
(2,297)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD12	4	0.2
(2,297)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD13	4	0.2
(2,257)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HG	9	0.2
(2,257)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HG	9	0.2
(2,256)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB3	6	0.2
(2,256)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB3	6	0.2
(2,248)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HB3	7	0.2
(2,248)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HB3	7	0.2
(2,234)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HA	8	0.2
(2,234)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HA	8	0.2
(2,231)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HD1	8	0.2
(2,231)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HD2	8	0.2
(2,177)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD11	2	0.2
(2,177)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD12	2	0.2
(2,177)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD13	2	0.2
(2,158)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG13	6	0.2
(2,147)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HG12	4	0.2
(2,147)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HG12	5	0.2
(2,139)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB3	7	0.2
(2,139)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB3	8	0.2
(2,139)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB3	10	0.2
(2,102)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HG3	9	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,102)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HG3	10	0.2
(2,85)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD3	8	0.2
(2,78)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG2	4	0.2
(2,78)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG3	4	0.2
(2,47)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG2	8	0.2
(2,47)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG2	9	0.2
(1,519)	1:8:A:TYR:HE1	1:25:A:SER:HA	1	0.2
(1,519)	1:8:A:TYR:HE2	1:25:A:SER:HA	1	0.2
(1,491)	1:8:A:TYR:HB2	1:24:A:PRO:HB3	1	0.2
(1,399)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	1	0.2
(1,399)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	5	0.2
(1,377)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG3	5	0.2
(1,375)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HB2	1	0.2
(1,365)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:H	7	0.2
(1,365)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:H	7	0.2
(1,365)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:H	7	0.2
(1,352)	1:21:A:ARG:H	1:22:A:PRO:HB3	9	0.2
(1,323)	1:11:A:TRP:HE1	1:11:A:TRP:HH2	5	0.2
(1,273)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD3	1	0.2
(1,263)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE1	2	0.2
(1,263)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE2	2	0.2
(1,263)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE1	2	0.2
(1,263)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE2	2	0.2
(1,263)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE1	2	0.2
(1,263)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE2	2	0.2
(1,207)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HG2	4	0.2
(1,189)	1:13:A:LYS:HE2	1:13:A:LYS:HG2	3	0.2
(1,189)	1:13:A:LYS:HE3	1:13:A:LYS:HG2	3	0.2
(1,188)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HE2	1	0.2
(1,188)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HE3	1	0.2
(1,188)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HE2	1	0.2
(1,188)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HE3	1	0.2
(1,176)	1:12:A:LEU:HD21	1:12:A:LEU:HG	4	0.2
(1,176)	1:12:A:LEU:HD22	1:12:A:LEU:HG	4	0.2
(1,176)	1:12:A:LEU:HD23	1:12:A:LEU:HG	4	0.2
(1,176)	1:12:A:LEU:HD21	1:12:A:LEU:HG	10	0.2
(1,176)	1:12:A:LEU:HD22	1:12:A:LEU:HG	10	0.2
(1,176)	1:12:A:LEU:HD23	1:12:A:LEU:HG	10	0.2
(1,89)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG2	4	0.2
(1,70)	1:19:A:SER:HA	1:19:A:SER:HB3	6	0.2
(1,49)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HD2	8	0.2
(1,49)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HD3	8	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,49)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HD2	8	0.2
(1,49)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HD3	8	0.2
(1,45)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HD2	3	0.2
(1,45)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HD3	3	0.2
(1,24)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	9	0.2
(1,24)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	9	0.2
(1,20)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HD1	4	0.2
(1,20)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HD2	4	0.2
(4,174)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HA	2	0.19
(4,174)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HA	2	0.19
(4,174)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HA	2	0.19
(4,174)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HA	4	0.19
(4,174)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HA	4	0.19
(4,174)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HA	4	0.19
(4,165)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG3	9	0.19
(4,165)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG3	10	0.19
(4,142)	1:3:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG11	6	0.19
(4,142)	1:3:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG12	6	0.19
(4,142)	1:3:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG13	6	0.19
(4,142)	1:3:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG11	6	0.19
(4,142)	1:3:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG12	6	0.19
(4,142)	1:3:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG13	6	0.19
(4,117)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:HB3	5	0.19
(4,117)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:HB3	5	0.19
(4,117)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:HB3	5	0.19
(4,64)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD11	1	0.19
(4,64)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD12	1	0.19
(4,64)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD13	1	0.19
(4,64)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD11	2	0.19
(4,64)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD12	2	0.19
(4,64)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD13	2	0.19
(4,54)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE1	8	0.19
(4,54)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE2	8	0.19
(4,54)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE1	8	0.19
(4,54)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE2	8	0.19
(4,54)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE1	8	0.19
(4,54)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE2	8	0.19
(4,29)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HG12	2	0.19
(4,29)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HG12	3	0.19
(4,29)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HG12	6	0.19
(3,342)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD11	5	0.19
(3,342)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD12	5	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,342)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD13	5	0.19
(3,340)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HA	1	0.19
(3,340)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HA	1	0.19
(3,340)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HA	1	0.19
(3,338)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HD3	4	0.19
(3,338)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HD3	4	0.19
(3,338)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HD3	4	0.19
(3,334)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB2	5	0.19
(3,334)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB2	5	0.19
(3,334)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB2	5	0.19
(3,333)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD11	9	0.19
(3,333)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD12	9	0.19
(3,333)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD13	9	0.19
(3,333)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD11	10	0.19
(3,333)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD12	10	0.19
(3,333)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD13	10	0.19
(3,308)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HB3	4	0.19
(3,308)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HB3	4	0.19
(3,308)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HB3	4	0.19
(3,303)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD11	1	0.19
(3,303)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD12	1	0.19
(3,303)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD13	1	0.19
(3,303)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	1	0.19
(3,303)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	1	0.19
(3,303)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	1	0.19
(3,298)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HG3	10	0.19
(3,298)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HG3	10	0.19
(3,298)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HG3	10	0.19
(3,268)	1:5:A:VAL:H	1:6:A:ARG:HB2	8	0.19
(3,261)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:H	3	0.19
(3,261)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:H	3	0.19
(3,261)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:H	3	0.19
(3,240)	1:11:A:TRP:HD1	1:24:A:PRO:HD3	4	0.19
(3,223)	1:11:A:TRP:HH2	1:24:A:PRO:HD2	2	0.19
(3,220)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD2	10	0.19
(3,219)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	5	0.19
(3,202)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG2	10	0.19
(3,202)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG2	10	0.19
(3,196)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HD2	4	0.19
(3,196)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HD2	4	0.19
(3,185)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG2	1	0.19
(3,174)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD2	6	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,174)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD2	10	0.19
(3,148)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HG	4	0.19
(3,148)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HG	9	0.19
(3,85)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD3	7	0.19
(3,50)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD2	10	0.19
(3,36)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG2	2	0.19
(3,36)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG2	10	0.19
(2,516)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD11	5	0.19
(2,516)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD12	5	0.19
(2,516)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD13	5	0.19
(2,514)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HA	1	0.19
(2,514)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HA	1	0.19
(2,514)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HA	1	0.19
(2,512)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HA	2	0.19
(2,512)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HA	2	0.19
(2,512)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HA	2	0.19
(2,512)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HA	4	0.19
(2,512)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HA	4	0.19
(2,512)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HA	4	0.19
(2,509)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HD3	4	0.19
(2,509)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HD3	4	0.19
(2,509)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HD3	4	0.19
(2,502)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB2	5	0.19
(2,502)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB2	5	0.19
(2,502)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB2	5	0.19
(2,500)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD11	9	0.19
(2,500)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD12	9	0.19
(2,500)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD13	9	0.19
(2,500)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD11	10	0.19
(2,500)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD12	10	0.19
(2,500)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD13	10	0.19
(2,492)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG3	9	0.19
(2,492)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG3	10	0.19
(2,453)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HB3	4	0.19
(2,453)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HB3	4	0.19
(2,453)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HB3	4	0.19
(2,447)	1:3:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG11	6	0.19
(2,447)	1:3:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG12	6	0.19
(2,447)	1:3:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG13	6	0.19
(2,447)	1:3:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG11	6	0.19
(2,447)	1:3:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG12	6	0.19
(2,447)	1:3:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG13	6	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,443)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD11	1	0.19
(2,443)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD12	1	0.19
(2,443)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD13	1	0.19
(2,443)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	1	0.19
(2,443)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	1	0.19
(2,443)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	1	0.19
(2,431)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HG3	10	0.19
(2,431)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HG3	10	0.19
(2,431)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HG3	10	0.19
(2,407)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:HB3	5	0.19
(2,407)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:HB3	5	0.19
(2,407)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:HB3	5	0.19
(2,364)	1:5:A:VAL:H	1:6:A:ARG:HB2	8	0.19
(2,350)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:H	3	0.19
(2,350)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:H	3	0.19
(2,350)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:H	3	0.19
(2,308)	1:11:A:TRP:HD1	1:24:A:PRO:HD3	4	0.19
(2,297)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD11	1	0.19
(2,297)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD12	1	0.19
(2,297)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD13	1	0.19
(2,297)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD11	2	0.19
(2,297)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD12	2	0.19
(2,297)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD13	2	0.19
(2,280)	1:11:A:TRP:HH2	1:24:A:PRO:HD2	2	0.19
(2,277)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD2	10	0.19
(2,276)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	5	0.19
(2,263)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE1	8	0.19
(2,263)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE2	8	0.19
(2,263)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE1	8	0.19
(2,263)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE2	8	0.19
(2,263)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE1	8	0.19
(2,263)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE2	8	0.19
(2,250)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG2	10	0.19
(2,250)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG2	10	0.19
(2,240)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HD2	4	0.19
(2,240)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HD2	4	0.19
(2,222)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG2	1	0.19
(2,209)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD2	6	0.19
(2,209)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD2	10	0.19
(2,183)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HG	4	0.19
(2,183)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HG	9	0.19
(2,147)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HG12	2	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,147)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HG12	3	0.19
(2,147)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HG12	6	0.19
(2,104)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD3	7	0.19
(2,63)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD2	10	0.19
(2,47)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG2	2	0.19
(2,47)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG2	10	0.19
(1,448)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG11	2	0.19
(1,448)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG12	2	0.19
(1,448)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG13	2	0.19
(1,448)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG11	2	0.19
(1,448)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG12	2	0.19
(1,448)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG13	2	0.19
(1,420)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	10	0.19
(1,420)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	10	0.19
(1,420)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	10	0.19
(1,376)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG2	8	0.19
(1,376)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG2	10	0.19
(1,345)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD11	8	0.19
(1,345)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD12	8	0.19
(1,345)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD13	8	0.19
(1,323)	1:11:A:TRP:HE1	1:11:A:TRP:HH2	9	0.19
(1,323)	1:11:A:TRP:HE1	1:11:A:TRP:HH2	10	0.19
(1,313)	1:11:A:TRP:HE3	1:24:A:PRO:HA	8	0.19
(1,299)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD21	2	0.19
(1,299)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD22	2	0.19
(1,299)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD23	2	0.19
(1,299)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD21	3	0.19
(1,299)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD22	3	0.19
(1,299)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD23	3	0.19
(1,264)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	10	0.19
(1,264)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	10	0.19
(1,264)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	10	0.19
(1,264)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	10	0.19
(1,264)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	10	0.19
(1,264)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	10	0.19
(1,247)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB3	3	0.19
(1,247)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB3	3	0.19
(1,215)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HG3	1	0.19
(1,92)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD2	2	0.19
(1,68)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HB2	5	0.19
(1,49)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HD2	1	0.19
(1,49)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HD3	1	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,49)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HD2	1	0.19
(1,49)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HD3	1	0.19
(1,49)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HD2	5	0.19
(1,49)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HD3	5	0.19
(1,49)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HD2	5	0.19
(1,49)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HD3	5	0.19
(1,25)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	9	0.19
(1,25)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	9	0.19
(1,5)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HA	5	0.19
(4,171)	1:12:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HD2	2	0.18
(4,171)	1:12:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HD2	2	0.18
(4,171)	1:12:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HD2	2	0.18
(4,147)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD21	4	0.18
(4,147)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD22	4	0.18
(4,147)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD23	4	0.18
(4,147)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD21	8	0.18
(4,147)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD22	8	0.18
(4,147)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD23	8	0.18
(4,142)	1:3:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG11	1	0.18
(4,142)	1:3:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG12	1	0.18
(4,142)	1:3:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG13	1	0.18
(4,142)	1:3:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG11	1	0.18
(4,142)	1:3:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG12	1	0.18
(4,142)	1:3:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG13	1	0.18
(4,124)	1:7:A:LEU:HB2	1:8:A:TYR:HB3	4	0.18
(4,106)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG2	2	0.18
(4,106)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG3	2	0.18
(4,105)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	6	0.18
(4,55)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD21	3	0.18
(4,55)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD22	3	0.18
(4,55)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD23	3	0.18
(4,55)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD21	3	0.18
(4,55)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD22	3	0.18
(4,55)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD23	3	0.18
(4,17)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD3	7	0.18
(4,13)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD3	10	0.18
(3,342)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD11	2	0.18
(3,342)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD12	2	0.18
(3,342)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD13	2	0.18
(3,342)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD11	3	0.18
(3,342)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD12	3	0.18
(3,342)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD13	3	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,340)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HA	3	0.18
(3,340)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HA	3	0.18
(3,340)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HA	3	0.18
(3,333)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD11	8	0.18
(3,333)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD12	8	0.18
(3,333)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD13	8	0.18
(3,313)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD11	8	0.18
(3,313)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD12	8	0.18
(3,313)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD13	8	0.18
(3,303)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD11	6	0.18
(3,303)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD12	6	0.18
(3,303)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD13	6	0.18
(3,303)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	6	0.18
(3,303)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	6	0.18
(3,303)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	6	0.18
(3,303)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD11	10	0.18
(3,303)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD12	10	0.18
(3,303)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD13	10	0.18
(3,303)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	10	0.18
(3,303)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	10	0.18
(3,303)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	10	0.18
(3,298)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HG3	1	0.18
(3,298)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HG3	1	0.18
(3,298)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HG3	1	0.18
(3,293)	1:1:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	10	0.18
(3,293)	1:1:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	10	0.18
(3,293)	1:1:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	10	0.18
(3,293)	1:1:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB1	10	0.18
(3,293)	1:1:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB2	10	0.18
(3,293)	1:1:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB3	10	0.18
(3,279)	1:3:A:GLU:HA	1:6:A:ARG:HB2	6	0.18
(3,269)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:H	4	0.18
(3,269)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:H	4	0.18
(3,269)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:H	4	0.18
(3,223)	1:11:A:TRP:HH2	1:24:A:PRO:HD2	6	0.18
(3,218)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HD2	6	0.18
(3,193)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HA	4	0.18
(3,193)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HA	4	0.18
(3,148)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HG	2	0.18
(3,148)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HG	10	0.18
(3,130)	1:10:A:GLN:HB2	1:10:A:GLN:HG2	7	0.18
(3,130)	1:10:A:GLN:HB2	1:10:A:GLN:HG3	7	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,128)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG13	5	0.18
(3,85)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD3	8	0.18
(3,50)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD2	4	0.18
(3,36)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG2	1	0.18
(3,36)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG2	3	0.18
(2,516)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD11	2	0.18
(2,516)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD12	2	0.18
(2,516)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD13	2	0.18
(2,516)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD11	3	0.18
(2,516)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD12	3	0.18
(2,516)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD13	3	0.18
(2,514)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HA	3	0.18
(2,514)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HA	3	0.18
(2,514)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HA	3	0.18
(2,508)	1:12:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HD2	2	0.18
(2,508)	1:12:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HD2	2	0.18
(2,508)	1:12:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HD2	2	0.18
(2,500)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD11	8	0.18
(2,500)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD12	8	0.18
(2,500)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD13	8	0.18
(2,464)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD11	8	0.18
(2,464)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD12	8	0.18
(2,464)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD13	8	0.18
(2,455)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD21	4	0.18
(2,455)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD22	4	0.18
(2,455)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD23	4	0.18
(2,455)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD21	8	0.18
(2,455)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD22	8	0.18
(2,455)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD23	8	0.18
(2,447)	1:3:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG11	1	0.18
(2,447)	1:3:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG12	1	0.18
(2,447)	1:3:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG13	1	0.18
(2,447)	1:3:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG11	1	0.18
(2,447)	1:3:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG12	1	0.18
(2,447)	1:3:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG13	1	0.18
(2,443)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD11	6	0.18
(2,443)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD12	6	0.18
(2,443)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD13	6	0.18
(2,443)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	6	0.18
(2,443)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	6	0.18
(2,443)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	6	0.18
(2,443)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD11	10	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,443)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD12	10	0.18
(2,443)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD13	10	0.18
(2,443)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	10	0.18
(2,443)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	10	0.18
(2,443)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	10	0.18
(2,431)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HG3	1	0.18
(2,431)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HG3	1	0.18
(2,431)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HG3	1	0.18
(2,421)	1:1:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	10	0.18
(2,421)	1:1:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	10	0.18
(2,421)	1:1:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	10	0.18
(2,421)	1:1:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB1	10	0.18
(2,421)	1:1:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB2	10	0.18
(2,421)	1:1:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB3	10	0.18
(2,415)	1:7:A:LEU:HB2	1:8:A:TYR:HB3	4	0.18
(2,388)	1:3:A:GLU:HA	1:6:A:ARG:HB2	6	0.18
(2,383)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG2	2	0.18
(2,383)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG3	2	0.18
(2,382)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	6	0.18
(2,365)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:H	4	0.18
(2,365)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:H	4	0.18
(2,365)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:H	4	0.18
(2,280)	1:11:A:TRP:HH2	1:24:A:PRO:HD2	6	0.18
(2,274)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HD2	6	0.18
(2,267)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD21	3	0.18
(2,267)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD22	3	0.18
(2,267)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD23	3	0.18
(2,267)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD21	3	0.18
(2,267)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD22	3	0.18
(2,267)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD23	3	0.18
(2,234)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HA	4	0.18
(2,234)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HA	4	0.18
(2,183)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HG	2	0.18
(2,183)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HG	10	0.18
(2,161)	1:10:A:GLN:HB2	1:10:A:GLN:HG2	7	0.18
(2,161)	1:10:A:GLN:HB2	1:10:A:GLN:HG3	7	0.18
(2,158)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG13	5	0.18
(2,104)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD3	8	0.18
(2,85)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD3	7	0.18
(2,63)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD2	4	0.18
(2,62)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD3	10	0.18
(2,47)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG2	1	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,47)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG2	3	0.18
(1,506)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	6	0.18
(1,506)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	6	0.18
(1,506)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	6	0.18
(1,427)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG11	3	0.18
(1,427)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG12	3	0.18
(1,427)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG13	3	0.18
(1,427)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG11	3	0.18
(1,427)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG12	3	0.18
(1,427)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG13	3	0.18
(1,427)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG11	3	0.18
(1,427)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG12	3	0.18
(1,427)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG13	3	0.18
(1,427)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG11	6	0.18
(1,427)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG12	6	0.18
(1,427)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG13	6	0.18
(1,427)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG11	6	0.18
(1,427)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG12	6	0.18
(1,427)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG13	6	0.18
(1,427)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG11	6	0.18
(1,427)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG12	6	0.18
(1,427)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG13	6	0.18
(1,420)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	8	0.18
(1,420)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	8	0.18
(1,420)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	8	0.18
(1,409)	1:23:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	10	0.18
(1,345)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD11	1	0.18
(1,345)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD12	1	0.18
(1,345)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD13	1	0.18
(1,279)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HA	10	0.18
(1,232)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HD1	6	0.18
(1,232)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HD2	6	0.18
(1,197)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HA	10	0.18
(1,194)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HG3	2	0.18
(1,194)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HG3	2	0.18
(1,194)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HG3	3	0.18
(1,194)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HG3	3	0.18
(1,194)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HG3	7	0.18
(1,194)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HG3	7	0.18
(1,191)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HG2	10	0.18
(1,191)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HG2	10	0.18
(1,189)	1:13:A:LYS:HE2	1:13:A:LYS:HG2	9	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,189)	1:13:A:LYS:HE3	1:13:A:LYS:HG2	9	0.18
(1,189)	1:13:A:LYS:HE2	1:13:A:LYS:HG2	10	0.18
(1,189)	1:13:A:LYS:HE3	1:13:A:LYS:HG2	10	0.18
(1,188)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HE2	6	0.18
(1,188)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HE3	6	0.18
(1,188)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HE2	6	0.18
(1,188)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HE3	6	0.18
(1,182)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HB2	2	0.18
(1,79)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HB3	4	0.18
(1,68)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HB2	6	0.18
(1,51)	1:6:A:ARG:HD2	1:6:A:ARG:HG3	9	0.18
(1,51)	1:6:A:ARG:HD3	1:6:A:ARG:HG3	9	0.18
(1,49)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HD2	4	0.18
(1,49)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HD3	4	0.18
(1,49)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HD2	4	0.18
(1,49)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HD3	4	0.18
(1,49)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HD2	6	0.18
(1,49)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HD3	6	0.18
(1,49)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HD2	6	0.18
(1,49)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HD3	6	0.18
(1,49)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HD2	7	0.18
(1,49)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HD3	7	0.18
(1,49)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HD2	7	0.18
(1,49)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HD3	7	0.18
(1,42)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG2	6	0.18
(1,42)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG3	6	0.18
(1,9)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG11	9	0.18
(1,9)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG12	9	0.18
(1,9)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG13	9	0.18
(1,5)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HA	8	0.18
(4,174)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HA	6	0.17
(4,174)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HA	6	0.17
(4,174)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HA	6	0.17
(4,161)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HA	5	0.17
(4,158)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:HZ3	2	0.17
(4,158)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:HZ3	2	0.17
(4,124)	1:7:A:LEU:HB2	1:8:A:TYR:HB3	2	0.17
(4,106)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG2	7	0.17
(4,106)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG3	7	0.17
(4,77)	1:11:A:TRP:HE1	1:12:A:LEU:HD11	3	0.17
(4,77)	1:11:A:TRP:HE1	1:12:A:LEU:HD12	3	0.17
(4,77)	1:11:A:TRP:HE1	1:12:A:LEU:HD13	3	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,29)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HG12	9	0.17
(3,342)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD11	1	0.17
(3,342)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD12	1	0.17
(3,342)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD13	1	0.17
(3,340)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HA	2	0.17
(3,340)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HA	2	0.17
(3,340)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HA	2	0.17
(3,314)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG11	8	0.17
(3,314)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG12	8	0.17
(3,314)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG13	8	0.17
(3,308)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HB3	8	0.17
(3,308)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HB3	8	0.17
(3,308)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HB3	8	0.17
(3,303)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD11	3	0.17
(3,303)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD12	3	0.17
(3,303)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD13	3	0.17
(3,303)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	3	0.17
(3,303)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	3	0.17
(3,303)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	3	0.17
(3,293)	1:1:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	9	0.17
(3,293)	1:1:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	9	0.17
(3,293)	1:1:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	9	0.17
(3,293)	1:1:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB1	9	0.17
(3,293)	1:1:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB2	9	0.17
(3,293)	1:1:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB3	9	0.17
(3,264)	1:10:A:GLN:HG2	1:11:A:TRP:H	2	0.17
(3,264)	1:10:A:GLN:HG3	1:11:A:TRP:H	2	0.17
(3,223)	1:11:A:TRP:HH2	1:24:A:PRO:HD2	3	0.17
(3,198)	1:1:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HE1	4	0.17
(3,198)	1:1:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HE2	4	0.17
(3,198)	1:1:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HE1	4	0.17
(3,198)	1:1:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HE2	4	0.17
(3,130)	1:10:A:GLN:HB2	1:10:A:GLN:HG2	8	0.17
(3,130)	1:10:A:GLN:HB2	1:10:A:GLN:HG3	8	0.17
(3,96)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:H	5	0.17
(3,83)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HG3	6	0.17
(3,69)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD2	9	0.17
(2,516)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD11	1	0.17
(2,516)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD12	1	0.17
(2,516)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD13	1	0.17
(2,514)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HA	2	0.17
(2,514)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HA	2	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,514)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HA	2	0.17
(2,512)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HA	6	0.17
(2,512)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HA	6	0.17
(2,512)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HA	6	0.17
(2,485)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HA	5	0.17
(2,476)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:HZ3	2	0.17
(2,476)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:HZ3	2	0.17
(2,469)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG11	8	0.17
(2,469)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG12	8	0.17
(2,469)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG13	8	0.17
(2,453)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HB3	8	0.17
(2,453)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HB3	8	0.17
(2,453)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HB3	8	0.17
(2,443)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD11	3	0.17
(2,443)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD12	3	0.17
(2,443)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD13	3	0.17
(2,443)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	3	0.17
(2,443)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	3	0.17
(2,443)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	3	0.17
(2,421)	1:1:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	9	0.17
(2,421)	1:1:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	9	0.17
(2,421)	1:1:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	9	0.17
(2,421)	1:1:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB1	9	0.17
(2,421)	1:1:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB2	9	0.17
(2,421)	1:1:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB3	9	0.17
(2,415)	1:7:A:LEU:HB2	1:8:A:TYR:HB3	2	0.17
(2,383)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG2	7	0.17
(2,383)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG3	7	0.17
(2,359)	1:10:A:GLN:HG2	1:11:A:TRP:H	2	0.17
(2,359)	1:10:A:GLN:HG3	1:11:A:TRP:H	2	0.17
(2,329)	1:11:A:TRP:HE1	1:12:A:LEU:HD11	3	0.17
(2,329)	1:11:A:TRP:HE1	1:12:A:LEU:HD12	3	0.17
(2,329)	1:11:A:TRP:HE1	1:12:A:LEU:HD13	3	0.17
(2,280)	1:11:A:TRP:HH2	1:24:A:PRO:HD2	3	0.17
(2,244)	1:1:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HE1	4	0.17
(2,244)	1:1:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HE2	4	0.17
(2,244)	1:1:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HE1	4	0.17
(2,244)	1:1:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HE2	4	0.17
(2,161)	1:10:A:GLN:HB2	1:10:A:GLN:HG2	8	0.17
(2,161)	1:10:A:GLN:HB2	1:10:A:GLN:HG3	8	0.17
(2,147)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HG12	9	0.17
(2,117)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:H	5	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,102)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HG3	6	0.17
(2,86)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD2	9	0.17
(1,528)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HB	6	0.17
(1,528)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HB	6	0.17
(1,528)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HB	6	0.17
(1,496)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HG2	7	0.17
(1,496)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HG2	10	0.17
(1,477)	1:15:A:GLY:HA3	1:16:A:GLY:H	10	0.17
(1,451)	1:8:A:TYR:HB3	1:9:A:ILE:HD11	7	0.17
(1,451)	1:8:A:TYR:HB3	1:9:A:ILE:HD12	7	0.17
(1,451)	1:8:A:TYR:HB3	1:9:A:ILE:HD13	7	0.17
(1,440)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HB2	5	0.17
(1,440)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HB2	5	0.17
(1,440)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HB2	5	0.17
(1,440)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HB3	5	0.17
(1,440)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HB3	5	0.17
(1,440)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HB3	5	0.17
(1,428)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	6	0.17
(1,428)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	6	0.17
(1,428)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	6	0.17
(1,428)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	6	0.17
(1,428)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	6	0.17
(1,428)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	6	0.17
(1,428)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	6	0.17
(1,428)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	6	0.17
(1,428)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	6	0.17
(1,427)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG11	2	0.17
(1,427)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG12	2	0.17
(1,427)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG13	2	0.17
(1,427)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG11	2	0.17
(1,427)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG12	2	0.17
(1,427)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG13	2	0.17
(1,427)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG11	2	0.17
(1,427)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG12	2	0.17
(1,427)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG13	2	0.17
(1,420)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	2	0.17
(1,420)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	2	0.17
(1,420)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	2	0.17
(1,409)	1:23:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	9	0.17
(1,375)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HB2	2	0.17
(1,369)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HB2	6	0.17
(1,323)	1:11:A:TRP:HE1	1:11:A:TRP:HH2	1	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,323)	1:11:A:TRP:HE1	1:11:A:TRP:HH2	2	0.17
(1,299)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD21	9	0.17
(1,299)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD22	9	0.17
(1,299)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD23	9	0.17
(1,273)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD3	2	0.17
(1,267)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD21	7	0.17
(1,267)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD22	7	0.17
(1,267)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD23	7	0.17
(1,267)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD21	7	0.17
(1,267)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD22	7	0.17
(1,267)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD23	7	0.17
(1,223)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG3	1	0.17
(1,213)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HG2	5	0.17
(1,197)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HA	1	0.17
(1,197)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HA	9	0.17
(1,194)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HG3	8	0.17
(1,194)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HG3	8	0.17
(1,194)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HG3	9	0.17
(1,194)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HG3	9	0.17
(1,194)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HG3	10	0.17
(1,194)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HG3	10	0.17
(1,191)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HG2	2	0.17
(1,191)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HG2	2	0.17
(1,191)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HG2	9	0.17
(1,191)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HG2	9	0.17
(1,160)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD11	2	0.17
(1,160)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD12	2	0.17
(1,160)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD13	2	0.17
(1,160)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD11	3	0.17
(1,160)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD12	3	0.17
(1,160)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD13	3	0.17
(1,160)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD11	8	0.17
(1,160)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD12	8	0.17
(1,160)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD13	8	0.17
(1,143)	1:8:A:TYR:H	1:8:A:TYR:HB2	10	0.17
(1,114)	1:25:A:SER:HA	1:25:A:SER:HB2	3	0.17
(1,114)	1:25:A:SER:HA	1:25:A:SER:HB3	3	0.17
(1,51)	1:6:A:ARG:HD2	1:6:A:ARG:HG3	5	0.17
(1,51)	1:6:A:ARG:HD3	1:6:A:ARG:HG3	5	0.17
(1,25)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	8	0.17
(1,25)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	8	0.17
(1,25)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	10	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,25)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	10	0.17
(1,24)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	5	0.17
(1,24)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	5	0.17
(1,21)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE1	8	0.17
(1,21)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE2	8	0.17
(1,10)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG21	3	0.17
(1,10)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG22	3	0.17
(1,10)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG23	3	0.17
(1,10)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG21	6	0.17
(1,10)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG22	6	0.17
(1,10)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG23	6	0.17
(1,10)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG21	9	0.17
(1,10)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG22	9	0.17
(1,10)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG23	9	0.17
(1,10)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG21	10	0.17
(1,10)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG22	10	0.17
(1,10)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG23	10	0.17
(1,9)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG11	10	0.17
(1,9)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG12	10	0.17
(1,9)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG13	10	0.17
(4,181)	1:21:A:ARG:HG2	1:22:A:PRO:HD2	4	0.16
(4,147)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD21	3	0.16
(4,147)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD22	3	0.16
(4,147)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD23	3	0.16
(4,145)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD11	3	0.16
(4,145)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD12	3	0.16
(4,145)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD13	3	0.16
(4,107)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HB	4	0.16
(4,106)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG2	10	0.16
(4,106)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG3	10	0.16
(4,89)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:H	8	0.16
(4,89)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:H	8	0.16
(4,89)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:H	8	0.16
(4,82)	1:8:A:TYR:HB3	1:9:A:ILE:H	5	0.16
(4,64)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD11	3	0.16
(4,64)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD12	3	0.16
(4,64)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD13	3	0.16
(4,64)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD11	5	0.16
(4,64)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD12	5	0.16
(4,64)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD13	5	0.16
(4,64)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD11	7	0.16
(4,64)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD12	7	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,64)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD13	7	0.16
(4,29)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HG12	10	0.16
(3,342)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD11	6	0.16
(3,342)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD12	6	0.16
(3,342)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD13	6	0.16
(3,340)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HA	10	0.16
(3,340)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HA	10	0.16
(3,340)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HA	10	0.16
(3,333)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD11	1	0.16
(3,333)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD12	1	0.16
(3,333)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD13	1	0.16
(3,333)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD11	3	0.16
(3,333)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD12	3	0.16
(3,333)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD13	3	0.16
(3,303)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD11	5	0.16
(3,303)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD12	5	0.16
(3,303)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD13	5	0.16
(3,303)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	5	0.16
(3,303)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	5	0.16
(3,303)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	5	0.16
(3,298)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HG3	6	0.16
(3,298)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HG3	6	0.16
(3,298)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HG3	6	0.16
(3,292)	1:10:A:GLN:HG2	1:13:A:LYS:HE2	8	0.16
(3,292)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:HE2	8	0.16
(3,292)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:HE3	8	0.16
(3,279)	1:3:A:GLU:HA	1:6:A:ARG:HB2	4	0.16
(3,264)	1:10:A:GLN:HG2	1:11:A:TRP:H	1	0.16
(3,264)	1:10:A:GLN:HG3	1:11:A:TRP:H	1	0.16
(3,241)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HD2	3	0.16
(3,219)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	10	0.16
(3,205)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HG	6	0.16
(3,205)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HG	6	0.16
(3,196)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HD2	2	0.16
(3,196)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HD2	2	0.16
(3,176)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD3	9	0.16
(3,176)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HD3	9	0.16
(3,148)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HG	7	0.16
(3,144)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD11	4	0.16
(3,144)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD12	4	0.16
(3,144)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD13	4	0.16
(3,144)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD11	8	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,144)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD12	8	0.16
(3,144)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD13	8	0.16
(3,130)	1:10:A:GLN:HB2	1:10:A:GLN:HG2	3	0.16
(3,130)	1:10:A:GLN:HB2	1:10:A:GLN:HG3	3	0.16
(3,127)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG12	7	0.16
(3,113)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB2	7	0.16
(3,108)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HG	5	0.16
(3,69)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD2	10	0.16
(3,50)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD2	7	0.16
(3,36)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG2	4	0.16
(2,532)	1:21:A:ARG:HG2	1:22:A:PRO:HD2	4	0.16
(2,516)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD11	6	0.16
(2,516)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD12	6	0.16
(2,516)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD13	6	0.16
(2,514)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HA	10	0.16
(2,514)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HA	10	0.16
(2,514)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HA	10	0.16
(2,500)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD11	1	0.16
(2,500)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD12	1	0.16
(2,500)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD13	1	0.16
(2,500)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD11	3	0.16
(2,500)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD12	3	0.16
(2,500)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD13	3	0.16
(2,455)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD21	3	0.16
(2,455)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD22	3	0.16
(2,455)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD23	3	0.16
(2,452)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD11	3	0.16
(2,452)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD12	3	0.16
(2,452)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD13	3	0.16
(2,443)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD11	5	0.16
(2,443)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD12	5	0.16
(2,443)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD13	5	0.16
(2,443)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	5	0.16
(2,443)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	5	0.16
(2,443)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	5	0.16
(2,431)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HG3	6	0.16
(2,431)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HG3	6	0.16
(2,431)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HG3	6	0.16
(2,416)	1:10:A:GLN:HG2	1:13:A:LYS:HE2	8	0.16
(2,416)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:HE2	8	0.16
(2,416)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:HE3	8	0.16
(2,388)	1:3:A:GLU:HA	1:6:A:ARG:HB2	4	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,384)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HB	4	0.16
(2,383)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG2	10	0.16
(2,383)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG3	10	0.16
(2,359)	1:10:A:GLN:HG2	1:11:A:TRP:H	1	0.16
(2,359)	1:10:A:GLN:HG3	1:11:A:TRP:H	1	0.16
(2,349)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:H	8	0.16
(2,349)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:H	8	0.16
(2,349)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:H	8	0.16
(2,338)	1:8:A:TYR:HB3	1:9:A:ILE:H	5	0.16
(2,309)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HD2	3	0.16
(2,297)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD11	3	0.16
(2,297)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD12	3	0.16
(2,297)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD13	3	0.16
(2,297)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD11	5	0.16
(2,297)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD12	5	0.16
(2,297)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD13	5	0.16
(2,297)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD11	7	0.16
(2,297)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD12	7	0.16
(2,297)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD13	7	0.16
(2,276)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	10	0.16
(2,255)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HG	6	0.16
(2,255)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HG	6	0.16
(2,240)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HD2	2	0.16
(2,240)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HD2	2	0.16
(2,212)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD3	9	0.16
(2,212)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HD3	9	0.16
(2,183)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HG	7	0.16
(2,177)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD11	4	0.16
(2,177)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD12	4	0.16
(2,177)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD13	4	0.16
(2,177)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD11	8	0.16
(2,177)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD12	8	0.16
(2,177)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD13	8	0.16
(2,161)	1:10:A:GLN:HB2	1:10:A:GLN:HG2	3	0.16
(2,161)	1:10:A:GLN:HB2	1:10:A:GLN:HG3	3	0.16
(2,157)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG12	7	0.16
(2,147)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HG12	10	0.16
(2,138)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB2	7	0.16
(2,132)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HG	5	0.16
(2,86)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD2	10	0.16
(2,63)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD2	7	0.16
(2,47)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG2	4	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,519)	1:8:A:TYR:HE1	1:25:A:SER:HA	5	0.16
(1,519)	1:8:A:TYR:HE2	1:25:A:SER:HA	5	0.16
(1,513)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD11	2	0.16
(1,513)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD12	2	0.16
(1,513)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD13	2	0.16
(1,513)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD11	3	0.16
(1,513)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD12	3	0.16
(1,513)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD13	3	0.16
(1,496)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HG2	9	0.16
(1,473)	1:13:A:LYS:HB2	1:14:A:ASP:H	2	0.16
(1,473)	1:13:A:LYS:HB3	1:14:A:ASP:H	2	0.16
(1,446)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD21	2	0.16
(1,446)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD22	2	0.16
(1,446)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD23	2	0.16
(1,446)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD21	2	0.16
(1,446)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD22	2	0.16
(1,446)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD23	2	0.16
(1,409)	1:23:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	4	0.16
(1,375)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HB2	3	0.16
(1,352)	1:21:A:ARG:H	1:22:A:PRO:HB3	6	0.16
(1,352)	1:21:A:ARG:H	1:22:A:PRO:HB3	10	0.16
(1,345)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD11	3	0.16
(1,345)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD12	3	0.16
(1,345)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD13	3	0.16
(1,323)	1:11:A:TRP:HE1	1:11:A:TRP:HH2	3	0.16
(1,323)	1:11:A:TRP:HE1	1:11:A:TRP:HH2	6	0.16
(1,292)	1:11:A:TRP:HZ3	1:23:A:PRO:HG2	2	0.16
(1,291)	1:11:A:TRP:HZ3	1:23:A:PRO:HG3	8	0.16
(1,286)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG3	8	0.16
(1,283)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG3	5	0.16
(1,269)	1:11:A:TRP:HE1	1:11:A:TRP:HZ2	4	0.16
(1,269)	1:11:A:TRP:HE1	1:11:A:TRP:HZ2	7	0.16
(1,269)	1:11:A:TRP:HE1	1:11:A:TRP:HZ2	8	0.16
(1,211)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD2	3	0.16
(1,211)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HD2	3	0.16
(1,194)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HG3	4	0.16
(1,194)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HG3	4	0.16
(1,194)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HG3	5	0.16
(1,194)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HG3	5	0.16
(1,194)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HG3	6	0.16
(1,194)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HG3	6	0.16
(1,191)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HG2	1	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,191)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HG2	1	0.16
(1,188)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HE2	5	0.16
(1,188)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HE3	5	0.16
(1,188)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HE2	5	0.16
(1,188)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HE3	5	0.16
(1,146)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG13	1	0.16
(1,121)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HA	8	0.16
(1,114)	1:25:A:SER:HA	1:25:A:SER:HB2	2	0.16
(1,114)	1:25:A:SER:HA	1:25:A:SER:HB3	2	0.16
(1,89)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG2	3	0.16
(1,51)	1:6:A:ARG:HD2	1:6:A:ARG:HG3	10	0.16
(1,51)	1:6:A:ARG:HD3	1:6:A:ARG:HG3	10	0.16
(1,43)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HB2	8	0.16
(1,10)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG21	2	0.16
(1,10)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG22	2	0.16
(1,10)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG23	2	0.16
(1,10)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG21	5	0.16
(1,10)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG22	5	0.16
(1,10)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG23	5	0.16
(1,9)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG11	2	0.16
(1,9)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG12	2	0.16
(1,9)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG13	2	0.16
(4,147)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD21	1	0.15
(4,147)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD22	1	0.15
(4,147)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD23	1	0.15
(4,147)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD21	2	0.15
(4,147)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD22	2	0.15
(4,147)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD23	2	0.15
(4,125)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HG	6	0.15
(4,125)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HG	6	0.15
(4,61)	1:11:A:TRP:HZ3	1:23:A:PRO:HG3	4	0.15
(4,41)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HE1	4	0.15
(4,41)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HE2	4	0.15
(4,36)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD3	9	0.15
(4,26)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB3	4	0.15
(3,333)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD11	7	0.15
(3,333)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD12	7	0.15
(3,333)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD13	7	0.15
(3,323)	1:24:A:PRO:HD2	1:25:A:SER:H	4	0.15
(3,303)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD11	2	0.15
(3,303)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD12	2	0.15
(3,303)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD13	2	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,303)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	2	0.15
(3,303)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	2	0.15
(3,303)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	2	0.15
(3,303)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD11	9	0.15
(3,303)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD12	9	0.15
(3,303)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD13	9	0.15
(3,303)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	9	0.15
(3,303)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	9	0.15
(3,303)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	9	0.15
(3,300)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HD2	6	0.15
(3,300)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HD2	6	0.15
(3,300)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HD2	6	0.15
(3,300)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HD3	6	0.15
(3,300)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HD3	6	0.15
(3,300)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HD3	6	0.15
(3,292)	1:10:A:GLN:HG2	1:13:A:LYS:HE2	3	0.15
(3,292)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:HE2	3	0.15
(3,292)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:HE3	3	0.15
(3,279)	1:3:A:GLU:HA	1:6:A:ARG:HB2	10	0.15
(3,261)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:H	2	0.15
(3,261)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:H	2	0.15
(3,261)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:H	2	0.15
(3,241)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HD2	2	0.15
(3,240)	1:11:A:TRP:HD1	1:24:A:PRO:HD3	10	0.15
(3,237)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HG3	4	0.15
(3,211)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD11	5	0.15
(3,211)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD12	5	0.15
(3,211)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD13	5	0.15
(3,211)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD11	5	0.15
(3,211)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD12	5	0.15
(3,211)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD13	5	0.15
(3,194)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:HB2	4	0.15
(3,194)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:HB2	4	0.15
(3,194)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:HB2	9	0.15
(3,194)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:HB2	9	0.15
(3,191)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HD1	3	0.15
(3,191)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HD2	3	0.15
(3,148)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HG	1	0.15
(3,148)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HG	5	0.15
(3,148)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HG	6	0.15
(3,128)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG13	2	0.15
(3,128)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG13	8	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,127)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG12	1	0.15
(3,113)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB2	1	0.15
(3,113)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB2	6	0.15
(3,76)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD2	6	0.15
(3,69)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD2	2	0.15
(3,69)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD2	3	0.15
(2,500)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD11	7	0.15
(2,500)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD12	7	0.15
(2,500)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD13	7	0.15
(2,481)	1:24:A:PRO:HD2	1:25:A:SER:H	4	0.15
(2,455)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD21	1	0.15
(2,455)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD22	1	0.15
(2,455)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD23	1	0.15
(2,455)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD21	2	0.15
(2,455)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD22	2	0.15
(2,455)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD23	2	0.15
(2,443)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD11	2	0.15
(2,443)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD12	2	0.15
(2,443)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD13	2	0.15
(2,443)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	2	0.15
(2,443)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	2	0.15
(2,443)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	2	0.15
(2,443)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD11	9	0.15
(2,443)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD12	9	0.15
(2,443)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD13	9	0.15
(2,443)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	9	0.15
(2,443)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	9	0.15
(2,443)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	9	0.15
(2,433)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HD2	6	0.15
(2,433)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HD2	6	0.15
(2,433)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HD2	6	0.15
(2,433)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HD3	6	0.15
(2,433)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HD3	6	0.15
(2,433)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HD3	6	0.15
(2,417)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HG	6	0.15
(2,417)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HG	6	0.15
(2,416)	1:10:A:GLN:HG2	1:13:A:LYS:HE2	3	0.15
(2,416)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:HE2	3	0.15
(2,416)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:HE3	3	0.15
(2,388)	1:3:A:GLU:HA	1:6:A:ARG:HB2	10	0.15
(2,350)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:H	2	0.15
(2,350)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:H	2	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,350)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:H	2	0.15
(2,309)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HD2	2	0.15
(2,308)	1:11:A:TRP:HD1	1:24:A:PRO:HD3	10	0.15
(2,304)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HG3	4	0.15
(2,291)	1:11:A:TRP:HZ3	1:23:A:PRO:HG3	4	0.15
(2,265)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD11	5	0.15
(2,265)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD12	5	0.15
(2,265)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD13	5	0.15
(2,265)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD11	5	0.15
(2,265)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD12	5	0.15
(2,265)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD13	5	0.15
(2,236)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:HB2	4	0.15
(2,236)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:HB2	4	0.15
(2,236)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:HB2	9	0.15
(2,236)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:HB2	9	0.15
(2,233)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HE1	4	0.15
(2,233)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HE2	4	0.15
(2,231)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HD1	3	0.15
(2,231)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HD2	3	0.15
(2,210)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD3	9	0.15
(2,183)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HG	1	0.15
(2,183)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HG	5	0.15
(2,183)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HG	6	0.15
(2,158)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG13	2	0.15
(2,158)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG13	8	0.15
(2,157)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG12	1	0.15
(2,139)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB3	4	0.15
(2,138)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB2	1	0.15
(2,138)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB2	6	0.15
(2,93)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD2	6	0.15
(2,86)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD2	2	0.15
(2,86)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD2	3	0.15
(1,532)	1:21:A:ARG:HG2	1:22:A:PRO:HD2	1	0.15
(1,526)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HG3	4	0.15
(1,496)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HG2	8	0.15
(1,428)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	7	0.15
(1,428)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	7	0.15
(1,428)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	7	0.15
(1,428)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	7	0.15
(1,428)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	7	0.15
(1,428)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	7	0.15
(1,428)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	7	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,428)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	7	0.15
(1,428)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	7	0.15
(1,377)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG3	4	0.15
(1,369)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HB2	9	0.15
(1,302)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD11	5	0.15
(1,302)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD12	5	0.15
(1,302)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD13	5	0.15
(1,279)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HA	9	0.15
(1,259)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:HE1	3	0.15
(1,259)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:HE2	3	0.15
(1,259)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:HE1	3	0.15
(1,259)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:HE2	3	0.15
(1,259)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:HE1	3	0.15
(1,259)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:HE2	3	0.15
(1,259)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:HE1	10	0.15
(1,259)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:HE2	10	0.15
(1,259)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:HE1	10	0.15
(1,259)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:HE2	10	0.15
(1,259)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:HE1	10	0.15
(1,259)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:HE2	10	0.15
(1,246)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HB2	6	0.15
(1,246)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HB2	6	0.15
(1,244)	1:1:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HE1	10	0.15
(1,244)	1:1:A:GLU:HG2	1:8:A:TYR:HE2	10	0.15
(1,244)	1:1:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HE1	10	0.15
(1,244)	1:1:A:GLU:HG3	1:8:A:TYR:HE2	10	0.15
(1,197)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HA	4	0.15
(1,162)	1:10:A:GLN:HB3	1:10:A:GLN:HG2	8	0.15
(1,162)	1:10:A:GLN:HB3	1:10:A:GLN:HG3	8	0.15
(1,146)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG13	7	0.15
(1,143)	1:8:A:TYR:H	1:8:A:TYR:HB2	2	0.15
(1,143)	1:8:A:TYR:H	1:8:A:TYR:HB2	8	0.15
(1,124)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HB3	5	0.15
(1,119)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HG2	4	0.15
(1,119)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HG2	4	0.15
(1,114)	1:25:A:SER:HA	1:25:A:SER:HB2	5	0.15
(1,114)	1:25:A:SER:HA	1:25:A:SER:HB3	5	0.15
(1,92)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD2	9	0.15
(1,92)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD2	10	0.15
(1,51)	1:6:A:ARG:HD2	1:6:A:ARG:HG3	3	0.15
(1,51)	1:6:A:ARG:HD3	1:6:A:ARG:HG3	3	0.15
(1,51)	1:6:A:ARG:HD2	1:6:A:ARG:HG3	7	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,51)	1:6:A:ARG:HD3	1:6:A:ARG:HG3	7	0.15
(1,51)	1:6:A:ARG:HD2	1:6:A:ARG:HG3	8	0.15
(1,51)	1:6:A:ARG:HD3	1:6:A:ARG:HG3	8	0.15
(1,44)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HB3	1	0.15
(1,44)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HB3	2	0.15
(1,25)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	5	0.15
(1,25)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	5	0.15
(1,24)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	2	0.15
(1,24)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	2	0.15
(1,10)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG21	1	0.15
(1,10)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG22	1	0.15
(1,10)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG23	1	0.15
(1,10)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG21	7	0.15
(1,10)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG22	7	0.15
(1,10)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG23	7	0.15
(1,10)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG21	8	0.15
(1,10)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG22	8	0.15
(1,10)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG23	8	0.15
(1,9)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG11	3	0.15
(1,9)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG12	3	0.15
(1,9)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG13	3	0.15
(1,9)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG11	4	0.15
(1,9)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG12	4	0.15
(1,9)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG13	4	0.15
(1,9)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG11	8	0.15
(1,9)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG12	8	0.15
(1,9)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG13	8	0.15
(4,150)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HA	10	0.14
(4,150)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HA	10	0.14
(4,150)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HA	10	0.14
(4,147)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD21	9	0.14
(4,147)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD22	9	0.14
(4,147)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD23	9	0.14
(4,147)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD21	10	0.14
(4,147)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD22	10	0.14
(4,147)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD23	10	0.14
(4,142)	1:3:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG11	9	0.14
(4,142)	1:3:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG12	9	0.14
(4,142)	1:3:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG13	9	0.14
(4,142)	1:3:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG11	9	0.14
(4,142)	1:3:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG12	9	0.14
(4,142)	1:3:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG13	9	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,120)	1:3:A:GLU:HB2	1:6:A:ARG:HD3	2	0.14
(4,120)	1:3:A:GLU:HB3	1:6:A:ARG:HD3	2	0.14
(4,107)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HB	2	0.14
(4,106)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG2	9	0.14
(4,106)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG3	9	0.14
(4,82)	1:8:A:TYR:HB3	1:9:A:ILE:H	1	0.14
(4,30)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HB	3	0.14
(4,30)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HB	4	0.14
(4,26)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB3	6	0.14
(4,13)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD3	8	0.14
(3,347)	1:1:A:GLU:HG2	1:2:A:GLU:HA	4	0.14
(3,347)	1:1:A:GLU:HG3	1:2:A:GLU:HA	4	0.14
(3,338)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HD3	7	0.14
(3,338)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HD3	7	0.14
(3,338)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HD3	7	0.14
(3,336)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HD2	8	0.14
(3,336)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HD2	8	0.14
(3,336)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HD2	8	0.14
(3,333)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD11	2	0.14
(3,333)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD12	2	0.14
(3,333)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD13	2	0.14
(3,324)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HD1	5	0.14
(3,324)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HD2	5	0.14
(3,314)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG11	9	0.14
(3,314)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG12	9	0.14
(3,314)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG13	9	0.14
(3,292)	1:10:A:GLN:HG2	1:13:A:LYS:HE2	4	0.14
(3,292)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:HE2	4	0.14
(3,292)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:HE3	4	0.14
(3,287)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	7	0.14
(3,261)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:H	9	0.14
(3,261)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:H	9	0.14
(3,261)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:H	9	0.14
(3,237)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HG3	1	0.14
(3,237)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HG3	7	0.14
(3,227)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HB3	9	0.14
(3,223)	1:11:A:TRP:HH2	1:24:A:PRO:HD2	5	0.14
(3,202)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG2	8	0.14
(3,202)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG2	8	0.14
(3,193)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HA	3	0.14
(3,193)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HA	3	0.14
(3,174)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD2	9	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,128)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG13	4	0.14
(3,128)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG13	9	0.14
(3,128)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG13	10	0.14
(3,76)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD2	1	0.14
(3,69)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD2	1	0.14
(3,50)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD2	8	0.14
(3,50)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD2	9	0.14
(2,522)	1:1:A:GLU:HG2	1:2:A:GLU:HA	4	0.14
(2,522)	1:1:A:GLU:HG3	1:2:A:GLU:HA	4	0.14
(2,509)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HD3	7	0.14
(2,509)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HD3	7	0.14
(2,509)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HD3	7	0.14
(2,504)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HD2	8	0.14
(2,504)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HD2	8	0.14
(2,504)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HD2	8	0.14
(2,500)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD11	2	0.14
(2,500)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD12	2	0.14
(2,500)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD13	2	0.14
(2,484)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HD1	5	0.14
(2,484)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HD2	5	0.14
(2,469)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG11	9	0.14
(2,469)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG12	9	0.14
(2,469)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG13	9	0.14
(2,462)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HA	10	0.14
(2,462)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HA	10	0.14
(2,462)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HA	10	0.14
(2,455)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD21	9	0.14
(2,455)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD22	9	0.14
(2,455)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD23	9	0.14
(2,455)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD21	10	0.14
(2,455)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD22	10	0.14
(2,455)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD23	10	0.14
(2,447)	1:3:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG11	9	0.14
(2,447)	1:3:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG12	9	0.14
(2,447)	1:3:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG13	9	0.14
(2,447)	1:3:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG11	9	0.14
(2,447)	1:3:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG12	9	0.14
(2,447)	1:3:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG13	9	0.14
(2,416)	1:10:A:GLN:HG2	1:13:A:LYS:HE2	4	0.14
(2,416)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:HE2	4	0.14
(2,416)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:HE3	4	0.14
(2,410)	1:3:A:GLU:HB2	1:6:A:ARG:HD3	2	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,410)	1:3:A:GLU:HB3	1:6:A:ARG:HD3	2	0.14
(2,399)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	7	0.14
(2,384)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HB	2	0.14
(2,383)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG2	9	0.14
(2,383)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG3	9	0.14
(2,350)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:H	9	0.14
(2,350)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:H	9	0.14
(2,350)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:H	9	0.14
(2,338)	1:8:A:TYR:HB3	1:9:A:ILE:H	1	0.14
(2,304)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HG3	1	0.14
(2,304)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HG3	7	0.14
(2,285)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HB3	9	0.14
(2,280)	1:11:A:TRP:HH2	1:24:A:PRO:HD2	5	0.14
(2,250)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG2	8	0.14
(2,250)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG2	8	0.14
(2,234)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HA	3	0.14
(2,234)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HA	3	0.14
(2,209)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD2	9	0.14
(2,158)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG13	4	0.14
(2,158)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG13	9	0.14
(2,158)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG13	10	0.14
(2,156)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HB	3	0.14
(2,156)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HB	4	0.14
(2,139)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB3	6	0.14
(2,93)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD2	1	0.14
(2,86)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD2	1	0.14
(2,63)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD2	8	0.14
(2,63)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD2	9	0.14
(2,62)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD3	8	0.14
(1,518)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HE1	2	0.14
(1,518)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HE2	2	0.14
(1,484)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HD1	1	0.14
(1,484)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HD2	1	0.14
(1,427)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG11	1	0.14
(1,427)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG12	1	0.14
(1,427)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG13	1	0.14
(1,427)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG11	1	0.14
(1,427)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG12	1	0.14
(1,427)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG13	1	0.14
(1,427)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG11	1	0.14
(1,427)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG12	1	0.14
(1,427)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG13	1	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,409)	1:23:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	2	0.14
(1,343)	1:12:A:LEU:HD21	1:13:A:LYS:H	3	0.14
(1,343)	1:12:A:LEU:HD22	1:13:A:LYS:H	3	0.14
(1,343)	1:12:A:LEU:HD23	1:13:A:LYS:H	3	0.14
(1,328)	1:11:A:TRP:HZ2	1:11:A:TRP:HZ3	1	0.14
(1,328)	1:11:A:TRP:HZ2	1:11:A:TRP:HZ3	2	0.14
(1,328)	1:11:A:TRP:HZ2	1:11:A:TRP:HZ3	4	0.14
(1,328)	1:11:A:TRP:HZ2	1:11:A:TRP:HZ3	9	0.14
(1,292)	1:11:A:TRP:HZ3	1:23:A:PRO:HG2	4	0.14
(1,291)	1:11:A:TRP:HZ3	1:23:A:PRO:HG3	7	0.14
(1,255)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HG	9	0.14
(1,255)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HG	9	0.14
(1,229)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HA	7	0.14
(1,229)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HA	7	0.14
(1,207)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HG2	1	0.14
(1,197)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HA	3	0.14
(1,197)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HA	5	0.14
(1,191)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HG2	4	0.14
(1,191)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HG2	4	0.14
(1,162)	1:10:A:GLN:HB3	1:10:A:GLN:HG2	3	0.14
(1,162)	1:10:A:GLN:HB3	1:10:A:GLN:HG3	3	0.14
(1,162)	1:10:A:GLN:HB3	1:10:A:GLN:HG2	7	0.14
(1,162)	1:10:A:GLN:HB3	1:10:A:GLN:HG3	7	0.14
(1,160)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD11	9	0.14
(1,160)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD12	9	0.14
(1,160)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD13	9	0.14
(1,143)	1:8:A:TYR:H	1:8:A:TYR:HB2	4	0.14
(1,124)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HB3	3	0.14
(1,124)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HB3	6	0.14
(1,124)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HB3	9	0.14
(1,124)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HB3	10	0.14
(1,119)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HG2	1	0.14
(1,119)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HG2	1	0.14
(1,119)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HG2	2	0.14
(1,119)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HG2	2	0.14
(1,119)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HG2	3	0.14
(1,119)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HG2	3	0.14
(1,119)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HG2	8	0.14
(1,119)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HG2	8	0.14
(1,119)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HG2	9	0.14
(1,119)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HG2	9	0.14
(1,119)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HG2	10	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,119)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HG2	10	0.14
(1,106)	1:23:A:PRO:HD3	1:23:A:PRO:HG3	4	0.14
(1,92)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD2	1	0.14
(1,92)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD2	8	0.14
(1,89)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG2	1	0.14
(1,89)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG2	9	0.14
(1,89)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG2	10	0.14
(1,51)	1:6:A:ARG:HD2	1:6:A:ARG:HG3	2	0.14
(1,51)	1:6:A:ARG:HD3	1:6:A:ARG:HG3	2	0.14
(1,45)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HD2	1	0.14
(1,45)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HD3	1	0.14
(1,44)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HB3	4	0.14
(1,44)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HB3	6	0.14
(1,44)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HB3	9	0.14
(1,44)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HB3	10	0.14
(1,9)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG11	1	0.14
(1,9)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG12	1	0.14
(1,9)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG13	1	0.14
(1,9)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG11	5	0.14
(1,9)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG12	5	0.14
(1,9)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG13	5	0.14
(1,9)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG11	6	0.14
(1,9)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG12	6	0.14
(1,9)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG13	6	0.14
(4,174)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HA	9	0.13
(4,174)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HA	9	0.13
(4,174)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HA	9	0.13
(4,171)	1:12:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HD2	3	0.13
(4,171)	1:12:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HD2	3	0.13
(4,171)	1:12:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HD2	3	0.13
(4,158)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:HZ3	9	0.13
(4,158)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:HZ3	9	0.13
(4,147)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD21	7	0.13
(4,147)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD22	7	0.13
(4,147)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD23	7	0.13
(4,81)	1:12:A:LEU:HA	1:16:A:GLY:H	4	0.13
(4,79)	1:11:A:TRP:HE1	1:23:A:PRO:HA	1	0.13
(4,64)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD11	10	0.13
(4,64)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD12	10	0.13
(4,64)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD13	10	0.13
(4,30)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HB	2	0.13
(4,30)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HB	9	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,314)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG11	3	0.13
(3,314)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG12	3	0.13
(3,314)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG13	3	0.13
(3,307)	1:8:A:TYR:HB3	1:9:A:ILE:HD11	6	0.13
(3,307)	1:8:A:TYR:HB3	1:9:A:ILE:HD12	6	0.13
(3,307)	1:8:A:TYR:HB3	1:9:A:ILE:HD13	6	0.13
(3,283)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HD3	8	0.13
(3,261)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:H	10	0.13
(3,261)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:H	10	0.13
(3,261)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:H	10	0.13
(3,243)	1:11:A:TRP:HD1	1:19:A:SER:HB3	6	0.13
(3,241)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HD2	7	0.13
(3,240)	1:11:A:TRP:HD1	1:24:A:PRO:HD3	9	0.13
(3,237)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HG3	8	0.13
(3,235)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD21	10	0.13
(3,235)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD22	10	0.13
(3,235)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD23	10	0.13
(3,220)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD2	9	0.13
(3,219)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	7	0.13
(3,196)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HD2	9	0.13
(3,196)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HD2	9	0.13
(3,194)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:HB2	6	0.13
(3,194)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:HB2	6	0.13
(3,193)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HA	2	0.13
(3,193)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HA	2	0.13
(3,181)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG2	6	0.13
(3,181)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HG2	6	0.13
(3,181)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG2	9	0.13
(3,181)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HG2	9	0.13
(3,148)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HG	3	0.13
(3,113)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB2	5	0.13
(3,96)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:H	6	0.13
(3,96)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:H	7	0.13
(3,95)	1:3:A:GLU:HB2	1:3:A:GLU:HG2	8	0.13
(3,95)	1:3:A:GLU:HB2	1:3:A:GLU:HG3	8	0.13
(3,95)	1:3:A:GLU:HB3	1:3:A:GLU:HG3	8	0.13
(2,512)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HA	9	0.13
(2,512)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HA	9	0.13
(2,512)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HA	9	0.13
(2,508)	1:12:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HD2	3	0.13
(2,508)	1:12:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HD2	3	0.13
(2,508)	1:12:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HD2	3	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,476)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:HZ3	9	0.13
(2,476)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:HZ3	9	0.13
(2,469)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG11	3	0.13
(2,469)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG12	3	0.13
(2,469)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG13	3	0.13
(2,455)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD21	7	0.13
(2,455)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD22	7	0.13
(2,455)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD23	7	0.13
(2,451)	1:8:A:TYR:HB3	1:9:A:ILE:HD11	6	0.13
(2,451)	1:8:A:TYR:HB3	1:9:A:ILE:HD12	6	0.13
(2,451)	1:8:A:TYR:HB3	1:9:A:ILE:HD13	6	0.13
(2,393)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HD3	8	0.13
(2,350)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:H	10	0.13
(2,350)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:H	10	0.13
(2,350)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:H	10	0.13
(2,337)	1:12:A:LEU:HA	1:16:A:GLY:H	4	0.13
(2,333)	1:11:A:TRP:HE1	1:23:A:PRO:HA	1	0.13
(2,311)	1:11:A:TRP:HD1	1:19:A:SER:HB3	6	0.13
(2,309)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HD2	7	0.13
(2,308)	1:11:A:TRP:HD1	1:24:A:PRO:HD3	9	0.13
(2,304)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HG3	8	0.13
(2,300)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD21	10	0.13
(2,300)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD22	10	0.13
(2,300)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD23	10	0.13
(2,297)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD11	10	0.13
(2,297)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD12	10	0.13
(2,297)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD13	10	0.13
(2,277)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD2	9	0.13
(2,276)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	7	0.13
(2,240)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HD2	9	0.13
(2,240)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HD2	9	0.13
(2,236)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:HB2	6	0.13
(2,236)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:HB2	6	0.13
(2,234)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HA	2	0.13
(2,234)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HA	2	0.13
(2,217)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG2	6	0.13
(2,217)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HG2	6	0.13
(2,217)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG2	9	0.13
(2,217)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HG2	9	0.13
(2,183)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HG	3	0.13
(2,156)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HB	2	0.13
(2,156)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HB	9	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,138)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB2	5	0.13
(2,117)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:H	6	0.13
(2,117)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:H	7	0.13
(2,116)	1:3:A:GLU:HB2	1:3:A:GLU:HG2	8	0.13
(2,116)	1:3:A:GLU:HB2	1:3:A:GLU:HG3	8	0.13
(2,116)	1:3:A:GLU:HB3	1:3:A:GLU:HG3	8	0.13
(1,492)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG3	6	0.13
(1,484)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HD1	2	0.13
(1,484)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HD2	2	0.13
(1,477)	1:15:A:GLY:HA3	1:16:A:GLY:H	9	0.13
(1,473)	1:13:A:LYS:HB2	1:14:A:ASP:H	7	0.13
(1,473)	1:13:A:LYS:HB3	1:14:A:ASP:H	7	0.13
(1,441)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HB2	5	0.13
(1,441)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HB2	5	0.13
(1,441)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HB2	5	0.13
(1,441)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HB3	5	0.13
(1,441)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HB3	5	0.13
(1,441)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HB3	5	0.13
(1,400)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD2	4	0.13
(1,369)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HB2	10	0.13
(1,367)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD2	3	0.13
(1,365)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:H	5	0.13
(1,365)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:H	5	0.13
(1,365)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:H	5	0.13
(1,346)	1:12:A:LEU:HD11	1:14:A:ASP:H	3	0.13
(1,346)	1:12:A:LEU:HD12	1:14:A:ASP:H	3	0.13
(1,346)	1:12:A:LEU:HD13	1:14:A:ASP:H	3	0.13
(1,339)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:H	9	0.13
(1,328)	1:11:A:TRP:HZ2	1:11:A:TRP:HZ3	3	0.13
(1,328)	1:11:A:TRP:HZ2	1:11:A:TRP:HZ3	5	0.13
(1,328)	1:11:A:TRP:HZ2	1:11:A:TRP:HZ3	10	0.13
(1,301)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD11	7	0.13
(1,301)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD12	7	0.13
(1,301)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD13	7	0.13
(1,210)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD3	5	0.13
(1,168)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	6	0.13
(1,168)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	10	0.13
(1,152)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HG21	2	0.13
(1,152)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HG22	2	0.13
(1,152)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HG23	2	0.13
(1,152)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HG21	3	0.13
(1,152)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HG22	3	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,152)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HG23	3	0.13
(1,152)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HG21	8	0.13
(1,152)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HG22	8	0.13
(1,152)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HG23	8	0.13
(1,124)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HB3	7	0.13
(1,119)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HG2	5	0.13
(1,119)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HG2	5	0.13
(1,119)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HG2	6	0.13
(1,119)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HG2	6	0.13
(1,119)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HG2	7	0.13
(1,119)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HG2	7	0.13
(1,89)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG2	2	0.13
(1,45)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HD2	9	0.13
(1,45)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HD3	9	0.13
(1,38)	1:11:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HA	5	0.13
(1,35)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HG3	7	0.13
(1,21)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE1	4	0.13
(1,21)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE2	4	0.13
(1,10)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG21	4	0.13
(1,10)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG22	4	0.13
(1,10)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG23	4	0.13
(1,9)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG11	7	0.13
(1,9)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG12	7	0.13
(1,9)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG13	7	0.13
(4,150)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HA	2	0.12
(4,150)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HA	2	0.12
(4,150)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HA	2	0.12
(4,145)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD11	2	0.12
(4,145)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD12	2	0.12
(4,145)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD13	2	0.12
(4,145)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD11	5	0.12
(4,145)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD12	5	0.12
(4,145)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD13	5	0.12
(4,142)	1:3:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG11	4	0.12
(4,142)	1:3:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG12	4	0.12
(4,142)	1:3:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG13	4	0.12
(4,142)	1:3:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG11	4	0.12
(4,142)	1:3:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG12	4	0.12
(4,142)	1:3:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG13	4	0.12
(4,140)	1:3:A:GLU:HB2	1:5:A:VAL:HG11	7	0.12
(4,140)	1:3:A:GLU:HB2	1:5:A:VAL:HG12	7	0.12
(4,140)	1:3:A:GLU:HB2	1:5:A:VAL:HG13	7	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,140)	1:3:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG11	7	0.12
(4,140)	1:3:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG12	7	0.12
(4,140)	1:3:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG13	7	0.12
(4,107)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HB	1	0.12
(4,107)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HB	3	0.12
(4,106)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG2	5	0.12
(4,106)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG3	5	0.12
(4,30)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HB	8	0.12
(4,30)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HB	10	0.12
(3,347)	1:1:A:GLU:HG2	1:2:A:GLU:HA	10	0.12
(3,347)	1:1:A:GLU:HG3	1:2:A:GLU:HA	10	0.12
(3,338)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HD3	10	0.12
(3,338)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HD3	10	0.12
(3,338)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HD3	10	0.12
(3,336)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HD2	5	0.12
(3,336)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HD2	5	0.12
(3,336)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HD2	5	0.12
(3,334)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB2	1	0.12
(3,334)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB2	1	0.12
(3,334)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB2	1	0.12
(3,333)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD11	6	0.12
(3,333)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD12	6	0.12
(3,333)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD13	6	0.12
(3,308)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HB3	9	0.12
(3,308)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HB3	9	0.12
(3,308)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HB3	9	0.12
(3,308)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HB3	10	0.12
(3,308)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HB3	10	0.12
(3,308)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HB3	10	0.12
(3,300)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HD2	5	0.12
(3,300)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HD2	5	0.12
(3,300)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HD2	5	0.12
(3,300)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HD3	5	0.12
(3,300)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HD3	5	0.12
(3,300)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HD3	5	0.12
(3,300)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HD2	7	0.12
(3,300)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HD2	7	0.12
(3,300)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HD2	7	0.12
(3,300)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HD3	7	0.12
(3,300)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HD3	7	0.12
(3,300)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HD3	7	0.12
(3,280)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HA	2	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,280)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HA	2	0.12
(3,280)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HA	2	0.12
(3,280)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HA	3	0.12
(3,280)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HA	3	0.12
(3,280)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HA	3	0.12
(3,245)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HE3	8	0.12
(3,242)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HD3	10	0.12
(3,240)	1:11:A:TRP:HD1	1:24:A:PRO:HD3	2	0.12
(3,224)	1:11:A:TRP:HZ2	1:24:A:PRO:HD2	6	0.12
(3,195)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HD2	6	0.12
(3,195)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HD2	6	0.12
(3,191)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HD1	9	0.12
(3,191)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HD2	9	0.12
(3,185)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG2	4	0.12
(3,181)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG2	10	0.12
(3,181)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HG2	10	0.12
(3,177)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HG2	4	0.12
(3,155)	1:13:A:LYS:HE2	1:13:A:LYS:HG3	10	0.12
(3,155)	1:13:A:LYS:HE3	1:13:A:LYS:HG3	10	0.12
(3,148)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HG	8	0.12
(3,128)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG13	3	0.12
(3,84)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	4	0.12
(3,76)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD2	4	0.12
(3,76)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD2	5	0.12
(3,76)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD2	7	0.12
(3,69)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD2	5	0.12
(2,522)	1:1:A:GLU:HG2	1:2:A:GLU:HA	10	0.12
(2,522)	1:1:A:GLU:HG3	1:2:A:GLU:HA	10	0.12
(2,509)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HD3	10	0.12
(2,509)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HD3	10	0.12
(2,509)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HD3	10	0.12
(2,504)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HD2	5	0.12
(2,504)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HD2	5	0.12
(2,504)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HD2	5	0.12
(2,502)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB2	1	0.12
(2,502)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB2	1	0.12
(2,502)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB2	1	0.12
(2,500)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD11	6	0.12
(2,500)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD12	6	0.12
(2,500)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD13	6	0.12
(2,462)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HA	2	0.12
(2,462)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HA	2	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,462)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HA	2	0.12
(2,453)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HB3	9	0.12
(2,453)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HB3	9	0.12
(2,453)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HB3	9	0.12
(2,453)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HB3	10	0.12
(2,453)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HB3	10	0.12
(2,453)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HB3	10	0.12
(2,452)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD11	2	0.12
(2,452)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD12	2	0.12
(2,452)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD13	2	0.12
(2,452)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD11	5	0.12
(2,452)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD12	5	0.12
(2,452)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD13	5	0.12
(2,447)	1:3:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG11	4	0.12
(2,447)	1:3:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG12	4	0.12
(2,447)	1:3:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG13	4	0.12
(2,447)	1:3:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG11	4	0.12
(2,447)	1:3:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG12	4	0.12
(2,447)	1:3:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG13	4	0.12
(2,442)	1:3:A:GLU:HB2	1:5:A:VAL:HG11	7	0.12
(2,442)	1:3:A:GLU:HB2	1:5:A:VAL:HG12	7	0.12
(2,442)	1:3:A:GLU:HB2	1:5:A:VAL:HG13	7	0.12
(2,442)	1:3:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG11	7	0.12
(2,442)	1:3:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG12	7	0.12
(2,442)	1:3:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG13	7	0.12
(2,433)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HD2	5	0.12
(2,433)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HD2	5	0.12
(2,433)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HD2	5	0.12
(2,433)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HD3	5	0.12
(2,433)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HD3	5	0.12
(2,433)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HD3	5	0.12
(2,433)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HD2	7	0.12
(2,433)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HD2	7	0.12
(2,433)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HD2	7	0.12
(2,433)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HD3	7	0.12
(2,433)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HD3	7	0.12
(2,433)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HD3	7	0.12
(2,389)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HA	2	0.12
(2,389)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HA	2	0.12
(2,389)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HA	2	0.12
(2,389)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HA	3	0.12
(2,389)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HA	3	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,389)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HA	3	0.12
(2,384)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HB	1	0.12
(2,384)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HB	3	0.12
(2,383)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG2	5	0.12
(2,383)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG3	5	0.12
(2,316)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HE3	8	0.12
(2,310)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HD3	10	0.12
(2,308)	1:11:A:TRP:HD1	1:24:A:PRO:HD3	2	0.12
(2,281)	1:11:A:TRP:HZ2	1:24:A:PRO:HD2	6	0.12
(2,239)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HD2	6	0.12
(2,239)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HD2	6	0.12
(2,231)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HD1	9	0.12
(2,231)	1:4:A:ALA:HA	1:8:A:TYR:HD2	9	0.12
(2,222)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG2	4	0.12
(2,217)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG2	10	0.12
(2,217)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HG2	10	0.12
(2,213)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HG2	4	0.12
(2,190)	1:13:A:LYS:HE2	1:13:A:LYS:HG3	10	0.12
(2,190)	1:13:A:LYS:HE3	1:13:A:LYS:HG3	10	0.12
(2,183)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HG	8	0.12
(2,158)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG13	3	0.12
(2,156)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HB	8	0.12
(2,156)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HB	10	0.12
(2,103)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	4	0.12
(2,93)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD2	4	0.12
(2,93)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD2	5	0.12
(2,93)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD2	7	0.12
(2,86)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD2	5	0.12
(1,413)	1:1:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD2	1	0.12
(1,413)	1:1:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD3	1	0.12
(1,413)	1:1:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD2	1	0.12
(1,413)	1:1:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD3	1	0.12
(1,397)	1:14:A:ASP:HB2	1:19:A:SER:HB3	10	0.12
(1,392)	1:23:A:PRO:HG2	1:25:A:SER:HB2	10	0.12
(1,392)	1:23:A:PRO:HG2	1:25:A:SER:HB3	10	0.12
(1,373)	1:7:A:LEU:HG	1:24:A:PRO:HA	2	0.12
(1,371)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	1	0.12
(1,371)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	6	0.12
(1,339)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:H	10	0.12
(1,301)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD11	1	0.12
(1,301)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD12	1	0.12
(1,301)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD13	1	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,279)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HA	5	0.12
(1,264)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	9	0.12
(1,264)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	9	0.12
(1,264)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	9	0.12
(1,264)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	9	0.12
(1,264)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	9	0.12
(1,264)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	9	0.12
(1,197)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HA	6	0.12
(1,197)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HA	8	0.12
(1,191)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HG2	5	0.12
(1,191)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HG2	5	0.12
(1,166)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HD1	1	0.12
(1,160)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD11	4	0.12
(1,160)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD12	4	0.12
(1,160)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD13	4	0.12
(1,160)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD11	10	0.12
(1,160)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD12	10	0.12
(1,160)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD13	10	0.12
(1,152)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HG21	4	0.12
(1,152)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HG22	4	0.12
(1,152)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HG23	4	0.12
(1,152)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HG21	9	0.12
(1,152)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HG22	9	0.12
(1,152)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HG23	9	0.12
(1,152)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HG21	10	0.12
(1,152)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HG22	10	0.12
(1,152)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HG23	10	0.12
(1,150)	1:9:A:ILE:HD11	1:9:A:ILE:HG13	1	0.12
(1,150)	1:9:A:ILE:HD12	1:9:A:ILE:HG13	1	0.12
(1,150)	1:9:A:ILE:HD13	1:9:A:ILE:HG13	1	0.12
(1,150)	1:9:A:ILE:HD11	1:9:A:ILE:HG13	7	0.12
(1,150)	1:9:A:ILE:HD12	1:9:A:ILE:HG13	7	0.12
(1,150)	1:9:A:ILE:HD13	1:9:A:ILE:HG13	7	0.12
(1,124)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HB3	2	0.12
(1,124)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HB3	4	0.12
(1,124)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HB3	8	0.12
(1,121)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HA	4	0.12
(1,114)	1:25:A:SER:HA	1:25:A:SER:HB2	7	0.12
(1,114)	1:25:A:SER:HA	1:25:A:SER:HB3	7	0.12
(1,106)	1:23:A:PRO:HD3	1:23:A:PRO:HG3	8	0.12
(1,80)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD2	4	0.12
(1,57)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HB2	7	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,57)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HB2	8	0.12
(1,51)	1:6:A:ARG:HD2	1:6:A:ARG:HG3	6	0.12
(1,51)	1:6:A:ARG:HD3	1:6:A:ARG:HG3	6	0.12
(1,38)	1:11:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HA	1	0.12
(1,25)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	4	0.12
(1,25)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	4	0.12
(1,23)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HD1	10	0.12
(1,23)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HD2	10	0.12
(1,12)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG11	6	0.12
(1,12)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG12	6	0.12
(1,12)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG13	6	0.12
(4,174)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HA	10	0.11
(4,174)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HA	10	0.11
(4,174)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HA	10	0.11
(4,171)	1:12:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HD2	4	0.11
(4,171)	1:12:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HD2	4	0.11
(4,171)	1:12:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HD2	4	0.11
(4,161)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HA	7	0.11
(4,160)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HE1	2	0.11
(4,160)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HE2	2	0.11
(4,125)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HG	7	0.11
(4,125)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HG	7	0.11
(4,120)	1:3:A:GLU:HB2	1:6:A:ARG:HD3	3	0.11
(4,120)	1:3:A:GLU:HB3	1:6:A:ARG:HD3	3	0.11
(4,117)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:HB3	4	0.11
(4,117)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:HB3	4	0.11
(4,117)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:HB3	4	0.11
(4,96)	1:24:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	9	0.11
(4,96)	1:24:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	10	0.11
(4,81)	1:12:A:LEU:HA	1:16:A:GLY:H	1	0.11
(4,41)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HE1	2	0.11
(4,41)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HE2	2	0.11
(4,17)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD3	1	0.11
(3,347)	1:1:A:GLU:HG2	1:2:A:GLU:HA	1	0.11
(3,347)	1:1:A:GLU:HG3	1:2:A:GLU:HA	1	0.11
(3,343)	1:11:A:TRP:HA	1:12:A:LEU:HD21	5	0.11
(3,343)	1:11:A:TRP:HA	1:12:A:LEU:HD22	5	0.11
(3,343)	1:11:A:TRP:HA	1:12:A:LEU:HD23	5	0.11
(3,323)	1:24:A:PRO:HD2	1:25:A:SER:H	2	0.11
(3,315)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HA	3	0.11
(3,315)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HA	3	0.11
(3,315)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HA	3	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,315)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HA	9	0.11
(3,315)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HA	9	0.11
(3,315)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HA	9	0.11
(3,313)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD11	5	0.11
(3,313)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD12	5	0.11
(3,313)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD13	5	0.11
(3,311)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HD2	10	0.11
(3,311)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HD2	10	0.11
(3,311)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HD2	10	0.11
(3,307)	1:8:A:TYR:HB3	1:9:A:ILE:HD11	9	0.11
(3,307)	1:8:A:TYR:HB3	1:9:A:ILE:HD12	9	0.11
(3,307)	1:8:A:TYR:HB3	1:9:A:ILE:HD13	9	0.11
(3,297)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG13	6	0.11
(3,297)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG13	6	0.11
(3,297)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG13	6	0.11
(3,292)	1:10:A:GLN:HG2	1:13:A:LYS:HE2	5	0.11
(3,292)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:HE2	5	0.11
(3,292)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:HE3	5	0.11
(3,292)	1:10:A:GLN:HG2	1:13:A:LYS:HE2	7	0.11
(3,292)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:HE2	7	0.11
(3,292)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:HE3	7	0.11
(3,283)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HD3	4	0.11
(3,279)	1:3:A:GLU:HA	1:6:A:ARG:HB2	1	0.11
(3,262)	1:11:A:TRP:H	1:13:A:LYS:HB2	6	0.11
(3,262)	1:11:A:TRP:H	1:13:A:LYS:HB3	6	0.11
(3,261)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:H	1	0.11
(3,261)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:H	1	0.11
(3,261)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:H	1	0.11
(3,261)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:H	7	0.11
(3,261)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:H	7	0.11
(3,261)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:H	7	0.11
(3,246)	1:11:A:TRP:HZ3	1:23:A:PRO:HA	7	0.11
(3,245)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HE3	10	0.11
(3,242)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HD3	6	0.11
(3,240)	1:11:A:TRP:HD1	1:24:A:PRO:HD3	6	0.11
(3,235)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD21	2	0.11
(3,235)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD22	2	0.11
(3,235)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD23	2	0.11
(3,224)	1:11:A:TRP:HZ2	1:24:A:PRO:HD2	8	0.11
(3,223)	1:11:A:TRP:HH2	1:24:A:PRO:HD2	9	0.11
(3,193)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HA	10	0.11
(3,193)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HA	10	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,181)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG2	5	0.11
(3,181)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HG2	5	0.11
(3,176)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD3	10	0.11
(3,176)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HD3	10	0.11
(3,174)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD2	1	0.11
(3,174)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD2	2	0.11
(3,155)	1:13:A:LYS:HE2	1:13:A:LYS:HG3	2	0.11
(3,155)	1:13:A:LYS:HE3	1:13:A:LYS:HG3	2	0.11
(3,155)	1:13:A:LYS:HE2	1:13:A:LYS:HG3	9	0.11
(3,155)	1:13:A:LYS:HE3	1:13:A:LYS:HG3	9	0.11
(3,149)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HB3	2	0.11
(3,108)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HG	8	0.11
(3,83)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HG3	5	0.11
(3,76)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD2	3	0.11
(2,522)	1:1:A:GLU:HG2	1:2:A:GLU:HA	1	0.11
(2,522)	1:1:A:GLU:HG3	1:2:A:GLU:HA	1	0.11
(2,517)	1:11:A:TRP:HA	1:12:A:LEU:HD21	5	0.11
(2,517)	1:11:A:TRP:HA	1:12:A:LEU:HD22	5	0.11
(2,517)	1:11:A:TRP:HA	1:12:A:LEU:HD23	5	0.11
(2,512)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HA	10	0.11
(2,512)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HA	10	0.11
(2,512)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HA	10	0.11
(2,508)	1:12:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HD2	4	0.11
(2,508)	1:12:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HD2	4	0.11
(2,508)	1:12:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HD2	4	0.11
(2,485)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HA	7	0.11
(2,483)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HE1	2	0.11
(2,483)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HE2	2	0.11
(2,481)	1:24:A:PRO:HD2	1:25:A:SER:H	2	0.11
(2,471)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HA	3	0.11
(2,471)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HA	3	0.11
(2,471)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HA	3	0.11
(2,471)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HA	9	0.11
(2,471)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HA	9	0.11
(2,471)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HA	9	0.11
(2,464)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD11	5	0.11
(2,464)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD12	5	0.11
(2,464)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD13	5	0.11
(2,458)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HD2	10	0.11
(2,458)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HD2	10	0.11
(2,458)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HD2	10	0.11
(2,451)	1:8:A:TYR:HB3	1:9:A:ILE:HD11	9	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,451)	1:8:A:TYR:HB3	1:9:A:ILE:HD12	9	0.11
(2,451)	1:8:A:TYR:HB3	1:9:A:ILE:HD13	9	0.11
(2,429)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG13	6	0.11
(2,429)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG13	6	0.11
(2,429)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG13	6	0.11
(2,417)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HG	7	0.11
(2,417)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HG	7	0.11
(2,416)	1:10:A:GLN:HG2	1:13:A:LYS:HE2	5	0.11
(2,416)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:HE2	5	0.11
(2,416)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:HE3	5	0.11
(2,416)	1:10:A:GLN:HG2	1:13:A:LYS:HE2	7	0.11
(2,416)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:HE2	7	0.11
(2,416)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:HE3	7	0.11
(2,410)	1:3:A:GLU:HB2	1:6:A:ARG:HD3	3	0.11
(2,410)	1:3:A:GLU:HB3	1:6:A:ARG:HD3	3	0.11
(2,407)	1:4:A:ALA:HB1	1:8:A:TYR:HB3	4	0.11
(2,407)	1:4:A:ALA:HB2	1:8:A:TYR:HB3	4	0.11
(2,407)	1:4:A:ALA:HB3	1:8:A:TYR:HB3	4	0.11
(2,393)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HD3	4	0.11
(2,388)	1:3:A:GLU:HA	1:6:A:ARG:HB2	1	0.11
(2,362)	1:24:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	9	0.11
(2,362)	1:24:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	10	0.11
(2,356)	1:11:A:TRP:H	1:13:A:LYS:HB2	6	0.11
(2,356)	1:11:A:TRP:H	1:13:A:LYS:HB3	6	0.11
(2,350)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:H	1	0.11
(2,350)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:H	1	0.11
(2,350)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:H	1	0.11
(2,350)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:H	7	0.11
(2,350)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:H	7	0.11
(2,350)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:H	7	0.11
(2,337)	1:12:A:LEU:HA	1:16:A:GLY:H	1	0.11
(2,319)	1:11:A:TRP:HZ3	1:23:A:PRO:HA	7	0.11
(2,316)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HE3	10	0.11
(2,310)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HD3	6	0.11
(2,308)	1:11:A:TRP:HD1	1:24:A:PRO:HD3	6	0.11
(2,300)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD21	2	0.11
(2,300)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD22	2	0.11
(2,300)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD23	2	0.11
(2,281)	1:11:A:TRP:HZ2	1:24:A:PRO:HD2	8	0.11
(2,280)	1:11:A:TRP:HH2	1:24:A:PRO:HD2	9	0.11
(2,234)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HA	10	0.11
(2,234)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HA	10	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,233)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HE1	2	0.11
(2,233)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HE2	2	0.11
(2,217)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG2	5	0.11
(2,217)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HG2	5	0.11
(2,212)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD3	10	0.11
(2,212)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HD3	10	0.11
(2,209)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD2	1	0.11
(2,209)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD2	2	0.11
(2,190)	1:13:A:LYS:HE2	1:13:A:LYS:HG3	2	0.11
(2,190)	1:13:A:LYS:HE3	1:13:A:LYS:HG3	2	0.11
(2,190)	1:13:A:LYS:HE2	1:13:A:LYS:HG3	9	0.11
(2,190)	1:13:A:LYS:HE3	1:13:A:LYS:HG3	9	0.11
(2,184)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HB3	2	0.11
(2,132)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HG	8	0.11
(2,102)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HG3	5	0.11
(2,93)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD2	3	0.11
(2,85)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD3	1	0.11
(1,528)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HB	7	0.11
(1,528)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HB	7	0.11
(1,528)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HB	7	0.11
(1,483)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HE1	8	0.11
(1,483)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HE2	8	0.11
(1,459)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	10	0.11
(1,459)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	10	0.11
(1,459)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	10	0.11
(1,428)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	5	0.11
(1,428)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	5	0.11
(1,428)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	5	0.11
(1,428)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	5	0.11
(1,428)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	5	0.11
(1,428)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	5	0.11
(1,428)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	5	0.11
(1,428)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	5	0.11
(1,428)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	5	0.11
(1,390)	1:9:A:ILE:HA	1:13:A:LYS:HG3	6	0.11
(1,343)	1:12:A:LEU:HD21	1:13:A:LYS:H	8	0.11
(1,343)	1:12:A:LEU:HD22	1:13:A:LYS:H	8	0.11
(1,343)	1:12:A:LEU:HD23	1:13:A:LYS:H	8	0.11
(1,328)	1:11:A:TRP:HZ2	1:11:A:TRP:HZ3	6	0.11
(1,328)	1:11:A:TRP:HZ2	1:11:A:TRP:HZ3	8	0.11
(1,299)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD21	8	0.11
(1,299)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD22	8	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,299)	1:11:A:TRP:HD1	1:12:A:LEU:HD23	8	0.11
(1,286)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG3	7	0.11
(1,278)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HA	10	0.11
(1,269)	1:11:A:TRP:HE1	1:11:A:TRP:HZ2	6	0.11
(1,246)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HB2	4	0.11
(1,246)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HB2	4	0.11
(1,221)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HB3	4	0.11
(1,211)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD2	7	0.11
(1,211)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HD2	7	0.11
(1,197)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HA	2	0.11
(1,191)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HG2	6	0.11
(1,191)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HG2	6	0.11
(1,168)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	9	0.11
(1,152)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HG21	5	0.11
(1,152)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HG22	5	0.11
(1,152)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HG23	5	0.11
(1,152)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HG21	7	0.11
(1,152)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HG22	7	0.11
(1,152)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HG23	7	0.11
(1,150)	1:9:A:ILE:HD11	1:9:A:ILE:HG13	3	0.11
(1,150)	1:9:A:ILE:HD12	1:9:A:ILE:HG13	3	0.11
(1,150)	1:9:A:ILE:HD13	1:9:A:ILE:HG13	3	0.11
(1,124)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HB3	1	0.11
(1,106)	1:23:A:PRO:HD3	1:23:A:PRO:HG3	7	0.11
(1,89)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG2	5	0.11
(1,86)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD2	8	0.11
(1,57)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HB2	4	0.11
(1,51)	1:6:A:ARG:HD2	1:6:A:ARG:HG3	1	0.11
(1,51)	1:6:A:ARG:HD3	1:6:A:ARG:HG3	1	0.11
(1,44)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HB3	5	0.11
(1,43)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HB2	3	0.11
(1,38)	1:11:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HA	2	0.11
(1,38)	1:11:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HA	4	0.11
(1,38)	1:11:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HA	7	0.11
(1,31)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE2	1	0.11
(1,31)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE3	1	0.11
(1,22)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HD1	5	0.11
(1,22)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HD2	5	0.11
(4,171)	1:12:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HD2	8	0.1
(4,171)	1:12:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HD2	8	0.1
(4,171)	1:12:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HD2	8	0.1
(4,165)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG3	1	0.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,107)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HB	6	0.1
(4,107)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HB	10	0.1
(4,96)	1:24:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	8	0.1
(3,341)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HA	4	0.1
(3,341)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HA	4	0.1
(3,341)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HA	4	0.1
(3,323)	1:24:A:PRO:HD2	1:25:A:SER:H	1	0.1
(3,315)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HA	10	0.1
(3,315)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HA	10	0.1
(3,315)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HA	10	0.1
(3,279)	1:3:A:GLU:HA	1:6:A:ARG:HB2	8	0.1
(3,262)	1:11:A:TRP:H	1:13:A:LYS:HB2	3	0.1
(3,262)	1:11:A:TRP:H	1:13:A:LYS:HB3	3	0.1
(3,262)	1:11:A:TRP:H	1:13:A:LYS:HB2	8	0.1
(3,262)	1:11:A:TRP:H	1:13:A:LYS:HB3	8	0.1
(3,246)	1:11:A:TRP:HZ3	1:23:A:PRO:HA	8	0.1
(3,245)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HE3	9	0.1
(3,235)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD21	8	0.1
(3,235)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD22	8	0.1
(3,235)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD23	8	0.1
(3,235)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD21	9	0.1
(3,235)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD22	9	0.1
(3,235)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD23	9	0.1
(3,223)	1:11:A:TRP:HH2	1:24:A:PRO:HD2	10	0.1
(3,203)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG3	2	0.1
(3,203)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG3	2	0.1
(3,202)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG2	9	0.1
(3,202)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG2	9	0.1
(3,194)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:HB2	10	0.1
(3,194)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:HB2	10	0.1
(3,177)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HG2	7	0.1
(3,177)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HG2	8	0.1
(3,173)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HG3	5	0.1
(3,144)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD11	9	0.1
(3,144)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD12	9	0.1
(3,144)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD13	9	0.1
(3,76)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD2	2	0.1
(2,515)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HA	4	0.1
(2,515)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HA	4	0.1
(2,515)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HA	4	0.1
(2,508)	1:12:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HD2	8	0.1
(2,508)	1:12:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HD2	8	0.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,508)	1:12:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HD2	8	0.1
(2,492)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG3	1	0.1
(2,481)	1:24:A:PRO:HD2	1:25:A:SER:H	1	0.1
(2,471)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HA	10	0.1
(2,471)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HA	10	0.1
(2,471)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HA	10	0.1
(2,388)	1:3:A:GLU:HA	1:6:A:ARG:HB2	8	0.1
(2,384)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HB	6	0.1
(2,384)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HB	10	0.1
(2,362)	1:24:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	8	0.1
(2,356)	1:11:A:TRP:H	1:13:A:LYS:HB2	3	0.1
(2,356)	1:11:A:TRP:H	1:13:A:LYS:HB3	3	0.1
(2,356)	1:11:A:TRP:H	1:13:A:LYS:HB2	8	0.1
(2,356)	1:11:A:TRP:H	1:13:A:LYS:HB3	8	0.1
(2,319)	1:11:A:TRP:HZ3	1:23:A:PRO:HA	8	0.1
(2,316)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HE3	9	0.1
(2,300)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD21	8	0.1
(2,300)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD22	8	0.1
(2,300)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD23	8	0.1
(2,300)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD21	9	0.1
(2,300)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD22	9	0.1
(2,300)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD23	9	0.1
(2,280)	1:11:A:TRP:HH2	1:24:A:PRO:HD2	10	0.1
(2,251)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG3	2	0.1
(2,251)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG3	2	0.1
(2,250)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG2	9	0.1
(2,250)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG2	9	0.1
(2,236)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:HB2	10	0.1
(2,236)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:HB2	10	0.1
(2,213)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HG2	7	0.1
(2,213)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HG2	8	0.1
(2,208)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HG3	5	0.1
(2,177)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD11	9	0.1
(2,177)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD12	9	0.1
(2,177)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD13	9	0.1
(2,93)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD2	2	0.1
(1,484)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HD1	3	0.1
(1,484)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HD2	3	0.1
(1,435)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:HG	4	0.1
(1,435)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:HG	4	0.1
(1,435)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:HG	4	0.1
(1,422)	1:10:A:GLN:HG2	1:13:A:LYS:HD2	6	0.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,422)	1:10:A:GLN:HG2	1:13:A:LYS:HD3	6	0.1
(1,422)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:HD2	6	0.1
(1,422)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:HD3	6	0.1
(1,403)	1:19:A:SER:HB3	1:21:A:ARG:HG2	1	0.1
(1,392)	1:23:A:PRO:HG2	1:25:A:SER:HB2	1	0.1
(1,392)	1:23:A:PRO:HG2	1:25:A:SER:HB3	1	0.1
(1,371)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	2	0.1
(1,330)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HG2	1	0.1
(1,278)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HA	9	0.1
(1,269)	1:11:A:TRP:HE1	1:11:A:TRP:HZ2	1	0.1
(1,261)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	7	0.1
(1,261)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	7	0.1
(1,261)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	7	0.1
(1,261)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	7	0.1
(1,261)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	7	0.1
(1,261)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	7	0.1
(1,206)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HB2	7	0.1
(1,206)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HB3	7	0.1
(1,189)	1:13:A:LYS:HE2	1:13:A:LYS:HG2	7	0.1
(1,189)	1:13:A:LYS:HE3	1:13:A:LYS:HG2	7	0.1
(1,152)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HG21	6	0.1
(1,152)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HG22	6	0.1
(1,152)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HG23	6	0.1
(1,121)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HA	2	0.1
(1,57)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HB2	9	0.1
(1,51)	1:6:A:ARG:HD2	1:6:A:ARG:HG3	4	0.1
(1,51)	1:6:A:ARG:HD3	1:6:A:ARG:HG3	4	0.1
(1,38)	1:11:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HA	3	0.1

10 Dihedral-angle violation analysis (i)

No dihedral-angle restraints found