



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 7, 2026 – 11:57 PM UTC

PDB ID : 9G5P / pdb_00009g5p
BMRB ID : 34937
Title : Trp-cage fortified Tc5b-Exenatide chimera (Ex4-Tc5bER) at 277K
Authors : Horvath, D.
Deposited on : 2024-07-17

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

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

A user guide is available at

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

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The types of validation reports are described at

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

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

MolProbity : 4-5-2 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

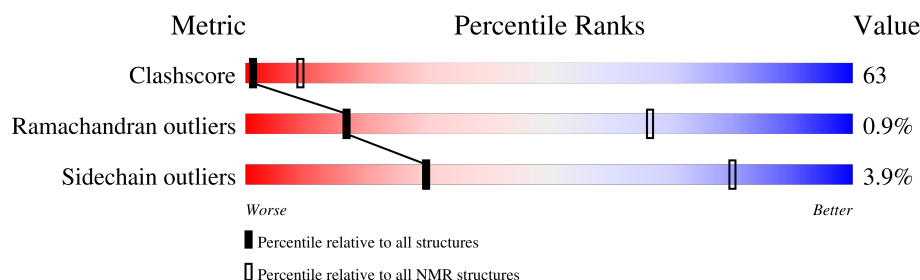
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment is 53%.

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 $\leq 5\%$

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	25	28% 48% 12% 12%

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 10 models. Model 6 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *closest to the average*.

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:24 (22)	0.25	6

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

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

The models can be grouped into 3 clusters and 1 single-model cluster was found.

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

3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 388 atoms, of which 191 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
			388	124	191	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	GLU	ASN	engineered mutation	UNP P26349
A	21	ARG	ALA	engineered mutation	UNP P26349

4 Residue-property plots [i](#)

4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

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

- Molecule 1: Exendin-4



4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

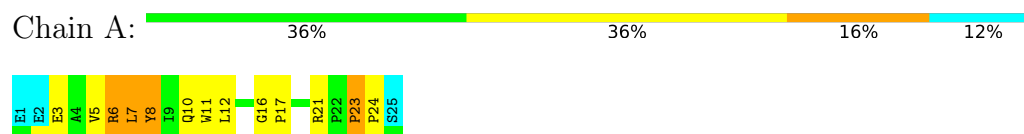
4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: Exendin-4



4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: Exendin-4



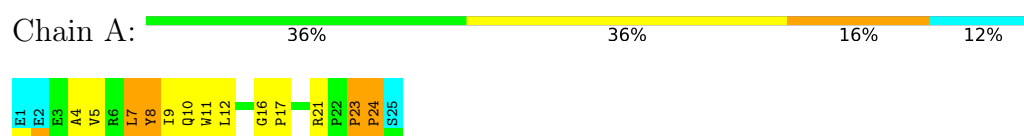
4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Exendin-4



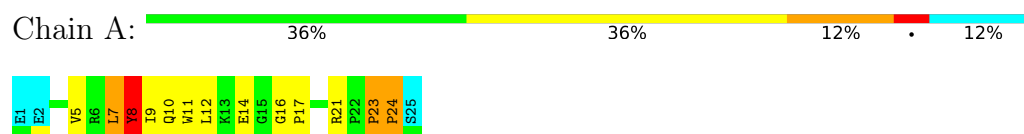
4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Exendin-4



4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Exendin-4



4.2.6 Score per residue for model 6 (medoid)

- Molecule 1: Exendin-4



4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Exendin-4



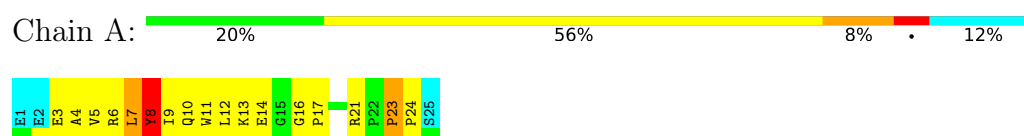
4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Exendin-4



4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Exendin-4



4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Exendin-4



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	172
Number of shifts mapped to atoms	172
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Assignment completeness (well-defined parts)	53%

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	1.34±0.09	2±1/179 (1.3± 0.4%)	1.29±0.08	1±1/245 (0.4± 0.3%)
All	All	1.35	24/1790 (1.3%)	1.30	11/2450 (0.4%)

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	0.3±0.5
All	All	0	3

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	7	LEU	C-N	-5.97	1.26	1.33	4	4
1	A	8	TYR	CE2-CZ	5.93	1.52	1.38	3	2
1	A	8	TYR	C-N	-5.81	1.27	1.34	8	10
1	A	8	TYR	CA-C	-5.48	1.46	1.52	1	8

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

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	23	PRO	CA-C-N	7.24	126.50	118.97	9	3
1	A	23	PRO	C-N-CA	7.24	126.50	118.97	9	3
1	A	23	PRO	O-C-N	6.55	124.23	121.15	2	5

There are no chirality outliers.

All unique planar outliers are listed below.

Mol	Chain	Res	Type	Group	Models (Total)
1	A	8	TYR	Sidechain	3

6.2 Too-close contacts

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	172	172	172	22±3
All	All	1720	1720	1720	216

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 63.

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:HA	1:A:24:PRO:CG	0.81	2.04	9	10
1:A:4:ALA:HA	1:A:7:LEU:HD11	0.77	1.57	6	6
1:A:11:TRP:CZ3	1:A:23:PRO:HB3	0.74	2.17	5	9
1:A:8:TYR:HA	1:A:24:PRO:HG2	0.70	1.61	1	10
1:A:8:TYR:HE2	1:A:11:TRP:CZ3	0.70	2.04	9	3
1:A:11:TRP:CH2	1:A:23:PRO:HB3	0.68	2.24	7	10
1:A:7:LEU:C	1:A:10:GLN:HB2	0.66	2.16	6	10
1:A:8:TYR:CA	1:A:24:PRO:HG2	0.66	2.20	2	9
1:A:11:TRP:CD1	1:A:21:ARG:HG3	0.65	2.27	7	10
1:A:8:TYR:CE2	1:A:11:TRP:CZ3	0.65	2.85	9	5
1:A:8:TYR:HA	1:A:24:PRO:HG3	0.63	1.68	9	5
1:A:11:TRP:CE3	1:A:12:LEU:HG	0.62	2.30	3	10
1:A:11:TRP:CH2	1:A:17:PRO:HD3	0.62	2.30	9	10
1:A:7:LEU:O	1:A:10:GLN:HB2	0.61	1.96	1	10
1:A:5:VAL:O	1:A:8:TYR:HB3	0.61	1.95	6	10
1:A:3:GLU:O	1:A:7:LEU:HG	0.60	1.95	3	6
1:A:7:LEU:HA	1:A:10:GLN:HB2	0.58	1.75	7	10
1:A:7:LEU:HD13	1:A:24:PRO:HB2	0.57	1.75	9	1
1:A:3:GLU:O	1:A:6:ARG:HB2	0.55	2.02	8	4
1:A:8:TYR:CA	1:A:24:PRO:CG	0.53	2.85	3	4
1:A:9:ILE:O	1:A:13:LYS:HG3	0.53	2.03	9	1
1:A:10:GLN:O	1:A:14:GLU:HG2	0.52	2.04	5	4
1:A:7:LEU:CA	1:A:10:GLN:HB2	0.52	2.35	7	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:11:TRP:CD2	1:A:16:GLY:HA2	0.51	2.40	9	10
1:A:10:GLN:O	1:A:14:GLU:HG3	0.50	2.06	3	2
1:A:4:ALA:O	1:A:7:LEU:HB2	0.49	2.07	4	1
1:A:11:TRP:CE3	1:A:23:PRO:HB3	0.49	2.42	1	5
1:A:11:TRP:CD1	1:A:21:ARG:CG	0.48	2.97	8	1
1:A:7:LEU:HD12	1:A:8:TYR:N	0.47	2.24	7	1
1:A:7:LEU:HA	1:A:10:GLN:CG	0.45	2.40	7	1
1:A:7:LEU:HA	1:A:10:GLN:CB	0.45	2.41	7	1
1:A:11:TRP:CG	1:A:24:PRO:HD3	0.45	2.46	9	1
1:A:3:GLU:HA	1:A:6:ARG:HB2	0.44	1.89	9	7
1:A:11:TRP:CE2	1:A:16:GLY:HA2	0.44	2.48	7	4
1:A:8:TYR:HE2	1:A:11:TRP:HZ3	0.43	1.49	5	2
1:A:8:TYR:CE1	1:A:12:LEU:HD11	0.42	2.49	5	2
1:A:12:LEU:HA	1:A:16:GLY:CA	0.42	2.45	6	3
1:A:8:TYR:C	1:A:10:GLN:N	0.42	2.77	9	2
1:A:5:VAL:O	1:A:9:ILE:HG13	0.42	2.15	5	2
1:A:11:TRP:CZ3	1:A:12:LEU:HG	0.41	2.51	6	1
1:A:8:TYR:CB	1:A:24:PRO:HG2	0.41	2.46	7	1
1:A:6:ARG:O	1:A:10:GLN:HG2	0.41	2.15	1	1
1:A:4:ALA:CA	1:A:7:LEU:HD11	0.41	2.44	8	1
1:A:11:TRP:HD1	1:A:21:ARG:HG3	0.41	1.74	8	1

6.3 Torsion angles ⓘ

6.3.1 Protein backbone ⓘ

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%)	18±0 (83±2%)	4±0 (16±2%)	0±0 (1±2%)	16	66
All	All	220/250 (88%)	183 (83%)	35 (16%)	2 (1%)	16	66

All 1 unique Ramachandran outliers are listed below.

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	24	PRO	2

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	18/21 (86%)	17±0 (96±3%)	1±0 (4±3%)	30	80
All	All	180/210 (86%)	173 (96%)	7 (4%)	30	80

All 2 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	6
1	A	6	ARG	1

6.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no oligosaccharides in this entry.

6.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues ⓘ

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation [i](#)

The completeness of assignment taking into account all chemical shift lists is 53% for the well-defined parts and 52% 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 [i](#)

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

Total number of shifts	172
Number of shifts mapped to atoms	172
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Number of shift outliers (ShiftChecker)	2

7.1.2 Chemical shift referencing [i](#)

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

7.1.3 Completeness of resonance assignments [i](#)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the well-defined regions of the structure. The overall completeness is 53%, i.e. 158 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 300. 0 out of 3 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	¹ H	¹³ C	¹⁵ N
Backbone	43/105 (41%)	43/43 (100%)	0/44 (0%)	0/18 (0%)
Sidechain	105/174 (60%)	105/113 (93%)	0/53 (0%)	0/8 (0%)
Aromatic	10/21 (48%)	10/10 (100%)	0/10 (0%)	0/1 (0%)
Overall	158/300 (53%)	158/166 (95%)	0/107 (0%)	0/27 (0%)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 52%, i.e. 172 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 332. 0 out of 3 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	¹ H	¹³ C	¹⁵ N
Backbone	47/120 (39%)	47/49 (96%)	0/50 (0%)	0/21 (0%)
Sidechain	115/191 (60%)	115/123 (93%)	0/60 (0%)	0/8 (0%)
Aromatic	10/21 (48%)	10/10 (100%)	0/10 (0%)	0/1 (0%)
Overall	172/332 (52%)	172/182 (95%)	0/120 (0%)	0/30 (0%)

7.1.4 Statistically unusual chemical shifts [i](#)

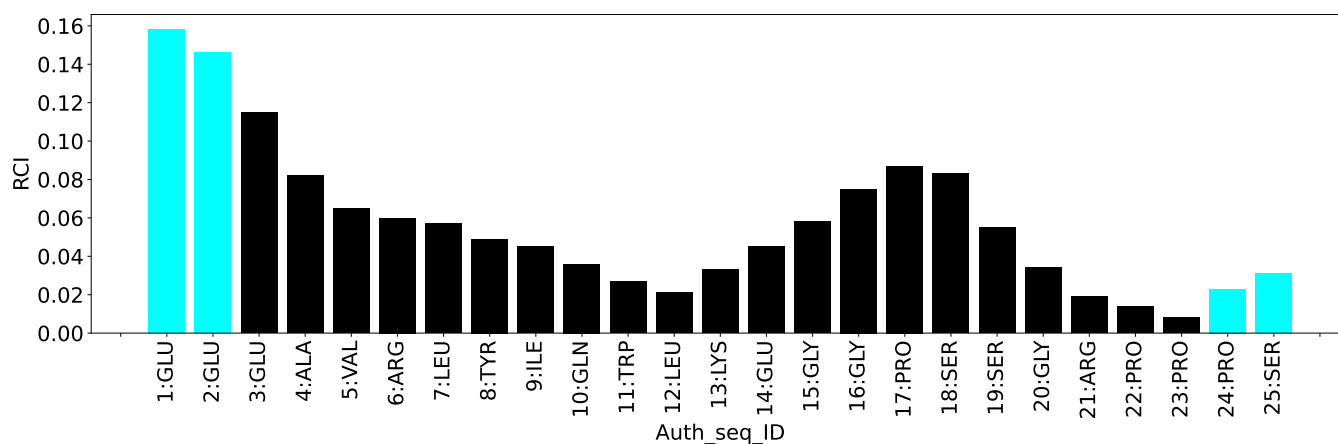
The following table lists the statistically unusual chemical shifts. These are statistical measures, and large deviations from the mean do not necessarily imply incorrect assignments. Molecules containing paramagnetic centres or hemes are expected to give rise to anomalous chemical shifts.

List Id	Chain	Res	Type	Atom	Shift, ppm	Expected range, ppm	Z-score
1	A	16	GLY	HA2	0.82	2.15 – 5.77	-8.7
1	A	23	PRO	HA	2.48	2.78 – 6.00	-5.9

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	1989
Intra-residue ($ i-j =0$)	891
Sequential ($ i-j =1$)	423
Medium range ($ i-j >1$ and $ i-j <5$)	408
Long range ($ i-j \geq 5$)	267
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	79.6
Number of long range restraints per residue ¹	10.7

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

8.2 Residual restraint violations

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

8.2.1 Average number of distance violations per model

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

Bins (Å)	Average number of violations per model	Max (Å)
0.1-0.2 (Small)	87.0	0.2
0.2-0.5 (Medium)	183.4	0.5
>0.5 (Large)	166.5	3.63

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 ⓘ

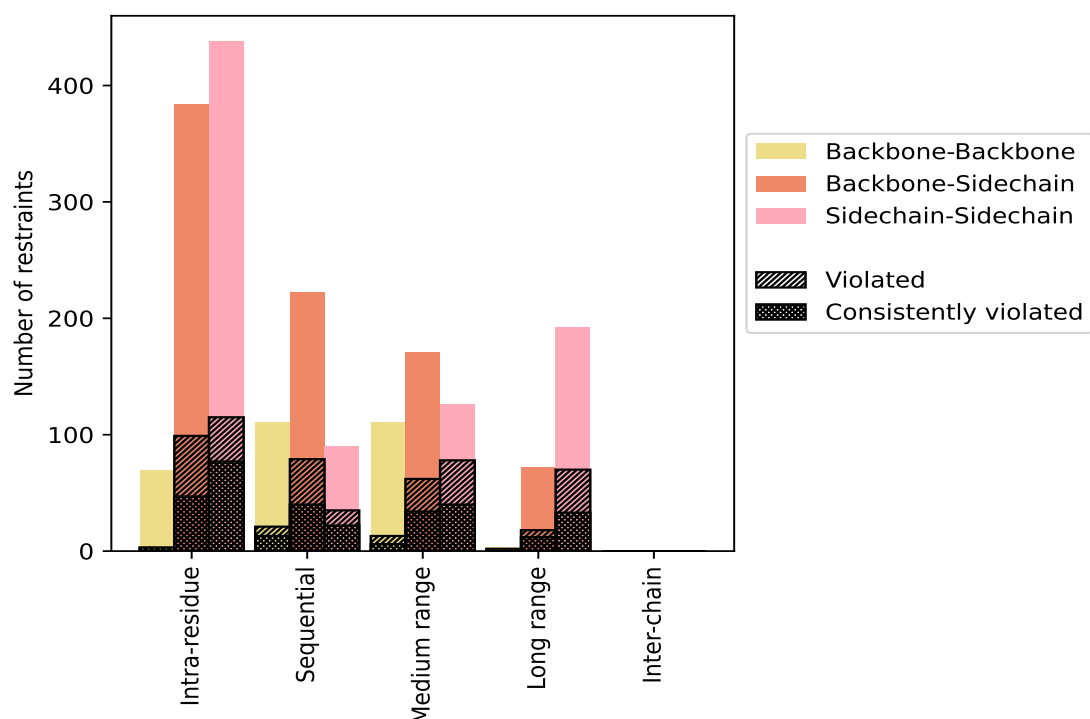
9.1 Summary of distance violations ⓘ

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

Restrains type	Count	% ¹	Violated ³			Consistently Violated ⁴		
			Count	% ²	% ¹	Count	% ²	% ¹
Intra-residue ($i-j =0$)	891	44.8	217	24.4	10.9	127	14.3	6.4
Backbone-Backbone	69	3.5	3	4.3	0.2	3	4.3	0.2
Backbone-Sidechain	384	19.3	99	25.8	5.0	47	12.2	2.4
Sidechain-Sidechain	438	22.0	115	26.3	5.8	77	17.6	3.9
Sequential ($i-j =1$)	423	21.3	135	31.9	6.8	75	17.7	3.8
Backbone-Backbone	111	5.6	21	18.9	1.1	13	11.7	0.7
Backbone-Sidechain	222	11.2	79	35.6	4.0	40	18.0	2.0
Sidechain-Sidechain	90	4.5	35	38.9	1.8	22	24.4	1.1
Medium range ($i-j >1$ & $i-j <5$)	408	20.5	153	37.5	7.7	80	19.6	4.0
Backbone-Backbone	111	5.6	13	11.7	0.7	6	5.4	0.3
Backbone-Sidechain	171	8.6	62	36.3	3.1	34	19.9	1.7
Sidechain-Sidechain	126	6.3	78	61.9	3.9	40	31.7	2.0
Long range ($i-j \geq 5$)	267	13.4	90	33.7	4.5	45	16.9	2.3
Backbone-Backbone	3	0.2	2	66.7	0.1	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	72	3.6	18	25.0	0.9	12	16.7	0.6
Sidechain-Sidechain	192	9.7	70	36.5	3.5	33	17.2	1.7
Inter-chain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Backbone	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Hydrogen bond	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	1989	100.0	595	29.9	29.9	327	16.4	16.4
Backbone-Backbone	294	14.8	39	13.3	2.0	22	7.5	1.1
Backbone-Sidechain	849	42.7	258	30.4	13.0	133	15.7	6.7
Sidechain-Sidechain	846	42.5	298	35.2	15.0	172	20.3	8.6

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

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



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

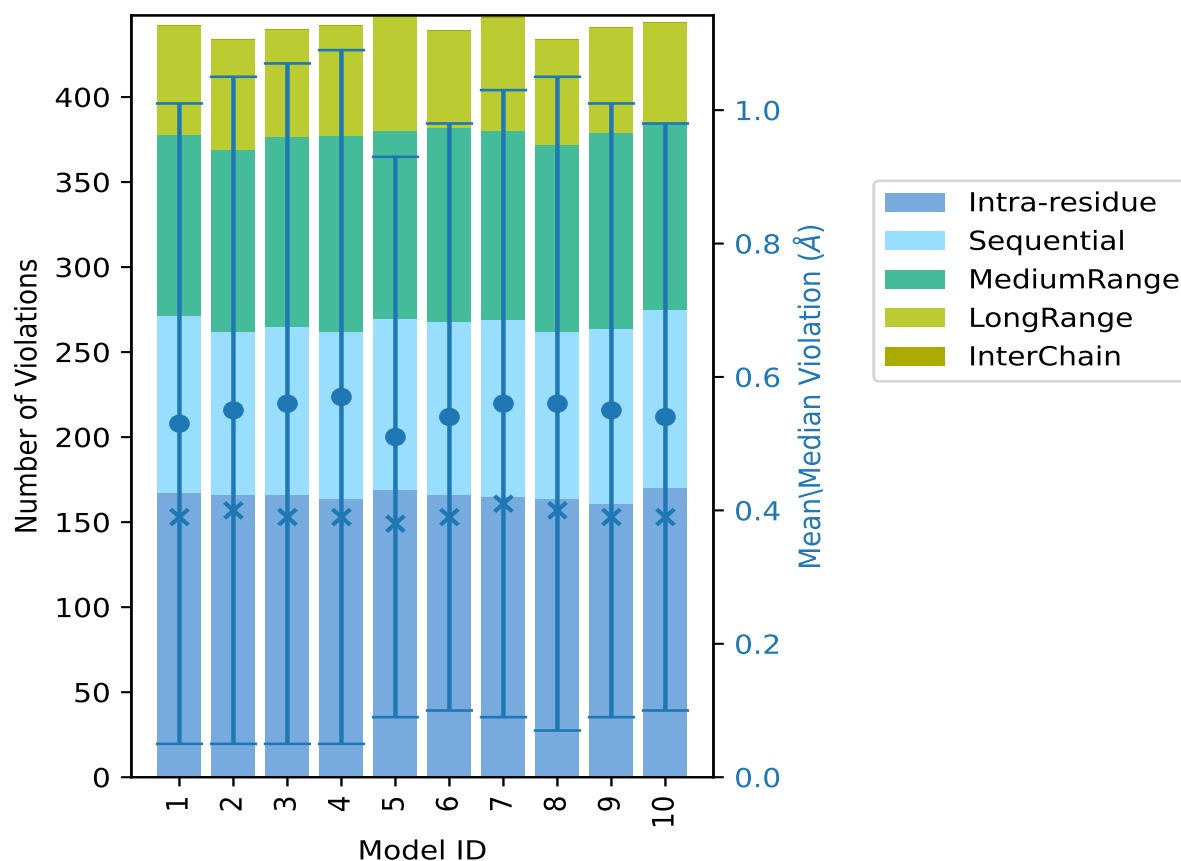
9.2 Distance violation statistics for each model [i](#)

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

Model ID	Number of violations						Mean (Å)	Max (Å)	SD ⁶ (Å)	Median (Å)
	IR ¹	SQ ²	MR ³	LR ⁴	IC ⁵	Total				
1	167	104	107	64	0	442	0.53	3.54	0.48	0.39
2	166	96	107	65	0	434	0.55	3.63	0.5	0.4
3	166	99	112	63	0	440	0.56	3.44	0.51	0.39
4	164	98	115	65	0	442	0.57	3.57	0.52	0.39
5	169	101	110	68	0	448	0.51	2.52	0.42	0.38
6	166	102	114	57	0	439	0.54	2.23	0.44	0.39
7	165	104	111	67	0	447	0.56	2.55	0.47	0.41
8	164	98	110	62	0	434	0.56	2.96	0.49	0.4
9	161	103	115	62	0	441	0.55	2.48	0.46	0.39
10	170	105	110	59	0	444	0.54	2.37	0.44	0.39

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

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



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

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

Violation analysis may find that some restraints are violated in few models and some are violated in most of models. The following table provides this information as number of violated restraints for a given fraction of the ensemble. In total, 1394(IR:674, SQ:288, MR:255, LR:177, 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	%
19	10	12	11	0	52	1	10.0
8	9	11	3	0	31	2	20.0
8	5	6	2	0	21	3	30.0

Continued on next page...

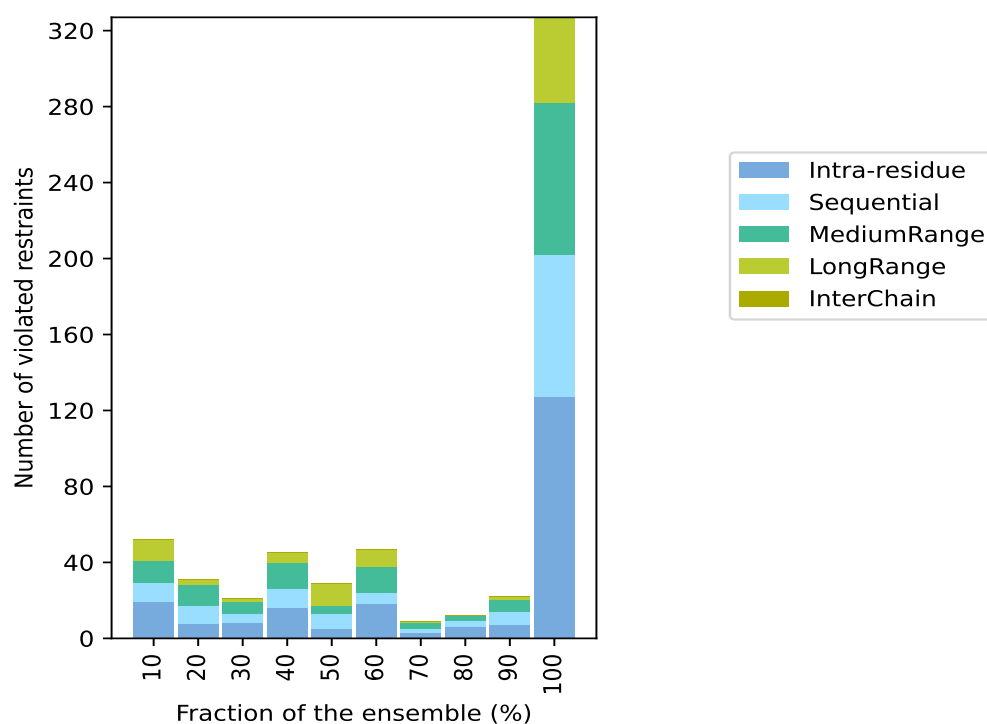
Continued from previous page...

Number of violated restraints						Fraction of the ensemble	
IR ¹	SQ ²	MR ³	LR ⁴	IC ⁵	Total	Count ⁶	%
16	10	14	5	0	45	4	40.0
5	8	4	12	0	29	5	50.0
18	6	14	9	0	47	6	60.0
3	2	3	1	0	9	7	70.0
6	3	3	0	0	12	8	80.0
7	7	6	2	0	22	9	90.0
127	75	80	45	0	327	10	100.0

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

⁵Inter-chain restraints, ⁶ Number of models with violations

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

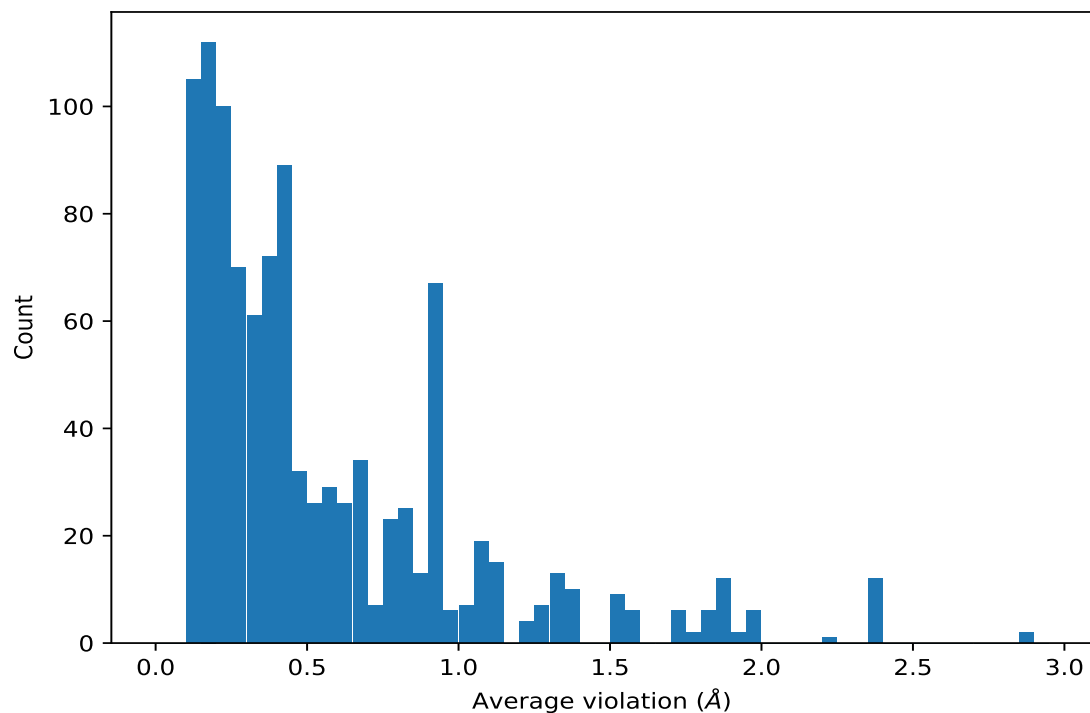


9.4 Most violated distance restraints in the ensemble [i](#)

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

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

in the ensemble



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

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

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(2,658)	1:10:A:GLN:HG3	1:14:A:GLU:HG2	10	2.87	0.59	2.76
(4,44)	1:10:A:GLN:HG3	1:14:A:GLU:HG2	10	2.87	0.59	2.76
(2,311)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	10	2.36	0.11	2.38
(2,311)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	10	2.36	0.11	2.38
(2,311)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	10	2.36	0.11	2.38
(2,311)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	10	2.36	0.11	2.38
(2,311)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	10	2.36	0.11	2.38
(2,311)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	10	2.36	0.11	2.38
(3,299)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	10	2.36	0.11	2.38
(3,299)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	10	2.36	0.11	2.38
(3,299)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	10	2.36	0.11	2.38
(3,299)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	10	2.36	0.11	2.38
(3,299)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	10	2.36	0.11	2.38
(3,299)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	10	2.36	0.11	2.38
(1,658)	1:10:A:GLN:HG3	1:14:A:GLU:HG2	10	2.24	0.59	2.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(2,545)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG21	10	1.99	0.18	1.99
(2,545)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG22	10	1.99	0.18	1.99
(2,545)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG23	10	1.99	0.18	1.99
(3,516)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG21	10	1.99	0.18	1.99
(3,516)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG22	10	1.99	0.18	1.99
(3,516)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG23	10	1.99	0.18	1.99
(2,657)	1:10:A:GLN:HG2	1:14:A:GLU:HG2	10	1.94	0.65	1.72
(4,43)	1:10:A:GLN:HG2	1:14:A:GLU:HG2	10	1.94	0.65	1.72
(2,536)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	10	1.89	0.52	2.17
(2,536)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	10	1.89	0.52	2.17
(2,536)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	10	1.89	0.52	2.17
(3,508)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	10	1.89	0.52	2.17
(3,508)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	10	1.89	0.52	2.17
(3,508)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	10	1.89	0.52	2.17
(2,517)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	10	1.87	0.21	1.83
(2,517)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	10	1.87	0.21	1.83
(2,517)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	10	1.87	0.21	1.83
(3,489)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	10	1.87	0.21	1.83
(3,489)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	10	1.87	0.21	1.83
(3,489)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	10	1.87	0.21	1.83
(2,609)	1:15:A:GLY:HA2	1:19:A:SER:HB3	10	1.79	0.49	1.94
(3,573)	1:15:A:GLY:HA2	1:19:A:SER:HB3	10	1.79	0.49	1.94
(2,412)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG21	10	1.73	0.07	1.72
(2,412)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG22	10	1.73	0.07	1.72
(2,412)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG23	10	1.73	0.07	1.72
(3,392)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG21	10	1.73	0.07	1.72
(3,392)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG22	10	1.73	0.07	1.72
(3,392)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG23	10	1.73	0.07	1.72
(2,540)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HG3	10	1.55	0.02	1.54
(2,540)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HG3	10	1.55	0.02	1.54
(2,540)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HG3	10	1.55	0.02	1.54
(3,512)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HG3	10	1.55	0.02	1.54
(3,512)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HG3	10	1.55	0.02	1.54
(3,512)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HG3	10	1.55	0.02	1.54
(2,633)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HG3	10	1.51	0.49	1.36
(2,633)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HG3	10	1.51	0.49	1.36
(2,633)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HG3	10	1.51	0.49	1.36
(3,594)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HG3	10	1.51	0.49	1.36
(3,594)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HG3	10	1.51	0.49	1.36
(3,594)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HG3	10	1.51	0.49	1.36
(2,548)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG12	10	1.39	0.26	1.36
(2,548)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG12	10	1.39	0.26	1.36

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(2,548)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG12	10	1.39	0.26	1.36
(3,518)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG12	10	1.39	0.26	1.36
(3,518)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG12	10	1.39	0.26	1.36
(3,518)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG12	10	1.39	0.26	1.36
(1,545)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG21	10	1.36	0.18	1.36
(1,545)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG22	10	1.36	0.18	1.36
(1,545)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG23	10	1.36	0.18	1.36
(1,657)	1:10:A:GLN:HG2	1:14:A:GLU:HG2	10	1.35	0.65	1.13
(1,478)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HH11	10	1.34	0.07	1.32
(1,478)	1:21:A:ARG:HD3	1:21:A:ARG:HH11	10	1.34	0.07	1.32
(2,449)	1:3:A:GLU:HB2	1:6:A:ARG:H	10	1.33	0.05	1.32
(4,24)	1:3:A:GLU:HB2	1:6:A:ARG:H	10	1.33	0.05	1.32
(2,560)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	10	1.32	0.01	1.32
(3,529)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	10	1.32	0.01	1.32
(1,536)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	10	1.26	0.52	1.54
(1,536)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	10	1.26	0.52	1.54
(1,536)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	10	1.26	0.52	1.54
(1,618)	1:8:A:TYR:HB2	1:24:A:PRO:HG2	10	1.13	0.13	1.14
(2,259)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	10	1.1	0.03	1.1
(2,259)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	10	1.1	0.03	1.1
(2,259)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	10	1.1	0.03	1.1
(3,248)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	10	1.1	0.03	1.1
(3,248)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	10	1.1	0.03	1.1
(3,248)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	10	1.1	0.03	1.1
(2,346)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	10	1.1	0.02	1.1
(3,330)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	10	1.1	0.02	1.1
(1,525)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HD2	10	1.08	0.03	1.09
(2,310)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	10	1.06	0.08	1.06
(2,310)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	10	1.06	0.08	1.06
(2,310)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	10	1.06	0.08	1.06
(2,310)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	10	1.06	0.08	1.06
(2,310)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	10	1.06	0.08	1.06
(2,310)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	10	1.06	0.08	1.06
(3,298)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	10	1.06	0.08	1.06
(3,298)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	10	1.06	0.08	1.06
(3,298)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	10	1.06	0.08	1.06
(3,298)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	10	1.06	0.08	1.06
(3,298)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	10	1.06	0.08	1.06
(3,298)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	10	1.06	0.08	1.06
(1,580)	1:17:A:PRO:HB2	1:18:A:SER:H	10	1.03	0.16	1.0
(2,592)	1:11:A:TRP:HE3	1:16:A:GLY:HA3	10	1.01	0.04	1.01
(3,558)	1:11:A:TRP:HE3	1:16:A:GLY:HA3	10	1.01	0.04	1.01

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,540)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HG3	10	1.0	0.02	1.0
(1,540)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HG3	10	1.0	0.02	1.0
(1,540)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HG3	10	1.0	0.02	1.0
(1,642)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HB3	10	1.0	0.1	0.96
(2,447)	1:5:A:VAL:HB	1:6:A:ARG:H	10	0.98	0.15	0.93
(4,23)	1:5:A:VAL:HB	1:6:A:ARG:H	10	0.98	0.15	0.93
(2,184)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	10	0.96	0.02	0.96
(3,174)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	10	0.96	0.02	0.96
(1,485)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	10	0.96	0.04	0.97
(1,485)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB3	10	0.96	0.04	0.97
(1,529)	1:12:A:LEU:HA	1:16:A:GLY:HA3	10	0.95	0.03	0.95
(2,628)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	10	0.95	0.19	0.88
(2,628)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	10	0.95	0.19	0.88
(2,628)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	10	0.95	0.19	0.88
(3,590)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	10	0.95	0.19	0.88
(3,590)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	10	0.95	0.19	0.88
(3,590)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	10	0.95	0.19	0.88
(2,444)	1:10:A:GLN:H	1:11:A:TRP:HB2	10	0.95	0.03	0.94
(3,423)	1:10:A:GLN:H	1:11:A:TRP:HB2	10	0.95	0.03	0.94
(1,320)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HD2	10	0.94	0.25	1.0
(1,320)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HD3	10	0.94	0.25	1.0
(2,535)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	10	0.92	0.41	0.81
(2,535)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	10	0.92	0.41	0.81
(2,535)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	10	0.92	0.41	0.81
(2,535)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG21	10	0.92	0.41	0.81
(2,535)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG22	10	0.92	0.41	0.81
(2,535)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG23	10	0.92	0.41	0.81
(3,507)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	10	0.92	0.41	0.81
(3,507)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	10	0.92	0.41	0.81
(3,507)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	10	0.92	0.41	0.81
(3,507)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG21	10	0.92	0.41	0.81
(3,507)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG22	10	0.92	0.41	0.81
(3,507)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG23	10	0.92	0.41	0.81
(2,114)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	10	0.91	0.04	0.92
(4,1)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	10	0.91	0.04	0.92
(2,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG11	10	0.9	0.23	1.03
(2,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG12	10	0.9	0.23	1.03
(2,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG13	10	0.9	0.23	1.03
(2,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG11	10	0.9	0.23	1.03
(2,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG12	10	0.9	0.23	1.03
(2,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG13	10	0.9	0.23	1.03
(2,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG11	10	0.9	0.23	1.03

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(2,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG12	10	0.9	0.23	1.03
(2,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG13	10	0.9	0.23	1.03
(2,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	10	0.9	0.23	1.03
(2,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	10	0.9	0.23	1.03
(2,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	10	0.9	0.23	1.03
(2,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	10	0.9	0.23	1.03
(2,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	10	0.9	0.23	1.03
(2,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	10	0.9	0.23	1.03
(2,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	10	0.9	0.23	1.03
(2,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	10	0.9	0.23	1.03
(2,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	10	0.9	0.23	1.03
(4,30)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG11	10	0.9	0.23	1.03
(4,30)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG12	10	0.9	0.23	1.03
(4,30)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG13	10	0.9	0.23	1.03
(4,30)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG11	10	0.9	0.23	1.03
(4,30)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG12	10	0.9	0.23	1.03
(4,30)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG13	10	0.9	0.23	1.03
(4,30)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG11	10	0.9	0.23	1.03
(4,30)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG12	10	0.9	0.23	1.03
(4,30)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG13	10	0.9	0.23	1.03
(4,30)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	10	0.9	0.23	1.03
(4,30)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	10	0.9	0.23	1.03
(4,30)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	10	0.9	0.23	1.03
(4,30)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	10	0.9	0.23	1.03
(4,30)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	10	0.9	0.23	1.03
(4,30)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	10	0.9	0.23	1.03
(4,30)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	10	0.9	0.23	1.03
(4,30)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	10	0.9	0.23	1.03
(4,30)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	10	0.9	0.23	1.03
(1,404)	1:8:A:TYR:HB3	1:9:A:ILE:H	10	0.9	0.05	0.9
(2,637)	1:2:A:GLU:HB3	1:6:A:ARG:H	10	0.9	0.08	0.9
(4,40)	1:2:A:GLU:HB3	1:6:A:ARG:H	10	0.9	0.08	0.9
(1,418)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:H	10	0.9	0.02	0.9
(1,530)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HD3	10	0.89	0.04	0.88
(2,390)	1:11:A:TRP:HE3	1:11:A:TRP:HH2	10	0.87	0.01	0.87
(4,20)	1:11:A:TRP:HE3	1:11:A:TRP:HH2	10	0.87	0.01	0.87
(1,359)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HG3	10	0.87	0.12	0.88
(2,527)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	10	0.86	0.19	0.88
(2,527)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	10	0.86	0.19	0.88
(2,527)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	10	0.86	0.19	0.88
(3,499)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	10	0.86	0.19	0.88
(3,499)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	10	0.86	0.19	0.88

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(3,499)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	10	0.86	0.19	0.88
(1,387)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HZ3	10	0.86	0.11	0.8
(1,387)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HZ3	10	0.86	0.11	0.8
(1,355)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HG	10	0.83	0.06	0.84
(2,631)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HG3	10	0.83	0.56	0.88
(2,631)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HG3	10	0.83	0.56	0.88
(2,631)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HG3	10	0.83	0.56	0.88
(3,592)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HG3	10	0.83	0.56	0.88
(3,592)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HG3	10	0.83	0.56	0.88
(3,592)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HG3	10	0.83	0.56	0.88
(1,560)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	10	0.83	0.01	0.82
(2,486)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:HA	10	0.83	0.22	0.86
(4,27)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:HA	10	0.83	0.22	0.86
(2,453)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:H	10	0.81	0.04	0.82
(2,453)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:H	10	0.81	0.04	0.82
(2,453)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:H	10	0.81	0.04	0.82
(3,428)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:H	10	0.81	0.04	0.82
(3,428)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:H	10	0.81	0.04	0.82
(3,428)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:H	10	0.81	0.04	0.82
(2,396)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:H	10	0.8	0.06	0.82
(3,376)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:H	10	0.8	0.06	0.82
(1,229)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HG3	10	0.79	0.06	0.78
(2,534)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	10	0.79	0.26	0.83
(2,534)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	10	0.79	0.26	0.83
(2,534)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	10	0.79	0.26	0.83
(3,506)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	10	0.79	0.26	0.83
(3,506)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	10	0.79	0.26	0.83
(3,506)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	10	0.79	0.26	0.83
(1,548)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG12	10	0.78	0.26	0.74
(1,548)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG12	10	0.78	0.26	0.74
(1,548)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG12	10	0.78	0.26	0.74
(2,348)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB2	10	0.77	0.05	0.76
(3,332)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB2	10	0.77	0.05	0.76
(2,641)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	10	0.76	0.03	0.76
(3,600)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	10	0.76	0.03	0.76
(1,562)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HG	10	0.75	0.02	0.75
(1,449)	1:3:A:GLU:HB2	1:6:A:ARG:H	10	0.75	0.05	0.72
(1,600)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HG3	10	0.74	0.32	0.84
(2,411)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:H	10	0.71	0.18	0.63
(2,411)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:H	10	0.71	0.18	0.63
(2,411)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:H	10	0.71	0.18	0.63
(3,391)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:H	10	0.71	0.18	0.63

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(3,391)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:H	10	0.71	0.18	0.63
(3,391)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:H	10	0.71	0.18	0.63
(2,341)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	10	0.7	0.01	0.7
(3,325)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	10	0.7	0.01	0.7
(1,499)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HD3	10	0.69	0.11	0.66
(1,616)	1:12:A:LEU:HA	1:16:A:GLY:HA2	10	0.69	0.03	0.69
(1,331)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HG3	10	0.68	0.07	0.68
(1,324)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HD2	10	0.67	0.06	0.66
(1,324)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HD2	10	0.67	0.06	0.66
(1,583)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HE21	10	0.67	0.06	0.66
(2,301)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HE3	10	0.66	0.01	0.66
(3,289)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HE3	10	0.66	0.01	0.66
(2,544)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG13	10	0.66	0.21	0.57
(2,544)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG13	10	0.66	0.21	0.57
(2,544)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG13	10	0.66	0.21	0.57
(3,515)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG13	10	0.66	0.21	0.57
(3,515)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG13	10	0.66	0.21	0.57
(3,515)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG13	10	0.66	0.21	0.57
(2,256)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	10	0.65	0.01	0.65
(2,256)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	10	0.65	0.01	0.65
(2,256)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	10	0.65	0.01	0.65
(3,245)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	10	0.65	0.01	0.65
(3,245)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	10	0.65	0.01	0.65
(3,245)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	10	0.65	0.01	0.65
(1,97)	1:23:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HD2	10	0.64	0.24	0.63
(2,303)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB3	10	0.64	0.12	0.66
(2,303)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB3	10	0.64	0.12	0.66
(3,291)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB3	10	0.64	0.12	0.66
(3,291)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB3	10	0.64	0.12	0.66
(1,87)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG2	10	0.63	0.02	0.63
(1,606)	1:3:A:GLU:HA	1:6:A:ARG:HB2	10	0.63	0.02	0.64
(1,519)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD11	10	0.63	0.05	0.63
(1,519)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD12	10	0.63	0.05	0.63
(1,519)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD13	10	0.63	0.05	0.63
(1,369)	1:3:A:GLU:H	1:4:A:ALA:H	10	0.6	0.12	0.54
(2,321)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	10	0.6	0.01	0.6
(3,307)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	10	0.6	0.01	0.6
(2,145)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	10	0.6	0.03	0.59
(2,145)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	10	0.6	0.03	0.59
(4,6)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	10	0.6	0.03	0.59
(4,6)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	10	0.6	0.03	0.59
(2,615)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HA	10	0.6	0.02	0.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(3,579)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HA	10	0.6	0.02	0.6
(1,99)	1:23:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD2	10	0.59	0.13	0.58
(1,65)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD3	10	0.58	0.04	0.57
(1,474)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:H	10	0.57	0.13	0.58
(2,638)	1:9:A:ILE:HA	1:11:A:TRP:HE3	10	0.57	0.17	0.45
(4,41)	1:9:A:ILE:HA	1:11:A:TRP:HE3	10	0.57	0.17	0.45
(1,91)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HB3	10	0.56	0.01	0.56
(1,88)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG3	10	0.56	0.02	0.56
(1,531)	1:16:A:GLY:HA2	1:16:A:GLY:HA3	10	0.55	0.0	0.55
(1,488)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HD2	10	0.55	0.11	0.55
(2,268)	1:3:A:GLU:H	1:3:A:GLU:HG2	10	0.54	0.03	0.54
(2,268)	1:3:A:GLU:H	1:3:A:GLU:HG3	10	0.54	0.03	0.54
(4,12)	1:3:A:GLU:H	1:3:A:GLU:HG2	10	0.54	0.03	0.54
(4,12)	1:3:A:GLU:H	1:3:A:GLU:HG3	10	0.54	0.03	0.54
(2,492)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HD2	10	0.53	0.04	0.52
(3,465)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HD2	10	0.53	0.04	0.52
(2,629)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG2	10	0.53	0.03	0.55
(3,591)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG2	10	0.53	0.03	0.55
(1,171)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG13	10	0.52	0.02	0.52
(2,612)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HG	10	0.51	0.03	0.5
(3,576)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HG	10	0.51	0.03	0.5
(1,603)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG3	10	0.5	0.13	0.6
(1,346)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	10	0.5	0.02	0.5
(2,239)	1:14:A:GLU:HB3	1:14:A:GLU:HG3	10	0.5	0.34	0.45
(4,11)	1:14:A:GLU:HB3	1:14:A:GLU:HG3	10	0.5	0.34	0.45
(1,602)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG2	10	0.5	0.16	0.46
(1,586)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:H	10	0.5	0.06	0.5
(1,215)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HG2	10	0.49	0.06	0.5
(1,262)	1:3:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HG2	10	0.49	0.04	0.47
(1,262)	1:3:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HG3	10	0.49	0.04	0.47
(1,110)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HG2	10	0.48	0.04	0.48
(1,259)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	10	0.47	0.02	0.48
(1,259)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	10	0.47	0.02	0.48
(1,259)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	10	0.47	0.02	0.48
(2,553)	1:2:A:GLU:HB2	1:3:A:GLU:HA	10	0.47	0.07	0.5
(3,523)	1:2:A:GLU:HB2	1:3:A:GLU:HA	10	0.47	0.07	0.5
(1,339)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD3	10	0.47	0.02	0.46
(1,628)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	10	0.46	0.19	0.38
(1,628)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	10	0.46	0.19	0.38
(1,628)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	10	0.46	0.19	0.38
(2,431)	1:19:A:SER:H	1:20:A:GLY:HA3	10	0.46	0.03	0.46
(3,411)	1:19:A:SER:H	1:20:A:GLY:HA3	10	0.46	0.03	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,632)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HD2	10	0.45	0.13	0.44
(1,632)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HD2	10	0.45	0.13	0.44
(1,632)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HD2	10	0.45	0.13	0.44
(1,632)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HD3	10	0.45	0.13	0.44
(1,632)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HD3	10	0.45	0.13	0.44
(1,632)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HD3	10	0.45	0.13	0.44
(1,186)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HB2	10	0.45	0.0	0.45
(2,364)	1:11:A:TRP:HE1	1:19:A:SER:HB2	10	0.45	0.12	0.43
(3,347)	1:11:A:TRP:HE1	1:19:A:SER:HB2	10	0.45	0.12	0.43
(2,178)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG3	10	0.45	0.01	0.45
(3,168)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG3	10	0.45	0.01	0.45
(1,27)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HB3	10	0.45	0.0	0.45
(1,297)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HD1	10	0.44	0.06	0.47
(1,297)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HD2	10	0.44	0.06	0.47
(1,151)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HB2	10	0.44	0.04	0.44
(1,152)	1:6:A:ARG:HD3	1:6:A:ARG:HE	10	0.43	0.14	0.38
(1,327)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HE3	10	0.42	0.01	0.42
(1,379)	1:15:A:GLY:H	1:16:A:GLY:H	10	0.42	0.13	0.35
(2,653)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HB2	10	0.42	0.09	0.44
(4,42)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HB2	10	0.42	0.09	0.44
(1,310)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	10	0.42	0.12	0.41
(1,310)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	10	0.42	0.12	0.41
(1,310)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	10	0.42	0.12	0.41
(1,310)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	10	0.42	0.12	0.41
(1,310)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	10	0.42	0.12	0.41
(1,310)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	10	0.42	0.12	0.41
(1,310)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HD1	10	0.42	0.12	0.41
(1,310)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HD2	10	0.42	0.12	0.41
(1,310)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HD1	10	0.42	0.12	0.41
(1,310)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HD2	10	0.42	0.12	0.41
(1,310)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HD1	10	0.42	0.12	0.41
(1,310)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HD2	10	0.42	0.12	0.41
(2,556)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	10	0.42	0.02	0.42
(2,556)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	10	0.42	0.02	0.42
(2,556)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	10	0.42	0.02	0.42
(3,526)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	10	0.42	0.02	0.42
(3,526)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	10	0.42	0.02	0.42
(3,526)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	10	0.42	0.02	0.42
(1,222)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HG3	10	0.41	0.01	0.42
(1,222)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HG3	10	0.41	0.01	0.42
(1,25)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HB3	10	0.41	0.01	0.41
(1,120)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	10	0.41	0.07	0.39

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,120)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	10	0.41	0.07	0.39
(1,120)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	10	0.41	0.07	0.39
(2,292)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HG2	10	0.41	0.0	0.41
(3,280)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HG2	10	0.41	0.0	0.41
(1,180)	1:10:A:GLN:HG2	1:10:A:GLN:HG3	10	0.41	0.0	0.41
(2,76)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD3	10	0.41	0.06	0.43
(3,76)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD3	10	0.41	0.06	0.43
(2,150)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HB3	10	0.4	0.09	0.42
(3,143)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HB3	10	0.4	0.09	0.42
(2,159)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	10	0.4	0.01	0.4
(2,159)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	10	0.4	0.01	0.4
(2,159)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	10	0.4	0.01	0.4
(4,9)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	10	0.4	0.01	0.4
(4,9)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	10	0.4	0.01	0.4
(4,9)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	10	0.4	0.01	0.4
(1,489)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:HB3	10	0.4	0.03	0.4
(2,295)	1:10:A:GLN:HE22	1:10:A:GLN:HG2	10	0.39	0.01	0.39
(2,372)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:H	10	0.39	0.06	0.38
(2,372)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:H	10	0.39	0.06	0.38
(3,283)	1:10:A:GLN:HE22	1:10:A:GLN:HG2	10	0.39	0.01	0.39
(4,19)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:H	10	0.39	0.06	0.38
(4,19)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:H	10	0.39	0.06	0.38
(2,365)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HA	10	0.39	0.03	0.38
(2,620)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:HA2	10	0.39	0.04	0.38
(2,620)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:HA2	10	0.39	0.04	0.38
(2,620)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:HA2	10	0.39	0.04	0.38
(4,18)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HA	10	0.39	0.03	0.38
(4,38)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:HA2	10	0.39	0.04	0.38
(4,38)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:HA2	10	0.39	0.04	0.38
(4,38)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:HA2	10	0.39	0.04	0.38
(1,272)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG3	10	0.39	0.04	0.39
(1,188)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HB3	10	0.39	0.0	0.39
(1,112)	1:24:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HG3	10	0.38	0.01	0.38
(2,335)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	10	0.38	0.02	0.38
(4,16)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	10	0.38	0.02	0.38
(1,592)	1:11:A:TRP:HE3	1:16:A:GLY:HA3	10	0.38	0.05	0.38
(1,614)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HB2	10	0.38	0.08	0.42
(1,225)	1:13:A:LYS:HG2	1:13:A:LYS:HG3	10	0.37	0.0	0.37
(1,293)	1:10:A:GLN:HE21	1:14:A:GLU:HG3	10	0.37	0.18	0.36
(1,384)	1:19:A:SER:H	1:20:A:GLY:H	10	0.37	0.06	0.35
(1,237)	1:14:A:GLU:HG2	1:14:A:GLU:HG3	10	0.37	0.02	0.37
(1,138)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HB2	10	0.36	0.01	0.36

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(2,266)	1:3:A:GLU:HB3	1:3:A:GLU:HG3	10	0.36	0.0	0.36
(3,255)	1:3:A:GLU:HB3	1:3:A:GLU:HG3	10	0.36	0.0	0.36
(1,643)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB3	10	0.36	0.09	0.36
(1,247)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HD2	10	0.36	0.01	0.36
(1,302)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG2	10	0.36	0.12	0.34
(1,302)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG2	10	0.36	0.12	0.34
(1,528)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB3	10	0.36	0.19	0.3
(1,528)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB3	10	0.36	0.19	0.3
(1,528)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB3	10	0.36	0.19	0.3
(1,528)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HB3	10	0.36	0.19	0.3
(1,528)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HB3	10	0.36	0.19	0.3
(1,528)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HB3	10	0.36	0.19	0.3
(2,119)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	10	0.36	0.03	0.36
(2,119)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	10	0.36	0.03	0.36
(2,119)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	10	0.36	0.03	0.36
(4,2)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	10	0.36	0.03	0.36
(4,2)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	10	0.36	0.03	0.36
(4,2)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	10	0.36	0.03	0.36
(1,444)	1:10:A:GLN:H	1:11:A:TRP:HB2	10	0.36	0.03	0.36
(2,593)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HB3	10	0.36	0.04	0.36
(4,35)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HB3	10	0.36	0.04	0.36
(1,447)	1:5:A:VAL:HB	1:6:A:ARG:H	10	0.35	0.15	0.3
(1,357)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD21	10	0.34	0.03	0.34
(1,357)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD22	10	0.34	0.03	0.34
(1,357)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD23	10	0.34	0.03	0.34
(2,572)	1:2:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:H	10	0.34	0.1	0.32
(3,539)	1:2:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:H	10	0.34	0.1	0.32
(1,309)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB3	10	0.34	0.14	0.3
(1,309)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB3	10	0.34	0.14	0.3
(1,77)	1:22:A:PRO:HD2	1:22:A:PRO:HG2	10	0.33	0.02	0.34
(1,184)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	10	0.32	0.02	0.32
(1,131)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD21	10	0.32	0.07	0.32
(1,131)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD22	10	0.32	0.07	0.32
(1,131)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD23	10	0.32	0.07	0.32
(1,90)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HG3	10	0.32	0.02	0.32
(2,659)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HA	10	0.32	0.04	0.32
(4,45)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HA	10	0.32	0.04	0.32
(2,235)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HG3	10	0.32	0.17	0.33
(3,225)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HG3	10	0.32	0.17	0.33
(1,290)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HB2	10	0.32	0.08	0.31
(1,290)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HB3	10	0.32	0.08	0.31
(1,526)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HD3	10	0.32	0.06	0.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,526)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HD3	10	0.32	0.06	0.3
(1,526)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HD3	10	0.32	0.06	0.3
(1,203)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HB3	10	0.31	0.0	0.31
(2,564)	1:10:A:GLN:H	1:12:A:LEU:H	10	0.3	0.01	0.3
(4,32)	1:10:A:GLN:H	1:12:A:LEU:H	10	0.3	0.01	0.3
(1,61)	1:6:A:ARG:HG2	1:6:A:ARG:HG3	10	0.3	0.0	0.3
(1,254)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HB3	10	0.3	0.0	0.3
(1,35)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HG3	10	0.29	0.09	0.29
(1,35)	1:21:A:ARG:HD3	1:21:A:ARG:HG3	10	0.29	0.09	0.29
(1,238)	1:14:A:GLU:HB2	1:14:A:GLU:HG2	10	0.29	0.05	0.28
(1,238)	1:14:A:GLU:HB3	1:14:A:GLU:HG2	10	0.29	0.05	0.28
(2,312)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD11	10	0.29	0.05	0.3
(2,312)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD12	10	0.29	0.05	0.3
(2,312)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD13	10	0.29	0.05	0.3
(4,13)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD11	10	0.29	0.05	0.3
(4,13)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD12	10	0.29	0.05	0.3
(4,13)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD13	10	0.29	0.05	0.3
(1,206)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HB2	10	0.29	0.01	0.29
(1,255)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HB	10	0.28	0.06	0.26
(1,114)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	10	0.28	0.04	0.3
(1,337)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD2	10	0.28	0.04	0.29
(1,337)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD3	10	0.28	0.04	0.29
(2,146)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	10	0.28	0.01	0.28
(2,146)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	10	0.28	0.01	0.28
(4,7)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	10	0.28	0.01	0.28
(4,7)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	10	0.28	0.01	0.28
(1,81)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HB3	10	0.27	0.0	0.27
(2,276)	1:2:A:GLU:HB2	1:2:A:GLU:HG3	10	0.27	0.01	0.28
(3,264)	1:2:A:GLU:HB2	1:2:A:GLU:HG3	10	0.27	0.01	0.28
(2,83)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HG2	10	0.27	0.07	0.29
(3,83)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HG2	10	0.27	0.07	0.29
(1,637)	1:2:A:GLU:HB3	1:6:A:ARG:H	10	0.27	0.08	0.26
(1,12)	1:20:A:GLY:H	1:20:A:GLY:HA2	10	0.27	0.04	0.28
(1,236)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HB2	10	0.26	0.03	0.27
(1,236)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HB3	10	0.26	0.03	0.27
(1,284)	1:19:A:SER:HB2	1:19:A:SER:HB3	10	0.26	0.0	0.26
(1,103)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HB3	10	0.26	0.01	0.26
(1,29)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HB2	10	0.26	0.01	0.26
(1,29)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HB3	10	0.26	0.01	0.26
(2,501)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HG2	10	0.26	0.03	0.26
(2,501)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HG3	10	0.26	0.03	0.26
(3,474)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HG2	10	0.26	0.03	0.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(3,474)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HG3	10	0.26	0.03	0.26
(1,94)	1:23:A:PRO:HD2	1:23:A:PRO:HG3	10	0.25	0.0	0.25
(1,94)	1:23:A:PRO:HD3	1:23:A:PRO:HG3	10	0.25	0.0	0.25
(2,582)	1:5:A:VAL:HA	1:6:A:ARG:H	10	0.25	0.02	0.24
(4,34)	1:5:A:VAL:HA	1:6:A:ARG:H	10	0.25	0.02	0.24
(1,390)	1:11:A:TRP:HE3	1:11:A:TRP:HH2	10	0.25	0.01	0.25
(1,356)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD11	10	0.24	0.05	0.24
(1,356)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD12	10	0.24	0.05	0.24
(1,356)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD13	10	0.24	0.05	0.24
(1,506)	1:21:A:ARG:HG2	1:21:A:ARG:HG3	10	0.24	0.01	0.23
(2,446)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:H	10	0.24	0.04	0.24
(2,446)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:H	10	0.24	0.04	0.24
(4,22)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:H	10	0.24	0.04	0.24
(4,22)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:H	10	0.24	0.04	0.24
(1,193)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD21	10	0.23	0.02	0.24
(1,193)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD22	10	0.23	0.02	0.24
(1,193)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD23	10	0.23	0.02	0.24
(1,199)	1:12:A:LEU:HD11	1:12:A:LEU:HG	10	0.23	0.0	0.23
(1,199)	1:12:A:LEU:HD12	1:12:A:LEU:HG	10	0.23	0.0	0.23
(1,199)	1:12:A:LEU:HD13	1:12:A:LEU:HG	10	0.23	0.0	0.23
(2,452)	1:9:A:ILE:HG12	1:10:A:GLN:H	10	0.23	0.01	0.24
(4,25)	1:9:A:ILE:HG12	1:10:A:GLN:H	10	0.23	0.01	0.24
(1,334)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HA	10	0.23	0.04	0.23
(1,26)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HD3	10	0.23	0.01	0.23
(1,621)	1:1:A:GLU:HB2	1:1:A:GLU:HG2	10	0.22	0.09	0.17
(1,621)	1:1:A:GLU:HB3	1:1:A:GLU:HG2	10	0.22	0.09	0.17
(1,80)	1:22:A:PRO:HD3	1:22:A:PRO:HG3	10	0.22	0.03	0.23
(2,417)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:H	10	0.22	0.02	0.22
(3,397)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:H	10	0.22	0.02	0.22
(2,137)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:H	10	0.22	0.03	0.22
(4,5)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:H	10	0.22	0.03	0.22
(1,7)	1:16:A:GLY:H	1:16:A:GLY:HA2	10	0.21	0.0	0.21
(2,300)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HA	10	0.21	0.04	0.21
(2,300)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HA	10	0.21	0.04	0.21
(3,288)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HA	10	0.21	0.04	0.21
(3,288)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HA	10	0.21	0.04	0.21
(1,348)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB2	10	0.21	0.05	0.2
(1,218)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HE2	10	0.2	0.09	0.15
(1,218)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HE2	10	0.2	0.09	0.15
(1,634)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HG3	10	0.2	0.03	0.2
(1,634)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HG3	10	0.2	0.03	0.2
(1,634)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HG3	10	0.2	0.03	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(2,454)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:H	10	0.2	0.03	0.19
(2,454)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:H	10	0.2	0.03	0.19
(2,454)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:H	10	0.2	0.03	0.19
(4,26)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:H	10	0.2	0.03	0.19
(4,26)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:H	10	0.2	0.03	0.19
(4,26)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:H	10	0.2	0.03	0.19
(1,249)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG2	10	0.2	0.0	0.2
(1,249)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG3	10	0.2	0.0	0.2
(2,313)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD21	10	0.2	0.04	0.2
(2,313)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD22	10	0.2	0.04	0.2
(2,313)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD23	10	0.2	0.04	0.2
(2,427)	1:12:A:LEU:HB2	1:16:A:GLY:H	10	0.2	0.01	0.2
(3,407)	1:12:A:LEU:HB2	1:16:A:GLY:H	10	0.2	0.01	0.2
(4,14)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD21	10	0.2	0.04	0.2
(4,14)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD22	10	0.2	0.04	0.2
(4,14)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD23	10	0.2	0.04	0.2
(1,196)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HG	10	0.19	0.02	0.19
(1,250)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG2	10	0.19	0.0	0.19
(1,250)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG3	10	0.19	0.0	0.19
(1,60)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HB3	10	0.19	0.01	0.19
(2,173)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG21	10	0.19	0.01	0.19
(2,173)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG22	10	0.19	0.01	0.19
(2,173)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG23	10	0.19	0.01	0.19
(4,10)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG21	10	0.19	0.01	0.19
(4,10)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG22	10	0.19	0.01	0.19
(4,10)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG23	10	0.19	0.01	0.19
(1,62)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HG3	10	0.19	0.05	0.2
(1,72)	1:22:A:PRO:HD2	1:22:A:PRO:HD3	10	0.19	0.0	0.19
(1,504)	1:24:A:PRO:HG2	1:24:A:PRO:HG3	10	0.19	0.02	0.2
(1,246)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HD3	10	0.19	0.0	0.19
(1,95)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD2	10	0.18	0.05	0.18
(1,95)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD3	10	0.18	0.05	0.18
(1,82)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HG3	10	0.18	0.02	0.18
(1,641)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	10	0.18	0.03	0.18
(2,441)	1:8:A:TYR:HA	1:10:A:GLN:H	10	0.18	0.02	0.18
(3,420)	1:8:A:TYR:HA	1:10:A:GLN:H	10	0.18	0.02	0.18
(2,306)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HG	10	0.18	0.07	0.14
(2,306)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HG	10	0.18	0.07	0.14
(3,294)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HG	10	0.18	0.07	0.14
(3,294)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HG	10	0.18	0.07	0.14
(2,552)	1:10:A:GLN:HE22	1:14:A:GLU:HB2	10	0.17	0.02	0.18
(2,552)	1:10:A:GLN:HE22	1:14:A:GLU:HB3	10	0.17	0.02	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(3,522)	1:10:A:GLN:HE22	1:14:A:GLU:HB2	10	0.17	0.02	0.18
(3,522)	1:10:A:GLN:HE22	1:14:A:GLU:HB3	10	0.17	0.02	0.18
(1,200)	1:12:A:LEU:HD21	1:12:A:LEU:HG	10	0.17	0.01	0.17
(1,200)	1:12:A:LEU:HD22	1:12:A:LEU:HG	10	0.17	0.01	0.17
(1,200)	1:12:A:LEU:HD23	1:12:A:LEU:HG	10	0.17	0.01	0.17
(1,124)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HB3	10	0.17	0.02	0.18
(1,160)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG12	10	0.17	0.01	0.17
(2,532)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA2	10	0.17	0.05	0.16
(2,532)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA2	10	0.17	0.05	0.16
(2,532)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA2	10	0.17	0.05	0.16
(3,504)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA2	10	0.17	0.05	0.16
(3,504)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA2	10	0.17	0.05	0.16
(3,504)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA2	10	0.17	0.05	0.16
(1,43)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HE	10	0.16	0.07	0.14
(1,43)	1:21:A:ARG:HD3	1:21:A:ARG:HE	10	0.16	0.07	0.14
(1,177)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG2	10	0.16	0.03	0.16
(1,274)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HB3	10	0.16	0.01	0.16
(1,157)	1:9:A:ILE:H	1:10:A:GLN:H	10	0.15	0.02	0.14
(1,319)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HD1	10	0.14	0.01	0.14
(1,267)	1:3:A:GLU:HB2	1:3:A:GLU:HB3	10	0.14	0.01	0.14
(1,126)	1:7:A:LEU:HD11	1:7:A:LEU:HG	10	0.14	0.01	0.14
(1,126)	1:7:A:LEU:HD12	1:7:A:LEU:HG	10	0.14	0.01	0.14
(1,126)	1:7:A:LEU:HD13	1:7:A:LEU:HG	10	0.14	0.01	0.14
(1,257)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG11	10	0.13	0.01	0.13
(1,257)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG12	10	0.13	0.01	0.13
(1,257)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG13	10	0.13	0.01	0.13
(1,257)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG21	10	0.13	0.01	0.13
(1,257)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG22	10	0.13	0.01	0.13
(1,257)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG23	10	0.13	0.01	0.13
(1,341)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	10	0.13	0.01	0.12
(2,456)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:H	10	0.12	0.01	0.13
(2,456)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:H	10	0.12	0.01	0.13
(2,456)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:H	10	0.12	0.01	0.13
(3,430)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:H	10	0.12	0.01	0.13
(3,430)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:H	10	0.12	0.01	0.13
(3,430)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:H	10	0.12	0.01	0.13
(1,163)	1:9:A:ILE:HG12	1:9:A:ILE:HG13	10	0.12	0.0	0.12
(1,609)	1:15:A:GLY:HA2	1:19:A:SER:HB3	9	1.33	0.09	1.34
(1,48)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG2	9	0.48	0.14	0.52
(2,581)	1:19:A:SER:HB2	1:20:A:GLY:H	9	0.45	0.04	0.46
(3,548)	1:19:A:SER:HB2	1:20:A:GLY:H	9	0.45	0.04	0.46
(1,613)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HG3	9	0.42	0.24	0.39

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,590)	1:2:A:GLU:HB2	1:5:A:VAL:H	9	0.41	0.11	0.46
(1,38)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HG2	9	0.4	0.16	0.35
(2,542)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HB2	9	0.36	0.17	0.23
(2,542)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HB2	9	0.36	0.17	0.23
(2,542)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HB2	9	0.36	0.17	0.23
(2,542)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HB3	9	0.36	0.17	0.23
(2,542)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HB3	9	0.36	0.17	0.23
(2,542)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HB3	9	0.36	0.17	0.23
(4,29)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HB2	9	0.36	0.17	0.23
(4,29)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HB2	9	0.36	0.17	0.23
(4,29)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HB2	9	0.36	0.17	0.23
(4,29)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HB3	9	0.36	0.17	0.23
(4,29)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HB3	9	0.36	0.17	0.23
(4,29)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HB3	9	0.36	0.17	0.23
(1,221)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HD2	9	0.35	0.01	0.35
(1,221)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HD3	9	0.35	0.01	0.35
(1,221)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HD2	9	0.35	0.01	0.35
(1,221)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HD3	9	0.35	0.01	0.35
(1,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG11	9	0.34	0.12	0.4
(1,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG12	9	0.34	0.12	0.4
(1,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG13	9	0.34	0.12	0.4
(1,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG11	9	0.34	0.12	0.4
(1,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG12	9	0.34	0.12	0.4
(1,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG13	9	0.34	0.12	0.4
(1,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG11	9	0.34	0.12	0.4
(1,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG12	9	0.34	0.12	0.4
(1,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG13	9	0.34	0.12	0.4
(1,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	9	0.34	0.12	0.4
(1,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	9	0.34	0.12	0.4
(1,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	9	0.34	0.12	0.4
(1,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	9	0.34	0.12	0.4
(1,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	9	0.34	0.12	0.4
(1,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	9	0.34	0.12	0.4
(1,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	9	0.34	0.12	0.4
(1,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	9	0.34	0.12	0.4
(1,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	9	0.34	0.12	0.4
(1,493)	1:21:A:ARG:HB2	1:22:A:PRO:HD2	9	0.32	0.11	0.28
(1,493)	1:21:A:ARG:HB3	1:22:A:PRO:HD2	9	0.32	0.11	0.28
(1,496)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD2	9	0.28	0.12	0.29
(1,496)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	9	0.28	0.12	0.29
(1,607)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HD3	9	0.27	0.05	0.26
(1,453)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:H	9	0.25	0.07	0.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,453)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:H	9	0.25	0.07	0.24
(1,453)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:H	9	0.25	0.07	0.24
(1,453)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:H	9	0.25	0.07	0.24
(1,453)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:H	9	0.25	0.07	0.24
(1,453)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:H	9	0.25	0.07	0.24
(1,438)	1:18:A:SER:HA	1:20:A:GLY:H	9	0.25	0.07	0.28
(1,458)	1:19:A:SER:HB3	1:21:A:ARG:H	9	0.24	0.05	0.25
(1,396)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:H	9	0.23	0.04	0.25
(1,92)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	9	0.22	0.04	0.22
(1,92)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD3	9	0.22	0.04	0.22
(1,623)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HG2	9	0.18	0.01	0.19
(1,71)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HB3	9	0.12	0.01	0.12
(1,140)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HB3	9	0.12	0.0	0.12
(1,42)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HE	8	1.25	0.13	1.28
(1,42)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HE	8	1.25	0.13	1.28
(1,464)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:H	8	0.77	0.47	0.98
(2,625)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HG2	8	0.64	0.19	0.64
(2,625)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HG2	8	0.64	0.19	0.64
(3,587)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HG2	8	0.64	0.19	0.64
(3,587)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HG2	8	0.64	0.19	0.64
(1,491)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB3	8	0.3	0.12	0.32
(1,116)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HB2	8	0.3	0.1	0.28
(1,116)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HB3	8	0.3	0.1	0.28
(1,53)	1:6:A:ARG:HD3	1:6:A:ARG:HG2	8	0.27	0.03	0.26
(1,100)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD3	8	0.24	0.08	0.28
(1,34)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HG2	8	0.24	0.1	0.26
(1,34)	1:21:A:ARG:HD3	1:21:A:ARG:HG2	8	0.24	0.1	0.26
(1,28)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HB2	8	0.15	0.02	0.16
(1,98)	1:23:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD3	8	0.15	0.03	0.15
(1,615)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HA	8	0.12	0.01	0.11
(2,514)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HB2	7	1.84	0.7	2.09
(2,514)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HB2	7	1.84	0.7	2.09
(2,514)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HB2	7	1.84	0.7	2.09
(4,28)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HB2	7	1.84	0.7	2.09
(4,28)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HB2	7	1.84	0.7	2.09
(4,28)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HB2	7	1.84	0.7	2.09
(1,468)	1:24:A:PRO:HG2	1:25:A:SER:H	7	0.5	0.32	0.47
(1,51)	1:6:A:ARG:HD2	1:6:A:ARG:HG3	7	0.43	0.06	0.41
(1,317)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB2	7	0.41	0.15	0.48
(1,317)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB2	7	0.41	0.15	0.48
(1,520)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD11	7	0.33	0.14	0.32
(1,520)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD12	7	0.33	0.14	0.32

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,520)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD13	7	0.33	0.14	0.32
(1,486)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:HA	7	0.31	0.11	0.25
(1,289)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HG2	7	0.21	0.04	0.22
(1,289)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HG3	7	0.21	0.04	0.22
(1,115)	1:25:A:SER:HA	1:25:A:SER:HB2	7	0.16	0.06	0.14
(1,115)	1:25:A:SER:HA	1:25:A:SER:HB3	7	0.16	0.06	0.14
(1,514)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HB2	6	1.52	0.08	1.49
(1,514)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HB2	6	1.52	0.08	1.49
(1,514)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HB2	6	1.52	0.08	1.49
(2,511)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HB2	6	1.25	0.69	1.19
(3,484)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HB2	6	1.25	0.69	1.19
(1,437)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:H	6	1.22	0.04	1.23
(1,437)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:H	6	1.22	0.04	1.23
(1,437)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:H	6	1.22	0.04	1.23
(2,120)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	6	1.07	0.07	1.04
(2,120)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	6	1.07	0.07	1.04
(2,120)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	6	1.07	0.07	1.04
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	6	1.07	0.07	1.04
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	6	1.07	0.07	1.04
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	6	1.07	0.07	1.04
(1,40)	1:21:A:ARG:HE	1:21:A:ARG:HG3	6	0.95	0.16	1.04
(1,41)	1:21:A:ARG:HE	1:21:A:ARG:HG2	6	0.86	0.35	0.92
(2,627)	1:7:A:LEU:HD21	1:10:A:GLN:HG2	6	0.83	0.04	0.84
(2,627)	1:7:A:LEU:HD22	1:10:A:GLN:HG2	6	0.83	0.04	0.84
(2,627)	1:7:A:LEU:HD23	1:10:A:GLN:HG2	6	0.83	0.04	0.84
(3,589)	1:7:A:LEU:HD21	1:10:A:GLN:HG2	6	0.83	0.04	0.84
(3,589)	1:7:A:LEU:HD22	1:10:A:GLN:HG2	6	0.83	0.04	0.84
(3,589)	1:7:A:LEU:HD23	1:10:A:GLN:HG2	6	0.83	0.04	0.84
(1,135)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HG	6	0.7	0.09	0.74
(2,543)	1:7:A:LEU:HD21	1:10:A:GLN:HB2	6	0.6	0.08	0.64
(2,543)	1:7:A:LEU:HD22	1:10:A:GLN:HB2	6	0.6	0.08	0.64
(2,543)	1:7:A:LEU:HD23	1:10:A:GLN:HB2	6	0.6	0.08	0.64
(3,514)	1:7:A:LEU:HD21	1:10:A:GLN:HB2	6	0.6	0.08	0.64
(3,514)	1:7:A:LEU:HD22	1:10:A:GLN:HB2	6	0.6	0.08	0.64
(3,514)	1:7:A:LEU:HD23	1:10:A:GLN:HB2	6	0.6	0.08	0.64
(2,469)	1:23:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	6	0.6	0.21	0.59
(3,443)	1:23:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	6	0.6	0.21	0.59
(2,136)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB2	6	0.55	0.06	0.55
(4,4)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB2	6	0.55	0.06	0.55
(2,130)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD11	6	0.54	0.06	0.52
(2,130)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD12	6	0.54	0.06	0.52
(2,130)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD13	6	0.54	0.06	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(3,127)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD11	6	0.54	0.06	0.52
(3,127)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD12	6	0.54	0.06	0.52
(3,127)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD13	6	0.54	0.06	0.52
(1,55)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HD2	6	0.51	0.08	0.52
(1,233)	1:14:A:GLU:H	1:14:A:GLU:HG2	6	0.42	0.1	0.46
(1,376)	1:5:A:VAL:H	1:6:A:ARG:H	6	0.41	0.02	0.41
(1,627)	1:7:A:LEU:HD21	1:10:A:GLN:HG2	6	0.38	0.03	0.4
(1,627)	1:7:A:LEU:HD22	1:10:A:GLN:HG2	6	0.38	0.03	0.4
(1,627)	1:7:A:LEU:HD23	1:10:A:GLN:HG2	6	0.38	0.03	0.4
(2,148)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HG2	6	0.36	0.12	0.38
(3,141)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HG2	6	0.36	0.12	0.38
(2,604)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HB3	6	0.35	0.12	0.42
(3,568)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HB3	6	0.35	0.12	0.42
(2,435)	1:7:A:LEU:HB3	1:8:A:TYR:H	6	0.34	0.04	0.32
(4,21)	1:7:A:LEU:HB3	1:8:A:TYR:H	6	0.34	0.04	0.32
(1,123)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HB3	6	0.33	0.01	0.33
(1,463)	1:24:A:PRO:HD2	1:25:A:SER:H	6	0.32	0.12	0.38
(1,537)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD21	6	0.24	0.08	0.22
(1,537)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD22	6	0.24	0.08	0.22
(1,537)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD23	6	0.24	0.08	0.22
(1,537)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD21	6	0.24	0.08	0.22
(1,537)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD22	6	0.24	0.08	0.22
(1,537)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD23	6	0.24	0.08	0.22
(1,599)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HG	6	0.22	0.1	0.18
(2,570)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:H	6	0.22	0.03	0.2
(4,33)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:H	6	0.22	0.03	0.2
(1,125)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HG	6	0.19	0.08	0.16
(1,366)	1:11:A:TRP:HE1	1:22:A:PRO:HA	6	0.18	0.05	0.18
(1,303)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB3	6	0.15	0.04	0.15
(1,303)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB3	6	0.15	0.04	0.15
(2,561)	1:11:A:TRP:HE3	1:24:A:PRO:HD3	6	0.15	0.02	0.16
(3,530)	1:11:A:TRP:HE3	1:24:A:PRO:HD3	6	0.15	0.02	0.16
(2,85)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HG3	6	0.15	0.06	0.11
(3,85)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HG3	6	0.15	0.06	0.11
(1,154)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:H	6	0.14	0.01	0.15
(1,333)	1:11:A:TRP:HZ2	1:22:A:PRO:HA	6	0.14	0.03	0.14
(2,563)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	6	0.12	0.02	0.11
(2,563)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	6	0.12	0.02	0.11
(2,563)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	6	0.12	0.02	0.11
(2,563)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	6	0.12	0.02	0.11
(2,563)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	6	0.12	0.02	0.11
(2,563)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	6	0.12	0.02	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(3,532)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	6	0.12	0.02	0.11
(3,532)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	6	0.12	0.02	0.11
(3,532)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	6	0.12	0.02	0.11
(3,532)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	6	0.12	0.02	0.11
(3,532)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	6	0.12	0.02	0.11
(3,532)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	6	0.12	0.02	0.11
(1,205)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HG	6	0.11	0.01	0.11
(2,539)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HB2	5	1.15	0.36	1.33
(2,539)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HB2	5	1.15	0.36	1.33
(2,539)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HB2	5	1.15	0.36	1.33
(3,511)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HB2	5	1.15	0.36	1.33
(3,511)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HB2	5	1.15	0.36	1.33
(3,511)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HB2	5	1.15	0.36	1.33
(1,511)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HB2	5	0.91	0.54	0.65
(1,631)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HG3	5	0.75	0.16	0.68
(1,631)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HG3	5	0.75	0.16	0.68
(1,631)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HG3	5	0.75	0.16	0.68
(1,538)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HB2	5	0.69	0.18	0.66
(1,538)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HB2	5	0.69	0.18	0.66
(1,538)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HB2	5	0.69	0.18	0.66
(1,316)	1:8:A:TYR:HD1	1:23:A:PRO:HB2	5	0.47	0.04	0.45
(1,316)	1:8:A:TYR:HD2	1:23:A:PRO:HB2	5	0.47	0.04	0.45
(1,502)	1:11:A:TRP:HB3	1:24:A:PRO:HG3	5	0.4	0.24	0.28
(1,132)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD11	5	0.39	0.07	0.44
(1,132)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD12	5	0.39	0.07	0.44
(1,132)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD13	5	0.39	0.07	0.44
(1,54)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HD3	5	0.39	0.2	0.36
(1,294)	1:10:A:GLN:HE22	1:14:A:GLU:HG2	5	0.33	0.05	0.35
(1,234)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HG2	5	0.31	0.06	0.33
(2,304)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG2	5	0.26	0.07	0.29
(2,304)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG2	5	0.26	0.07	0.29
(3,292)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG2	5	0.26	0.07	0.29
(3,292)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG2	5	0.26	0.07	0.29
(2,574)	1:6:A:ARG:HB3	1:7:A:LEU:H	5	0.24	0.06	0.24
(3,541)	1:6:A:ARG:HB3	1:7:A:LEU:H	5	0.24	0.06	0.24
(2,646)	1:11:A:TRP:HE3	1:23:A:PRO:HB2	5	0.23	0.07	0.22
(3,605)	1:11:A:TRP:HE3	1:23:A:PRO:HB2	5	0.23	0.07	0.22
(1,625)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HG2	5	0.22	0.09	0.24
(1,625)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HG2	5	0.22	0.09	0.24
(1,129)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD11	5	0.21	0.03	0.19
(1,129)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD12	5	0.21	0.03	0.19
(1,129)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD13	5	0.21	0.03	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,344)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG2	5	0.17	0.05	0.17
(1,344)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG3	5	0.17	0.05	0.17
(1,399)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:H	5	0.16	0.04	0.17
(1,579)	1:10:A:GLN:HB3	1:11:A:TRP:H	5	0.13	0.03	0.12
(2,513)	1:2:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB1	5	0.13	0.02	0.13
(2,513)	1:2:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB2	5	0.13	0.02	0.13
(2,513)	1:2:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB3	5	0.13	0.02	0.13
(3,486)	1:2:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB1	5	0.13	0.02	0.13
(3,486)	1:2:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB2	5	0.13	0.02	0.13
(3,486)	1:2:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB3	5	0.13	0.02	0.13
(2,516)	1:12:A:LEU:HB3	1:13:A:LYS:HG3	5	0.13	0.01	0.13
(3,488)	1:12:A:LEU:HB3	1:13:A:LYS:HG3	5	0.13	0.01	0.13
(1,113)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HG3	5	0.12	0.03	0.11
(2,405)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:HB3	5	0.12	0.01	0.11
(3,385)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:HB3	5	0.12	0.01	0.11
(2,598)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD21	4	1.31	0.05	1.31
(2,598)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD22	4	1.31	0.05	1.31
(2,598)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD23	4	1.31	0.05	1.31
(3,562)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD21	4	1.31	0.05	1.31
(3,562)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD22	4	1.31	0.05	1.31
(3,562)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD23	4	1.31	0.05	1.31
(1,539)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HB2	4	0.76	0.02	0.76
(1,539)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HB2	4	0.76	0.02	0.76
(1,539)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HB2	4	0.76	0.02	0.76
(1,598)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD21	4	0.67	0.05	0.66
(1,598)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD22	4	0.67	0.05	0.66
(1,598)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD23	4	0.67	0.05	0.66
(2,538)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HB2	4	0.64	0.02	0.64
(2,538)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HB2	4	0.64	0.02	0.64
(2,538)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HB2	4	0.64	0.02	0.64
(3,510)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HB2	4	0.64	0.02	0.64
(3,510)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HB2	4	0.64	0.02	0.64
(3,510)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HB2	4	0.64	0.02	0.64
(1,543)	1:7:A:LEU:HD21	1:10:A:GLN:HB2	4	0.63	0.05	0.6
(1,543)	1:7:A:LEU:HD22	1:10:A:GLN:HB2	4	0.63	0.05	0.6
(1,543)	1:7:A:LEU:HD23	1:10:A:GLN:HB2	4	0.63	0.05	0.6
(1,543)	1:7:A:LEU:HD21	1:10:A:GLN:HB3	4	0.63	0.05	0.6
(1,543)	1:7:A:LEU:HD22	1:10:A:GLN:HB3	4	0.63	0.05	0.6
(1,543)	1:7:A:LEU:HD23	1:10:A:GLN:HB3	4	0.63	0.05	0.6
(1,149)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HE	4	0.56	0.22	0.52
(1,490)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB2	4	0.44	0.09	0.44
(1,473)	1:14:A:GLU:HB2	1:15:A:GLY:H	4	0.43	0.03	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,473)	1:14:A:GLU:HB3	1:15:A:GLY:H	4	0.43	0.03	0.44
(2,635)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD11	4	0.42	0.36	0.24
(2,635)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD12	4	0.42	0.36	0.24
(2,635)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD13	4	0.42	0.36	0.24
(2,635)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD11	4	0.42	0.36	0.24
(2,635)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD12	4	0.42	0.36	0.24
(2,635)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD13	4	0.42	0.36	0.24
(2,635)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD11	4	0.42	0.36	0.24
(2,635)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD12	4	0.42	0.36	0.24
(2,635)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD13	4	0.42	0.36	0.24
(3,596)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD11	4	0.42	0.36	0.24
(3,596)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD12	4	0.42	0.36	0.24
(3,596)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD13	4	0.42	0.36	0.24
(3,596)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD11	4	0.42	0.36	0.24
(3,596)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD12	4	0.42	0.36	0.24
(3,596)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD13	4	0.42	0.36	0.24
(3,596)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD11	4	0.42	0.36	0.24
(3,596)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD12	4	0.42	0.36	0.24
(3,596)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD13	4	0.42	0.36	0.24
(1,136)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB2	4	0.36	0.01	0.36
(1,50)	1:6:A:ARG:HD3	1:6:A:ARG:HG3	4	0.28	0.04	0.28
(1,63)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HG3	4	0.28	0.02	0.28
(1,240)	1:14:A:GLU:H	1:14:A:GLU:HG3	4	0.27	0.04	0.26
(1,52)	1:6:A:ARG:HD2	1:6:A:ARG:HG2	4	0.25	0.03	0.26
(2,630)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HG3	4	0.24	0.02	0.25
(2,630)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HG3	4	0.24	0.02	0.25
(2,630)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HG3	4	0.24	0.02	0.25
(4,39)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HG3	4	0.24	0.02	0.25
(4,39)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HG3	4	0.24	0.02	0.25
(4,39)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HG3	4	0.24	0.02	0.25
(2,467)	1:24:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	4	0.21	0.02	0.22
(3,441)	1:24:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	4	0.21	0.02	0.22
(2,133)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD21	4	0.2	0.01	0.2
(2,133)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD22	4	0.2	0.01	0.2
(2,133)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD23	4	0.2	0.01	0.2
(3,130)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD21	4	0.2	0.01	0.2
(3,130)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD22	4	0.2	0.01	0.2
(3,130)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD23	4	0.2	0.01	0.2
(1,638)	1:9:A:ILE:HA	1:11:A:TRP:HE3	4	0.19	0.02	0.18
(2,240)	1:14:A:GLU:H	1:14:A:GLU:HG3	4	0.18	0.02	0.2
(2,291)	1:10:A:GLN:HE21	1:14:A:GLU:HG2	4	0.18	0.07	0.18
(3,229)	1:14:A:GLU:H	1:14:A:GLU:HG3	4	0.18	0.02	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(3,279)	1:10:A:GLN:HE21	1:14:A:GLU:HG2	4	0.18	0.07	0.18
(1,635)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD11	4	0.18	0.04	0.19
(1,635)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD12	4	0.18	0.04	0.19
(1,635)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD13	4	0.18	0.04	0.19
(1,635)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD11	4	0.18	0.04	0.19
(1,635)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD12	4	0.18	0.04	0.19
(1,635)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD13	4	0.18	0.04	0.19
(1,635)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD11	4	0.18	0.04	0.19
(1,635)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD12	4	0.18	0.04	0.19
(1,635)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD13	4	0.18	0.04	0.19
(1,635)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HD11	4	0.18	0.04	0.19
(1,635)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HD12	4	0.18	0.04	0.19
(1,635)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HD13	4	0.18	0.04	0.19
(1,635)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HD11	4	0.18	0.04	0.19
(1,635)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HD12	4	0.18	0.04	0.19
(1,635)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HD13	4	0.18	0.04	0.19
(1,635)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HD11	4	0.18	0.04	0.19
(1,635)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HD12	4	0.18	0.04	0.19
(1,635)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HD13	4	0.18	0.04	0.19
(1,281)	1:18:A:SER:H	1:18:A:SER:HB2	4	0.17	0.05	0.16
(1,281)	1:18:A:SER:H	1:18:A:SER:HB3	4	0.17	0.05	0.16
(2,472)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:H	4	0.16	0.04	0.17
(3,446)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:H	4	0.16	0.04	0.17
(1,425)	1:16:A:GLY:H	1:19:A:SER:HB2	4	0.16	0.02	0.16
(1,153)	1:6:A:ARG:HD2	1:6:A:ARG:HE	4	0.16	0.04	0.16
(2,636)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HG12	4	0.16	0.03	0.17
(2,636)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HG12	4	0.16	0.03	0.17
(3,597)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HG12	4	0.16	0.03	0.17
(3,597)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HG12	4	0.16	0.03	0.17
(1,122)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HG	4	0.15	0.02	0.16
(2,515)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB1	4	0.15	0.01	0.15
(2,515)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB2	4	0.15	0.01	0.15
(2,515)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB3	4	0.15	0.01	0.15
(3,487)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB1	4	0.15	0.01	0.15
(3,487)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB2	4	0.15	0.01	0.15
(3,487)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB3	4	0.15	0.01	0.15
(2,132)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD11	4	0.15	0.01	0.15
(2,132)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD12	4	0.15	0.01	0.15
(2,132)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD13	4	0.15	0.01	0.15
(3,129)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD11	4	0.15	0.01	0.15
(3,129)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD12	4	0.15	0.01	0.15
(3,129)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD13	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)
(1,428)	1:18:A:SER:HA	1:19:A:SER:H	4	0.15	0.04	0.14
(2,409)	1:6:A:ARG:HG2	1:7:A:LEU:H	4	0.13	0.01	0.13
(3,389)	1:6:A:ARG:HG2	1:7:A:LEU:H	4	0.13	0.01	0.13
(1,277)	1:2:A:GLU:HB3	1:2:A:GLU:HG2	4	0.13	0.01	0.14
(1,601)	1:3:A:GLU:HA	1:6:A:ARG:HG2	3	0.7	0.17	0.66
(1,533)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HE2	3	0.68	0.23	0.82
(1,533)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HE2	3	0.68	0.23	0.82
(1,533)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HE2	3	0.68	0.23	0.82
(1,219)	1:13:A:LYS:HE2	1:13:A:LYS:HG2	3	0.54	0.01	0.54
(1,220)	1:13:A:LYS:HE2	1:13:A:LYS:HG3	3	0.43	0.1	0.5
(1,535)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG11	3	0.43	0.17	0.4
(1,535)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG12	3	0.43	0.17	0.4
(1,535)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG13	3	0.43	0.17	0.4
(1,535)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	3	0.43	0.17	0.4
(1,535)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	3	0.43	0.17	0.4
(1,535)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	3	0.43	0.17	0.4
(1,535)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG11	3	0.43	0.17	0.4
(1,535)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG12	3	0.43	0.17	0.4
(1,535)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG13	3	0.43	0.17	0.4
(1,535)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG21	3	0.43	0.17	0.4
(1,535)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG22	3	0.43	0.17	0.4
(1,535)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG23	3	0.43	0.17	0.4
(1,469)	1:23:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	3	0.25	0.11	0.24
(1,128)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD21	3	0.19	0.12	0.11
(1,128)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD22	3	0.19	0.12	0.11
(1,128)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD23	3	0.19	0.12	0.11
(2,662)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD2	3	0.19	0.05	0.2
(2,662)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	3	0.19	0.05	0.2
(3,617)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD2	3	0.19	0.05	0.2
(3,617)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	3	0.19	0.05	0.2
(2,594)	1:11:A:TRP:HE3	1:23:A:PRO:HB3	3	0.17	0.05	0.16
(4,36)	1:11:A:TRP:HE3	1:23:A:PRO:HB3	3	0.17	0.05	0.16
(2,528)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB3	3	0.15	0.02	0.14
(2,528)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB3	3	0.15	0.02	0.14
(2,528)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB3	3	0.15	0.02	0.14
(3,500)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB3	3	0.15	0.02	0.14
(3,500)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB3	3	0.15	0.02	0.14
(3,500)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB3	3	0.15	0.02	0.14
(1,118)	1:6:A:ARG:H	1:7:A:LEU:H	3	0.14	0.03	0.12
(1,44)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HD2	3	0.14	0.04	0.12
(2,134)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB3	3	0.11	0.0	0.11
(3,131)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB3	3	0.11	0.0	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(2,102)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HB2	3	0.11	0.0	0.11
(3,102)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HB2	3	0.11	0.0	0.11
(2,398)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:H	3	0.1	0.0	0.1
(3,378)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:H	3	0.1	0.0	0.1
(1,608)	1:3:A:GLU:HA	1:6:A:ARG:HD2	2	1.23	0.15	1.23
(1,655)	1:3:A:GLU:HA	1:6:A:ARG:HD3	2	0.8	0.52	0.8
(1,360)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HG2	2	0.7	0.02	0.7
(1,544)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG13	2	0.38	0.26	0.38
(1,544)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG13	2	0.38	0.26	0.38
(1,544)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG13	2	0.38	0.26	0.38
(1,56)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HD2	2	0.32	0.01	0.32
(2,650)	1:14:A:GLU:HG3	1:15:A:GLY:H	2	0.28	0.04	0.28
(3,609)	1:14:A:GLU:HG3	1:15:A:GLY:H	2	0.28	0.04	0.28
(1,307)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HG	2	0.24	0.03	0.24
(1,307)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HG	2	0.24	0.03	0.24
(2,387)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HZ3	2	0.21	0.0	0.21
(2,387)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HZ3	2	0.21	0.0	0.21
(3,368)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HZ3	2	0.21	0.0	0.21
(3,368)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HZ3	2	0.21	0.0	0.21
(1,589)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:H	2	0.2	0.02	0.2
(1,633)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HG3	2	0.18	0.04	0.18
(1,633)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HG3	2	0.18	0.04	0.18
(1,633)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HG3	2	0.18	0.04	0.18
(1,633)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HG3	2	0.18	0.04	0.18
(1,633)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HG3	2	0.18	0.04	0.18
(1,633)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HG3	2	0.18	0.04	0.18
(1,33)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD2	2	0.18	0.0	0.18
(1,33)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD3	2	0.18	0.0	0.18
(1,33)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HD2	2	0.18	0.0	0.18
(1,33)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HD3	2	0.18	0.0	0.18
(1,626)	1:2:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	2	0.18	0.02	0.18
(1,626)	1:2:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	2	0.18	0.02	0.18
(1,626)	1:2:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	2	0.18	0.02	0.18
(1,58)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HG2	2	0.16	0.01	0.16
(1,49)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG3	2	0.16	0.01	0.16
(2,329)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB2	2	0.16	0.02	0.16
(2,329)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB3	2	0.16	0.02	0.16
(3,314)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB2	2	0.16	0.02	0.16
(3,314)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB3	2	0.16	0.02	0.16
(1,461)	1:17:A:PRO:HD2	1:18:A:SER:H	2	0.15	0.03	0.15
(1,280)	1:18:A:SER:HA	1:18:A:SER:HB2	2	0.14	0.01	0.14
(1,280)	1:18:A:SER:HA	1:18:A:SER:HB3	2	0.14	0.01	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

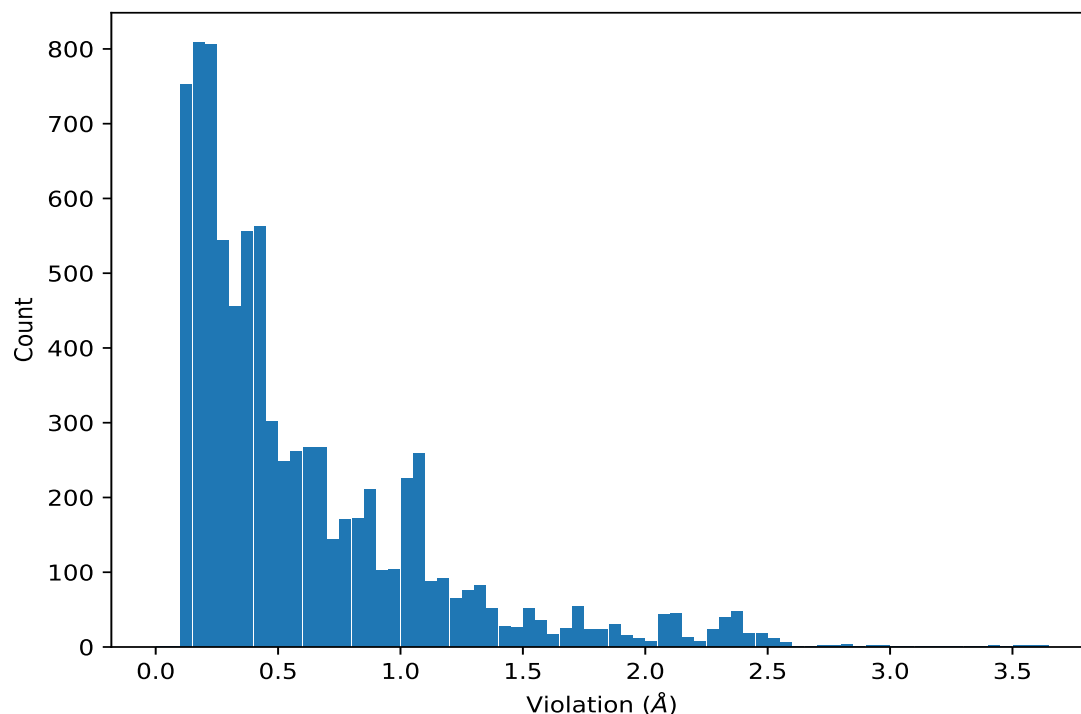
Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,566)	1:19:A:SER:H	1:21:A:ARG:H	2	0.14	0.01	0.14
(1,596)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HG13	2	0.12	0.01	0.12
(1,596)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HG13	2	0.12	0.01	0.12
(2,644)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:HE3	2	0.12	0.01	0.12
(3,603)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:HE3	2	0.12	0.01	0.12
(2,233)	1:14:A:GLU:H	1:14:A:GLU:HG2	2	0.11	0.0	0.11
(2,480)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HA	2	0.11	0.0	0.11
(3,223)	1:14:A:GLU:H	1:14:A:GLU:HG2	2	0.11	0.0	0.11
(3,454)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HA	2	0.11	0.0	0.11
(1,223)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HG3	2	0.11	0.0	0.11
(1,223)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HG3	2	0.11	0.0	0.11
(2,576)	1:6:A:ARG:H	1:7:A:LEU:HG	2	0.11	0.0	0.11
(3,543)	1:6:A:ARG:H	1:7:A:LEU:HG	2	0.11	0.0	0.11

¹Number of violated models, ²Standard deviation

9.5 All violated distance restraints [i](#)

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

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



9.5.2 Table : All distance violations

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)
(4,44)	1:10:A:GLN:HG3	1:14:A:GLU:HG2	2	3.63
(2,658)	1:10:A:GLN:HG3	1:14:A:GLU:HG2	2	3.63
(4,44)	1:10:A:GLN:HG3	1:14:A:GLU:HG2	4	3.57
(2,658)	1:10:A:GLN:HG3	1:14:A:GLU:HG2	4	3.57
(4,44)	1:10:A:GLN:HG3	1:14:A:GLU:HG2	1	3.54
(2,658)	1:10:A:GLN:HG3	1:14:A:GLU:HG2	1	3.54
(4,44)	1:10:A:GLN:HG3	1:14:A:GLU:HG2	3	3.44
(2,658)	1:10:A:GLN:HG3	1:14:A:GLU:HG2	3	3.44
(1,658)	1:10:A:GLN:HG3	1:14:A:GLU:HG2	2	3.0
(4,44)	1:10:A:GLN:HG3	1:14:A:GLU:HG2	8	2.96
(2,658)	1:10:A:GLN:HG3	1:14:A:GLU:HG2	8	2.96
(1,658)	1:10:A:GLN:HG3	1:14:A:GLU:HG2	4	2.93
(1,658)	1:10:A:GLN:HG3	1:14:A:GLU:HG2	1	2.91
(1,658)	1:10:A:GLN:HG3	1:14:A:GLU:HG2	3	2.81
(4,43)	1:10:A:GLN:HG2	1:14:A:GLU:HG2	2	2.8
(2,657)	1:10:A:GLN:HG2	1:14:A:GLU:HG2	2	2.8
(4,43)	1:10:A:GLN:HG2	1:14:A:GLU:HG2	4	2.75
(2,657)	1:10:A:GLN:HG2	1:14:A:GLU:HG2	4	2.75
(4,43)	1:10:A:GLN:HG2	1:14:A:GLU:HG2	1	2.73
(2,657)	1:10:A:GLN:HG2	1:14:A:GLU:HG2	1	2.73
(4,43)	1:10:A:GLN:HG2	1:14:A:GLU:HG2	3	2.57
(2,657)	1:10:A:GLN:HG2	1:14:A:GLU:HG2	3	2.57
(4,44)	1:10:A:GLN:HG3	1:14:A:GLU:HG2	7	2.55
(3,484)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HB2	7	2.55
(2,658)	1:10:A:GLN:HG3	1:14:A:GLU:HG2	7	2.55
(2,511)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HB2	7	2.55
(3,299)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	5	2.52
(3,299)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	5	2.52
(3,299)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	5	2.52
(3,299)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	5	2.52
(3,299)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	5	2.52
(3,299)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	5	2.52
(2,311)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	5	2.52
(2,311)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	5	2.52
(2,311)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	5	2.52
(2,311)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	5	2.52
(2,311)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	5	2.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,311)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	5	2.52
(3,299)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	9	2.48
(3,299)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	9	2.48
(3,299)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	9	2.48
(3,299)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	9	2.48
(3,299)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	9	2.48
(3,299)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	9	2.48
(2,311)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	9	2.48
(2,311)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	9	2.48
(2,311)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	9	2.48
(2,311)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	9	2.48
(2,311)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	9	2.48
(2,311)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	9	2.48
(3,508)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	9	2.45
(3,508)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	9	2.45
(3,508)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	9	2.45
(2,536)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	9	2.45
(2,536)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	9	2.45
(2,536)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	9	2.45
(3,299)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	3	2.41
(3,299)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	3	2.41
(3,299)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	3	2.41
(3,299)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	3	2.41
(3,299)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	3	2.41
(3,299)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	3	2.41
(2,311)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	3	2.41
(2,311)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	3	2.41
(2,311)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	3	2.41
(2,311)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	3	2.41
(2,311)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	3	2.41
(2,311)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	3	2.41
(3,489)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	4	2.4
(3,489)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	4	2.4
(3,489)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	4	2.4
(2,517)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	4	2.4
(2,517)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	4	2.4
(2,517)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	4	2.4
(3,299)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	1	2.39
(3,299)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	1	2.39
(3,299)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	1	2.39
(3,299)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	1	2.39
(3,299)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	1	2.39

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,299)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	1	2.39
(3,299)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	2	2.39
(3,299)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	2	2.39
(3,299)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	2	2.39
(3,299)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	2	2.39
(3,299)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	2	2.39
(3,299)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	2	2.39
(2,311)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	1	2.39
(2,311)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	1	2.39
(2,311)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	1	2.39
(2,311)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	1	2.39
(2,311)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	1	2.39
(2,311)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	1	2.39
(2,311)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	2	2.39
(2,311)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	2	2.39
(2,311)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	2	2.39
(2,311)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	2	2.39
(2,311)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	2	2.39
(2,311)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	2	2.39
(3,516)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG21	4	2.37
(3,516)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG22	4	2.37
(3,516)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG23	4	2.37
(3,508)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	10	2.37
(3,508)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	10	2.37
(3,508)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	10	2.37
(3,299)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	4	2.37
(3,299)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	4	2.37
(3,299)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	4	2.37
(3,299)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	4	2.37
(3,299)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	4	2.37
(3,299)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	4	2.37
(2,545)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG21	4	2.37
(2,545)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG22	4	2.37
(2,545)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG23	4	2.37
(2,536)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	10	2.37
(2,536)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	10	2.37
(2,536)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	10	2.37
(2,311)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	4	2.37
(2,311)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	4	2.37
(2,311)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	4	2.37
(2,311)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	4	2.37
(2,311)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	4	2.37

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,311)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	4	2.37
(3,508)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	8	2.33
(3,508)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	8	2.33
(3,508)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	8	2.33
(3,299)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	8	2.33
(3,299)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	8	2.33
(3,299)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	8	2.33
(3,299)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	8	2.33
(3,299)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	8	2.33
(3,299)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	8	2.33
(2,536)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	8	2.33
(2,536)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	8	2.33
(2,536)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	8	2.33
(2,311)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	8	2.33
(2,311)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	8	2.33
(2,311)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	8	2.33
(2,311)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	8	2.33
(2,311)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	8	2.33
(2,311)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	8	2.33
(1,658)	1:10:A:GLN:HG3	1:14:A:GLU:HG2	8	2.33
(4,44)	1:10:A:GLN:HG3	1:14:A:GLU:HG2	10	2.32
(3,299)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	10	2.32
(3,299)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	10	2.32
(3,299)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	10	2.32
(3,299)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	10	2.32
(3,299)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	10	2.32
(3,299)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	10	2.32
(2,658)	1:10:A:GLN:HG3	1:14:A:GLU:HG2	10	2.32
(2,311)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	10	2.32
(2,311)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	10	2.32
(2,311)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	10	2.32
(2,311)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	10	2.32
(2,311)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	10	2.32
(2,311)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	10	2.32
(4,28)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HB2	7	2.31
(4,28)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HB2	7	2.31
(4,28)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HB2	7	2.31
(2,514)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HB2	7	2.31
(2,514)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HB2	7	2.31
(2,514)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HB2	7	2.31
(3,594)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HG3	9	2.27
(3,594)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HG3	9	2.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,594)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HG3	9	2.27
(3,508)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	3	2.27
(3,508)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	3	2.27
(3,508)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	3	2.27
(2,633)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HG3	9	2.27
(2,633)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HG3	9	2.27
(2,633)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HG3	9	2.27
(2,536)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	3	2.27
(2,536)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	3	2.27
(2,536)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	3	2.27
(3,299)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	7	2.26
(3,299)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	7	2.26
(3,299)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	7	2.26
(3,299)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	7	2.26
(3,299)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	7	2.26
(3,299)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	7	2.26
(2,311)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	7	2.26
(2,311)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	7	2.26
(2,311)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	7	2.26
(2,311)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	7	2.26
(2,311)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	7	2.26
(2,311)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	7	2.26
(4,44)	1:10:A:GLN:HG3	1:14:A:GLU:HG2	5	2.23
(4,44)	1:10:A:GLN:HG3	1:14:A:GLU:HG2	6	2.23
(2,658)	1:10:A:GLN:HG3	1:14:A:GLU:HG2	5	2.23
(2,658)	1:10:A:GLN:HG3	1:14:A:GLU:HG2	6	2.23
(4,44)	1:10:A:GLN:HG3	1:14:A:GLU:HG2	9	2.22
(2,658)	1:10:A:GLN:HG3	1:14:A:GLU:HG2	9	2.22
(1,657)	1:10:A:GLN:HG2	1:14:A:GLU:HG2	2	2.21
(3,508)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	6	2.18
(3,508)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	6	2.18
(3,508)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	6	2.18
(2,536)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	6	2.18
(2,536)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	6	2.18
(2,536)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	6	2.18
(3,508)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	7	2.17
(3,508)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	7	2.17
(3,508)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	7	2.17
(2,536)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	7	2.17
(2,536)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	7	2.17
(2,536)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	7	2.17
(1,657)	1:10:A:GLN:HG2	1:14:A:GLU:HG2	4	2.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,516)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG21	2	2.14
(3,516)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG22	2	2.14
(3,516)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG23	2	2.14
(2,545)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG21	2	2.14
(2,545)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG22	2	2.14
(2,545)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG23	2	2.14
(1,657)	1:10:A:GLN:HG2	1:14:A:GLU:HG2	1	2.14
(3,299)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	6	2.12
(3,299)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	6	2.12
(3,299)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	6	2.12
(3,299)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	6	2.12
(3,299)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	6	2.12
(3,299)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	6	2.12
(2,311)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	6	2.12
(2,311)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	6	2.12
(2,311)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	6	2.12
(2,311)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	6	2.12
(2,311)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	6	2.12
(2,311)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	6	2.12
(4,28)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HB2	3	2.11
(4,28)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HB2	3	2.11
(4,28)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HB2	3	2.11
(3,573)	1:15:A:GLY:HA2	1:19:A:SER:HB3	8	2.11
(2,609)	1:15:A:GLY:HA2	1:19:A:SER:HB3	8	2.11
(2,514)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HB2	3	2.11
(2,514)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HB2	3	2.11
(2,514)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HB2	3	2.11
(4,28)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HB2	6	2.1
(4,28)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HB2	6	2.1
(4,28)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HB2	6	2.1
(3,594)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HG3	8	2.1
(3,594)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HG3	8	2.1
(3,594)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HG3	8	2.1
(3,518)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG12	4	2.1
(3,518)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG12	4	2.1
(3,518)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG12	4	2.1
(2,633)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HG3	8	2.1
(2,633)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HG3	8	2.1
(2,633)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HG3	8	2.1
(2,548)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG12	4	2.1
(2,548)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG12	4	2.1
(2,548)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG12	4	2.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,514)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HB2	6	2.1
(2,514)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HB2	6	2.1
(2,514)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HB2	6	2.1
(4,28)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HB2	8	2.09
(4,28)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HB2	8	2.09
(4,28)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HB2	8	2.09
(2,514)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HB2	8	2.09
(2,514)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HB2	8	2.09
(2,514)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HB2	8	2.09
(4,28)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HB2	10	2.08
(4,28)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HB2	10	2.08
(4,28)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HB2	10	2.08
(2,514)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HB2	10	2.08
(2,514)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HB2	10	2.08
(2,514)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HB2	10	2.08
(4,28)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HB2	9	2.07
(4,28)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HB2	9	2.07
(4,28)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HB2	9	2.07
(2,514)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HB2	9	2.07
(2,514)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HB2	9	2.07
(2,514)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HB2	9	2.07
(3,594)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HG3	6	2.06
(3,594)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HG3	6	2.06
(3,594)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HG3	6	2.06
(3,516)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG21	5	2.06
(3,516)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG22	5	2.06
(3,516)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG23	5	2.06
(2,633)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HG3	6	2.06
(2,633)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HG3	6	2.06
(2,633)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HG3	6	2.06
(2,545)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG21	5	2.06
(2,545)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG22	5	2.06
(2,545)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG23	5	2.06
(3,573)	1:15:A:GLY:HA2	1:19:A:SER:HB3	1	2.05
(3,516)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG21	7	2.05
(3,516)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG22	7	2.05
(3,516)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG23	7	2.05
(3,516)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG21	8	2.05
(3,516)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG22	8	2.05
(3,516)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG23	8	2.05
(2,609)	1:15:A:GLY:HA2	1:19:A:SER:HB3	1	2.05
(2,545)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG21	7	2.05

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,545)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG22	7	2.05
(2,545)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG23	7	2.05
(2,545)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG21	8	2.05
(2,545)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG22	8	2.05
(2,545)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG23	8	2.05
(3,573)	1:15:A:GLY:HA2	1:19:A:SER:HB3	4	2.03
(2,609)	1:15:A:GLY:HA2	1:19:A:SER:HB3	4	2.03
(3,489)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	5	2.02
(3,489)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	5	2.02
(3,489)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	5	2.02
(2,517)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	5	2.02
(2,517)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	5	2.02
(2,517)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	5	2.02
(1,657)	1:10:A:GLN:HG2	1:14:A:GLU:HG2	3	1.99
(1,511)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HB2	7	1.99
(3,573)	1:15:A:GLY:HA2	1:19:A:SER:HB3	6	1.97
(3,573)	1:15:A:GLY:HA2	1:19:A:SER:HB3	10	1.97
(2,609)	1:15:A:GLY:HA2	1:19:A:SER:HB3	6	1.97
(2,609)	1:15:A:GLY:HA2	1:19:A:SER:HB3	10	1.97
(3,489)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	6	1.96
(3,489)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	6	1.96
(3,489)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	6	1.96
(2,517)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	6	1.96
(2,517)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	6	1.96
(2,517)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	6	1.96
(3,516)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG21	1	1.93
(3,516)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG22	1	1.93
(3,516)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG23	1	1.93
(2,545)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG21	1	1.93
(2,545)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG22	1	1.93
(2,545)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG23	1	1.93
(1,658)	1:10:A:GLN:HG3	1:14:A:GLU:HG2	7	1.92
(3,573)	1:15:A:GLY:HA2	1:19:A:SER:HB3	2	1.91
(2,609)	1:15:A:GLY:HA2	1:19:A:SER:HB3	2	1.91
(3,516)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG21	10	1.9
(3,516)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG22	10	1.9
(3,516)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG23	10	1.9
(2,545)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG21	10	1.9
(2,545)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG22	10	1.9
(2,545)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG23	10	1.9
(3,392)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG21	4	1.88
(3,392)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG22	4	1.88

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,392)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG23	4	1.88
(2,412)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG21	4	1.88
(2,412)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG22	4	1.88
(2,412)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG23	4	1.88
(3,573)	1:15:A:GLY:HA2	1:19:A:SER:HB3	3	1.87
(3,516)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG21	9	1.87
(3,516)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG22	9	1.87
(3,516)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG23	9	1.87
(2,609)	1:15:A:GLY:HA2	1:19:A:SER:HB3	3	1.87
(2,545)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG21	9	1.87
(2,545)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG22	9	1.87
(2,545)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG23	9	1.87
(3,573)	1:15:A:GLY:HA2	1:19:A:SER:HB3	9	1.86
(3,489)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	8	1.86
(3,489)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	8	1.86
(3,489)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	8	1.86
(2,609)	1:15:A:GLY:HA2	1:19:A:SER:HB3	9	1.86
(2,517)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	8	1.86
(2,517)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	8	1.86
(2,517)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	8	1.86
(4,43)	1:10:A:GLN:HG2	1:14:A:GLU:HG2	8	1.85
(3,594)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HG3	5	1.85
(3,594)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HG3	5	1.85
(3,594)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HG3	5	1.85
(2,657)	1:10:A:GLN:HG2	1:14:A:GLU:HG2	8	1.85
(2,633)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HG3	5	1.85
(2,633)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HG3	5	1.85
(2,633)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HG3	5	1.85
(3,489)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	2	1.84
(3,489)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	2	1.84
(3,489)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	2	1.84
(2,517)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	2	1.84
(2,517)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	2	1.84
(2,517)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	2	1.84
(3,573)	1:15:A:GLY:HA2	1:19:A:SER:HB3	7	1.82
(2,609)	1:15:A:GLY:HA2	1:19:A:SER:HB3	7	1.82
(1,536)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	9	1.82
(1,536)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	9	1.82
(1,536)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	9	1.82
(3,489)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	3	1.81
(3,489)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	3	1.81
(3,489)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	3	1.81

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,517)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	3	1.81
(2,517)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	3	1.81
(2,517)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	3	1.81
(3,516)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG21	3	1.8
(3,516)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG22	3	1.8
(3,516)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG23	3	1.8
(2,545)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG21	3	1.8
(2,545)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG22	3	1.8
(2,545)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG23	3	1.8
(3,392)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG21	5	1.79
(3,392)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG22	5	1.79
(3,392)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG23	5	1.79
(2,412)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG21	5	1.79
(2,412)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG22	5	1.79
(2,412)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG23	5	1.79
(3,392)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG21	7	1.77
(3,392)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG22	7	1.77
(3,392)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG23	7	1.77
(2,412)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG21	7	1.77
(2,412)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG22	7	1.77
(2,412)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG23	7	1.77
(3,489)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	7	1.76
(3,489)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	7	1.76
(3,489)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	7	1.76
(2,517)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	7	1.76
(2,517)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	7	1.76
(2,517)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	7	1.76
(3,392)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG21	8	1.75
(3,392)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG22	8	1.75
(3,392)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG23	8	1.75
(2,412)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG21	8	1.75
(2,412)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG22	8	1.75
(2,412)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG23	8	1.75
(3,392)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG21	1	1.74
(3,392)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG22	1	1.74
(3,392)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG23	1	1.74
(2,412)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG21	1	1.74
(2,412)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG22	1	1.74
(2,412)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG23	1	1.74
(1,545)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG21	4	1.74
(1,545)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG22	4	1.74
(1,545)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG23	4	1.74

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,536)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	10	1.74
(1,536)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	10	1.74
(1,536)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	10	1.74
(3,516)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG21	6	1.73
(3,516)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG22	6	1.73
(3,516)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG23	6	1.73
(3,507)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	3	1.73
(3,507)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	3	1.73
(3,507)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	3	1.73
(3,507)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG21	3	1.73
(3,507)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG22	3	1.73
(3,507)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG23	3	1.73
(2,545)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG21	6	1.73
(2,545)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG22	6	1.73
(2,545)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG23	6	1.73
(2,535)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	3	1.73
(2,535)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	3	1.73
(2,535)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	3	1.73
(2,535)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG21	3	1.73
(2,535)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG22	3	1.73
(2,535)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG23	3	1.73
(3,392)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG21	2	1.71
(3,392)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG22	2	1.71
(3,392)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG23	2	1.71
(2,412)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG21	2	1.71
(2,412)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG22	2	1.71
(2,412)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG23	2	1.71
(3,489)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	1	1.7
(3,489)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	1	1.7
(3,489)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	1	1.7
(3,489)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	9	1.7
(3,489)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	9	1.7
(3,489)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	9	1.7
(2,517)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	1	1.7
(2,517)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	1	1.7
(2,517)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	1	1.7
(2,517)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	9	1.7
(2,517)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	9	1.7
(2,517)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	9	1.7
(1,536)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	8	1.7
(1,536)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	8	1.7
(1,536)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	8	1.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,514)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HB2	7	1.7
(1,514)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HB2	7	1.7
(1,514)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HB2	7	1.7
(3,592)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HG3	9	1.69
(3,592)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HG3	9	1.69
(3,592)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HG3	9	1.69
(2,631)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HG3	9	1.69
(2,631)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HG3	9	1.69
(2,631)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HG3	9	1.69
(1,658)	1:10:A:GLN:HG3	1:14:A:GLU:HG2	10	1.69
(3,489)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	10	1.68
(3,489)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	10	1.68
(3,489)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	10	1.68
(3,392)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG21	9	1.68
(3,392)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG22	9	1.68
(3,392)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG23	9	1.68
(2,517)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	10	1.68
(2,517)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	10	1.68
(2,517)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	10	1.68
(2,412)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG21	9	1.68
(2,412)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG22	9	1.68
(2,412)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG23	9	1.68
(3,392)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG21	6	1.67
(3,392)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG22	6	1.67
(3,392)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG23	6	1.67
(2,412)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG21	6	1.67
(2,412)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG22	6	1.67
(2,412)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG23	6	1.67
(3,392)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG21	3	1.64
(3,392)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG22	3	1.64
(3,392)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG23	3	1.64
(3,392)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG21	10	1.64
(3,392)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG22	10	1.64
(3,392)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG23	10	1.64
(2,412)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG21	3	1.64
(2,412)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG22	3	1.64
(2,412)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG23	3	1.64
(2,412)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG21	10	1.64
(2,412)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG22	10	1.64
(2,412)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG23	10	1.64
(1,536)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	3	1.64
(1,536)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	3	1.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,536)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	3	1.64
(1,658)	1:10:A:GLN:HG3	1:14:A:GLU:HG2	5	1.6
(1,658)	1:10:A:GLN:HG3	1:14:A:GLU:HG2	6	1.6
(4,43)	1:10:A:GLN:HG2	1:14:A:GLU:HG2	7	1.59
(2,657)	1:10:A:GLN:HG2	1:14:A:GLU:HG2	7	1.59
(1,658)	1:10:A:GLN:HG3	1:14:A:GLU:HG2	9	1.58
(3,512)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HG3	2	1.57
(3,512)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HG3	2	1.57
(3,512)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HG3	2	1.57
(3,512)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HG3	4	1.57
(3,512)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HG3	4	1.57
(3,512)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HG3	4	1.57
(3,512)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HG3	7	1.57
(3,512)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HG3	7	1.57
(3,512)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HG3	7	1.57
(2,540)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HG3	2	1.57
(2,540)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HG3	2	1.57
(2,540)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HG3	2	1.57
(2,540)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HG3	4	1.57
(2,540)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HG3	4	1.57
(2,540)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HG3	4	1.57
(2,540)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HG3	7	1.57
(2,540)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HG3	7	1.57
(2,540)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HG3	7	1.57
(3,512)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HG3	5	1.56
(3,512)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HG3	5	1.56
(3,512)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HG3	5	1.56
(2,540)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HG3	5	1.56
(2,540)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HG3	5	1.56
(2,540)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HG3	5	1.56
(3,512)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HG3	1	1.55
(3,512)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HG3	1	1.55
(3,512)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HG3	1	1.55
(2,540)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HG3	1	1.55
(2,540)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HG3	1	1.55
(2,540)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HG3	1	1.55
(1,536)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	6	1.55
(1,536)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	6	1.55
(1,536)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	6	1.55
(3,512)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HG3	3	1.54
(3,512)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HG3	3	1.54
(3,512)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HG3	3	1.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,512)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HG3	6	1.54
(3,512)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HG3	6	1.54
(3,512)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HG3	6	1.54
(3,512)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HG3	8	1.54
(3,512)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HG3	8	1.54
(3,512)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HG3	8	1.54
(3,512)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HG3	10	1.54
(3,512)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HG3	10	1.54
(3,512)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HG3	10	1.54
(2,540)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HG3	3	1.54
(2,540)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HG3	3	1.54
(2,540)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HG3	3	1.54
(2,540)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HG3	6	1.54
(2,540)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HG3	6	1.54
(2,540)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HG3	6	1.54
(2,540)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HG3	8	1.54
(2,540)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HG3	8	1.54
(2,540)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HG3	8	1.54
(2,540)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HG3	10	1.54
(2,540)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HG3	10	1.54
(2,540)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HG3	10	1.54
(1,536)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	7	1.54
(1,536)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	7	1.54
(1,536)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	7	1.54
(3,512)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HG3	9	1.52
(3,512)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HG3	9	1.52
(3,512)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HG3	9	1.52
(2,540)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HG3	9	1.52
(2,540)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HG3	9	1.52
(2,540)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HG3	9	1.52
(3,594)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HG3	3	1.51
(3,594)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HG3	3	1.51
(3,594)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HG3	3	1.51
(3,518)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG12	5	1.51
(3,518)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG12	5	1.51
(3,518)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG12	5	1.51
(2,633)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HG3	3	1.51
(2,633)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HG3	3	1.51
(2,633)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HG3	3	1.51
(2,548)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG12	5	1.51
(2,548)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG12	5	1.51
(2,548)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG12	5	1.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,545)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG21	2	1.51
(1,545)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG22	2	1.51
(1,545)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG23	2	1.51
(1,514)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HB2	3	1.51
(1,514)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HB2	3	1.51
(1,514)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HB2	3	1.51
(1,609)	1:15:A:GLY:HA2	1:19:A:SER:HB3	8	1.49
(1,514)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HB2	6	1.49
(1,514)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HB2	6	1.49
(1,514)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HB2	6	1.49
(1,514)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HB2	8	1.49
(1,514)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HB2	8	1.49
(1,514)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HB2	8	1.49
(3,508)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	2	1.48
(3,508)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	2	1.48
(3,508)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	2	1.48
(2,536)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	2	1.48
(2,536)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	2	1.48
(2,536)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	2	1.48
(1,548)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG12	4	1.48
(1,548)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG12	4	1.48
(1,548)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG12	4	1.48
(1,514)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HB2	10	1.48
(1,514)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HB2	10	1.48
(1,514)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HB2	10	1.48
(1,514)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HB2	9	1.47
(1,514)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HB2	9	1.47
(1,514)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HB2	9	1.47
(1,478)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HH11	1	1.47
(1,478)	1:21:A:ARG:HD3	1:21:A:ARG:HH11	1	1.47
(4,24)	1:3:A:GLU:HB2	1:6:A:ARG:H	4	1.46
(2,449)	1:3:A:GLU:HB2	1:6:A:ARG:H	4	1.46
(3,508)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	1	1.43
(3,508)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	1	1.43
(3,508)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	1	1.43
(2,536)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	1	1.43
(2,536)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	1	1.43
(2,536)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	1	1.43
(1,545)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG21	5	1.43
(1,545)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG22	5	1.43
(1,545)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG23	5	1.43
(1,478)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HH11	10	1.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,478)	1:21:A:ARG:HD3	1:21:A:ARG:HH11	10	1.43
(1,609)	1:15:A:GLY:HA2	1:19:A:SER:HB3	1	1.42
(1,545)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG21	7	1.42
(1,545)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG22	7	1.42
(1,545)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG23	7	1.42
(1,545)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG21	8	1.42
(1,545)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG22	8	1.42
(1,545)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG23	8	1.42
(3,518)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG12	7	1.41
(3,518)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG12	7	1.41
(3,518)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG12	7	1.41
(2,548)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG12	7	1.41
(2,548)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG12	7	1.41
(2,548)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG12	7	1.41
(1,609)	1:15:A:GLY:HA2	1:19:A:SER:HB3	4	1.41
(1,42)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HE	4	1.4
(1,42)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HE	4	1.4
(4,24)	1:3:A:GLU:HB2	1:6:A:ARG:H	5	1.39
(4,23)	1:5:A:VAL:HB	1:6:A:ARG:H	4	1.39
(2,449)	1:3:A:GLU:HB2	1:6:A:ARG:H	5	1.39
(2,447)	1:5:A:VAL:HB	1:6:A:ARG:H	4	1.39
(1,478)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HH11	8	1.39
(1,478)	1:21:A:ARG:HD3	1:21:A:ARG:HH11	8	1.39
(3,518)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG12	8	1.38
(3,518)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG12	8	1.38
(3,518)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG12	8	1.38
(2,548)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG12	8	1.38
(2,548)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG12	8	1.38
(2,548)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG12	8	1.38
(1,608)	1:3:A:GLU:HA	1:6:A:ARG:HD2	10	1.38
(1,42)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HE	5	1.38
(1,42)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HE	5	1.38
(3,562)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD21	4	1.37
(3,562)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD22	4	1.37
(3,562)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD23	4	1.37
(2,598)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD21	4	1.37
(2,598)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD22	4	1.37
(2,598)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD23	4	1.37
(1,42)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HE	3	1.37
(1,42)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HE	3	1.37
(4,24)	1:3:A:GLU:HB2	1:6:A:ARG:H	3	1.36
(3,518)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG12	1	1.36

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,518)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG12	1	1.36
(3,518)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG12	1	1.36
(3,518)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG12	2	1.36
(3,518)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG12	2	1.36
(3,518)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG12	2	1.36
(2,548)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG12	1	1.36
(2,548)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG12	1	1.36
(2,548)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG12	1	1.36
(2,548)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG12	2	1.36
(2,548)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG12	2	1.36
(2,548)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG12	2	1.36
(2,449)	1:3:A:GLU:HB2	1:6:A:ARG:H	3	1.36
(1,478)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HH11	7	1.36
(1,478)	1:21:A:ARG:HD3	1:21:A:ARG:HH11	7	1.36
(3,511)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HB2	1	1.35
(3,511)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HB2	1	1.35
(3,511)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HB2	1	1.35
(3,508)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	4	1.35
(3,508)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	4	1.35
(3,508)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	4	1.35
(2,539)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HB2	1	1.35
(2,539)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HB2	1	1.35
(2,539)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HB2	1	1.35
(2,536)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	4	1.35
(2,536)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	4	1.35
(2,536)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	4	1.35
(1,609)	1:15:A:GLY:HA2	1:19:A:SER:HB3	6	1.35
(1,609)	1:15:A:GLY:HA2	1:19:A:SER:HB3	10	1.34
(1,478)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HH11	2	1.34
(1,478)	1:21:A:ARG:HD3	1:21:A:ARG:HH11	2	1.34
(4,43)	1:10:A:GLN:HG2	1:14:A:GLU:HG2	9	1.33
(4,43)	1:10:A:GLN:HG2	1:14:A:GLU:HG2	10	1.33
(4,24)	1:3:A:GLU:HB2	1:6:A:ARG:H	8	1.33
(3,529)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	6	1.33
(3,529)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	9	1.33
(3,511)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HB2	2	1.33
(3,511)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HB2	2	1.33
(3,511)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HB2	2	1.33
(3,511)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HB2	5	1.33
(3,511)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HB2	5	1.33
(3,511)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HB2	5	1.33
(2,657)	1:10:A:GLN:HG2	1:14:A:GLU:HG2	9	1.33

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,657)	1:10:A:GLN:HG2	1:14:A:GLU:HG2	10	1.33
(2,560)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	6	1.33
(2,560)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	9	1.33
(2,539)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HB2	2	1.33
(2,539)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HB2	2	1.33
(2,539)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HB2	2	1.33
(2,539)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HB2	5	1.33
(2,539)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HB2	5	1.33
(2,539)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HB2	5	1.33
(2,449)	1:3:A:GLU:HB2	1:6:A:ARG:H	8	1.33
(4,24)	1:3:A:GLU:HB2	1:6:A:ARG:H	2	1.32
(3,592)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HG3	6	1.32
(3,592)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HG3	6	1.32
(3,592)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HG3	6	1.32
(3,562)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD21	2	1.32
(3,562)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD22	2	1.32
(3,562)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD23	2	1.32
(3,529)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	1	1.32
(3,529)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	5	1.32
(3,529)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	7	1.32
(2,631)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HG3	6	1.32
(2,631)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HG3	6	1.32
(2,631)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HG3	6	1.32
(2,598)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD21	2	1.32
(2,598)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD22	2	1.32
(2,598)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD23	2	1.32
(2,560)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	1	1.32
(2,560)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	5	1.32
(2,560)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	7	1.32
(2,449)	1:3:A:GLU:HB2	1:6:A:ARG:H	2	1.32
(1,655)	1:3:A:GLU:HA	1:6:A:ARG:HD3	2	1.32
(1,42)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HE	9	1.32
(1,42)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HE	9	1.32
(4,24)	1:3:A:GLU:HB2	1:6:A:ARG:H	7	1.31
(4,24)	1:3:A:GLU:HB2	1:6:A:ARG:H	10	1.31
(3,592)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HG3	8	1.31
(3,592)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HG3	8	1.31
(3,592)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HG3	8	1.31
(3,529)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	2	1.31
(3,529)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	3	1.31
(3,529)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	4	1.31
(3,529)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	8	1.31

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,529)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	10	1.31
(2,631)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HG3	8	1.31
(2,631)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HG3	8	1.31
(2,631)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HG3	8	1.31
(2,560)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	2	1.31
(2,560)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	3	1.31
(2,560)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	4	1.31
(2,560)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	8	1.31
(2,560)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	10	1.31
(2,449)	1:3:A:GLU:HB2	1:6:A:ARG:H	7	1.31
(2,449)	1:3:A:GLU:HB2	1:6:A:ARG:H	10	1.31
(3,511)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HB2	4	1.3
(3,511)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HB2	4	1.3
(3,511)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HB2	4	1.3
(2,539)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HB2	4	1.3
(2,539)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HB2	4	1.3
(2,539)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HB2	4	1.3
(1,618)	1:8:A:TYR:HB2	1:24:A:PRO:HG2	7	1.3
(1,545)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG21	1	1.3
(1,545)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG22	1	1.3
(1,545)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG23	1	1.3
(1,478)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HH11	3	1.3
(1,478)	1:21:A:ARG:HD3	1:21:A:ARG:HH11	3	1.3
(1,478)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HH11	4	1.3
(1,478)	1:21:A:ARG:HD3	1:21:A:ARG:HH11	4	1.3
(4,24)	1:3:A:GLU:HB2	1:6:A:ARG:H	6	1.29
(3,592)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HG3	10	1.29
(3,592)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HG3	10	1.29
(3,592)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HG3	10	1.29
(3,562)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD21	5	1.29
(3,562)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD22	5	1.29
(3,562)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD23	5	1.29
(2,631)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HG3	10	1.29
(2,631)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HG3	10	1.29
(2,631)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HG3	10	1.29
(2,598)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD21	5	1.29
(2,598)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD22	5	1.29
(2,598)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD23	5	1.29
(2,449)	1:3:A:GLU:HB2	1:6:A:ARG:H	6	1.29
(1,609)	1:15:A:GLY:HA2	1:19:A:SER:HB3	2	1.29
(1,464)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:H	4	1.29
(4,43)	1:10:A:GLN:HG2	1:14:A:GLU:HG2	6	1.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,24)	1:3:A:GLU:HB2	1:6:A:ARG:H	1	1.28
(4,24)	1:3:A:GLU:HB2	1:6:A:ARG:H	9	1.28
(3,592)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HG3	3	1.28
(3,592)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HG3	3	1.28
(3,592)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HG3	3	1.28
(3,507)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	5	1.28
(3,507)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	5	1.28
(3,507)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	5	1.28
(3,507)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG21	5	1.28
(3,507)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG22	5	1.28
(3,507)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG23	5	1.28
(2,657)	1:10:A:GLN:HG2	1:14:A:GLU:HG2	6	1.28
(2,631)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HG3	3	1.28
(2,631)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HG3	3	1.28
(2,631)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HG3	3	1.28
(2,535)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	5	1.28
(2,535)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	5	1.28
(2,535)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	5	1.28
(2,535)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG21	5	1.28
(2,535)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG22	5	1.28
(2,535)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG23	5	1.28
(2,449)	1:3:A:GLU:HB2	1:6:A:ARG:H	1	1.28
(2,449)	1:3:A:GLU:HB2	1:6:A:ARG:H	9	1.28
(1,478)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HH11	5	1.28
(1,478)	1:21:A:ARG:HD3	1:21:A:ARG:HH11	5	1.28
(1,478)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HH11	6	1.28
(1,478)	1:21:A:ARG:HD3	1:21:A:ARG:HH11	6	1.28
(3,507)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	10	1.27
(3,507)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	10	1.27
(3,507)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	10	1.27
(3,507)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG21	10	1.27
(3,507)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG22	10	1.27
(3,507)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG23	10	1.27
(2,535)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	10	1.27
(2,535)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	10	1.27
(2,535)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	10	1.27
(2,535)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG21	10	1.27
(2,535)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG22	10	1.27
(2,535)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG23	10	1.27
(1,545)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG21	10	1.27
(1,545)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG22	10	1.27
(1,545)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG23	10	1.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,478)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HH11	9	1.27
(1,478)	1:21:A:ARG:HD3	1:21:A:ARG:HH11	9	1.27
(1,437)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:H	7	1.27
(1,437)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:H	7	1.27
(1,437)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:H	7	1.27
(1,657)	1:10:A:GLN:HG2	1:14:A:GLU:HG2	8	1.26
(3,515)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG13	4	1.25
(3,515)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG13	4	1.25
(3,515)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG13	4	1.25
(3,484)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HB2	6	1.25
(2,544)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG13	4	1.25
(2,544)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG13	4	1.25
(2,544)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG13	4	1.25
(2,511)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HB2	6	1.25
(1,580)	1:17:A:PRO:HB2	1:18:A:SER:H	3	1.25
(1,42)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HE	2	1.25
(1,42)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HE	2	1.25
(3,562)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD21	1	1.24
(3,562)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD22	1	1.24
(3,562)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD23	1	1.24
(3,518)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG12	10	1.24
(3,518)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG12	10	1.24
(3,518)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG12	10	1.24
(2,598)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD21	1	1.24
(2,598)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD22	1	1.24
(2,598)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD23	1	1.24
(2,548)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG12	10	1.24
(2,548)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG12	10	1.24
(2,548)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG12	10	1.24
(1,609)	1:15:A:GLY:HA2	1:19:A:SER:HB3	3	1.24
(1,580)	1:17:A:PRO:HB2	1:18:A:SER:H	4	1.24
(1,545)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG21	9	1.24
(1,545)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG22	9	1.24
(1,545)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG23	9	1.24
(1,437)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:H	3	1.24
(1,437)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:H	3	1.24
(1,437)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:H	3	1.24
(1,437)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:H	8	1.24
(1,437)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:H	8	1.24
(1,437)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:H	8	1.24
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	7	1.23
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	7	1.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	7	1.23
(3,518)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG12	9	1.23
(3,518)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG12	9	1.23
(3,518)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG12	9	1.23
(2,548)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG12	9	1.23
(2,548)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG12	9	1.23
(2,548)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG12	9	1.23
(2,120)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	7	1.23
(2,120)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	7	1.23
(2,120)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	7	1.23
(1,609)	1:15:A:GLY:HA2	1:19:A:SER:HB3	9	1.23
(1,464)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:H	5	1.22
(3,594)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HG3	2	1.21
(3,594)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HG3	2	1.21
(3,594)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HG3	2	1.21
(3,484)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HB2	3	1.21
(3,391)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:H	4	1.21
(3,391)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:H	4	1.21
(3,391)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:H	4	1.21
(2,633)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HG3	2	1.21
(2,633)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HG3	2	1.21
(2,633)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HG3	2	1.21
(2,511)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HB2	3	1.21
(2,411)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:H	4	1.21
(2,411)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:H	4	1.21
(2,411)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:H	4	1.21
(1,618)	1:8:A:TYR:HB2	1:24:A:PRO:HG2	3	1.21
(1,618)	1:8:A:TYR:HB2	1:24:A:PRO:HG2	8	1.21
(1,468)	1:24:A:PRO:HG2	1:25:A:SER:H	9	1.21
(1,437)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:H	10	1.21
(1,437)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:H	10	1.21
(1,437)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:H	10	1.21
(4,43)	1:10:A:GLN:HG2	1:14:A:GLU:HG2	5	1.2
(3,590)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	5	1.2
(3,590)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	5	1.2
(3,590)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	5	1.2
(2,657)	1:10:A:GLN:HG2	1:14:A:GLU:HG2	5	1.2
(2,628)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	5	1.2
(2,628)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	5	1.2
(2,628)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	5	1.2
(3,594)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HG3	7	1.19
(3,594)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HG3	7	1.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,594)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HG3	7	1.19
(2,633)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HG3	7	1.19
(2,633)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HG3	7	1.19
(2,633)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HG3	7	1.19
(1,609)	1:15:A:GLY:HA2	1:19:A:SER:HB3	7	1.19
(1,580)	1:17:A:PRO:HB2	1:18:A:SER:H	10	1.19
(1,437)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:H	9	1.19
(1,437)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:H	9	1.19
(1,437)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:H	9	1.19
(3,590)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	2	1.18
(3,590)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	2	1.18
(3,590)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	2	1.18
(3,518)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG12	3	1.18
(3,518)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG12	3	1.18
(3,518)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG12	3	1.18
(2,628)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	2	1.18
(2,628)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	2	1.18
(2,628)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	2	1.18
(2,548)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG12	3	1.18
(2,548)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG12	3	1.18
(2,548)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG12	3	1.18
(1,618)	1:8:A:TYR:HB2	1:24:A:PRO:HG2	10	1.18
(1,580)	1:17:A:PRO:HB2	1:18:A:SER:H	2	1.18
(1,320)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HD2	8	1.18
(1,320)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HD3	8	1.18
(3,507)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	7	1.17
(3,507)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	7	1.17
(3,507)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	7	1.17
(3,507)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG21	7	1.17
(3,507)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG22	7	1.17
(3,507)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG23	7	1.17
(3,484)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HB2	10	1.17
(2,535)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	7	1.17
(2,535)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	7	1.17
(2,535)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	7	1.17
(2,535)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG21	7	1.17
(2,535)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG22	7	1.17
(2,535)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG23	7	1.17
(2,511)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HB2	10	1.17
(1,545)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG21	3	1.17
(1,545)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG22	3	1.17
(1,545)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG23	3	1.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,41)	1:21:A:ARG:HE	1:21:A:ARG:HG2	6	1.17
(3,506)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	4	1.16
(3,506)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	4	1.16
(3,506)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	4	1.16
(3,484)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HB2	8	1.16
(3,298)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	4	1.16
(3,298)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	4	1.16
(3,298)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	4	1.16
(3,298)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	4	1.16
(3,298)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	4	1.16
(3,298)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	4	1.16
(3,298)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	5	1.16
(3,298)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	5	1.16
(3,298)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	5	1.16
(3,298)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	5	1.16
(3,298)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	5	1.16
(3,298)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	5	1.16
(2,534)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	4	1.16
(2,534)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	4	1.16
(2,534)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	4	1.16
(2,511)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HB2	8	1.16
(2,310)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	4	1.16
(2,310)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	4	1.16
(2,310)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	4	1.16
(2,310)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	4	1.16
(2,310)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	4	1.16
(2,310)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	4	1.16
(2,310)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	5	1.16
(2,310)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	5	1.16
(2,310)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	5	1.16
(2,310)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	5	1.16
(2,310)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	5	1.16
(2,310)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	5	1.16
(1,618)	1:8:A:TYR:HB2	1:24:A:PRO:HG2	6	1.16
(1,437)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:H	6	1.16
(1,437)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:H	6	1.16
(1,437)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:H	6	1.16
(3,590)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	1	1.15
(3,590)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	1	1.15
(3,590)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	1	1.15
(2,628)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	1	1.15
(2,628)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	1	1.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,628)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	1	1.15
(1,642)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HB3	3	1.15
(1,320)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HD2	10	1.15
(1,320)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HD3	10	1.15
(1,42)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HE	8	1.15
(1,42)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HE	8	1.15
(3,518)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG12	6	1.14
(3,518)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG12	6	1.14
(3,518)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG12	6	1.14
(3,330)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	5	1.14
(3,248)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	7	1.14
(3,248)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	7	1.14
(3,248)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	7	1.14
(3,248)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	8	1.14
(3,248)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	8	1.14
(3,248)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	8	1.14
(2,548)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG12	6	1.14
(2,548)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG12	6	1.14
(2,548)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG12	6	1.14
(2,346)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	5	1.14
(2,259)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	7	1.14
(2,259)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	7	1.14
(2,259)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	7	1.14
(2,259)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	8	1.14
(2,259)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	8	1.14
(2,259)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	8	1.14
(1,464)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:H	7	1.14
(1,618)	1:8:A:TYR:HB2	1:24:A:PRO:HG2	5	1.13
(3,330)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	1	1.12
(3,330)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	4	1.12
(3,298)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	3	1.12
(3,298)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	3	1.12
(3,298)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	3	1.12
(3,298)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	3	1.12
(3,298)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	3	1.12
(3,298)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	3	1.12
(3,248)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	3	1.12
(3,248)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	3	1.12
(3,248)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	3	1.12
(3,248)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	9	1.12
(3,248)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	9	1.12
(3,248)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	9	1.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,346)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	1	1.12
(2,346)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	4	1.12
(2,310)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	3	1.12
(2,310)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	3	1.12
(2,310)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	3	1.12
(2,310)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	3	1.12
(2,310)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	3	1.12
(2,310)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	3	1.12
(2,259)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	3	1.12
(2,259)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	3	1.12
(2,259)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	3	1.12
(2,259)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	9	1.12
(2,259)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	9	1.12
(2,259)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	9	1.12
(1,642)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HB3	10	1.12
(1,618)	1:8:A:TYR:HB2	1:24:A:PRO:HG2	2	1.12
(1,320)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HD2	2	1.12
(1,320)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HD3	2	1.12
(1,41)	1:21:A:ARG:HE	1:21:A:ARG:HG2	1	1.12
(3,590)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	4	1.11
(3,590)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	4	1.11
(3,590)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	4	1.11
(3,330)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	2	1.11
(3,248)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	6	1.11
(3,248)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	6	1.11
(3,248)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	6	1.11
(2,628)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	4	1.11
(2,628)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	4	1.11
(2,628)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	4	1.11
(2,346)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	2	1.11
(2,259)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	6	1.11
(2,259)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	6	1.11
(2,259)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	6	1.11
(1,618)	1:8:A:TYR:HB2	1:24:A:PRO:HG2	1	1.11
(1,600)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HG3	9	1.11
(1,525)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HD2	3	1.11
(3,330)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	6	1.1
(3,248)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	10	1.1
(3,248)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	10	1.1
(3,248)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	10	1.1
(2,346)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	6	1.1
(2,259)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	10	1.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,259)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	10	1.1
(2,259)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	10	1.1
(1,618)	1:8:A:TYR:HB2	1:24:A:PRO:HG2	4	1.1
(1,545)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG21	6	1.1
(1,545)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG22	6	1.1
(1,545)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG23	6	1.1
(1,525)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HD2	4	1.1
(1,525)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HD2	6	1.1
(1,525)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HD2	10	1.1
(1,40)	1:21:A:ARG:HE	1:21:A:ARG:HG3	5	1.1
(4,30)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG11	6	1.09
(4,30)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG12	6	1.09
(4,30)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG13	6	1.09
(4,30)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG11	6	1.09
(4,30)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG12	6	1.09
(4,30)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG13	6	1.09
(4,30)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG11	6	1.09
(4,30)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG12	6	1.09
(4,30)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG13	6	1.09
(4,30)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	6	1.09
(4,30)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	6	1.09
(4,30)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	6	1.09
(4,30)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	6	1.09
(4,30)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	6	1.09
(4,30)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	6	1.09
(4,30)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	6	1.09
(4,30)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	6	1.09
(4,30)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	6	1.09
(4,27)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:HA	4	1.09
(3,506)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	8	1.09
(3,506)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	8	1.09
(3,506)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	8	1.09
(3,499)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	3	1.09
(3,499)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	3	1.09
(3,499)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	3	1.09
(3,330)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	7	1.09
(3,330)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	9	1.09
(2,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG11	6	1.09
(2,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG12	6	1.09
(2,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG13	6	1.09
(2,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG11	6	1.09
(2,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG12	6	1.09

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG13	6	1.09
(2,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG11	6	1.09
(2,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG12	6	1.09
(2,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG13	6	1.09
(2,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	6	1.09
(2,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	6	1.09
(2,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	6	1.09
(2,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	6	1.09
(2,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	6	1.09
(2,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	6	1.09
(2,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	6	1.09
(2,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	6	1.09
(2,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	6	1.09
(2,534)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	8	1.09
(2,534)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	8	1.09
(2,534)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	8	1.09
(2,527)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	3	1.09
(2,527)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	3	1.09
(2,527)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	3	1.09
(2,486)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:HA	4	1.09
(2,346)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	7	1.09
(2,346)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	9	1.09
(1,642)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HB3	9	1.09
(1,525)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HD2	5	1.09
(1,525)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HD2	8	1.09
(3,558)	1:11:A:TRP:HE3	1:16:A:GLY:HA3	5	1.08
(3,499)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	10	1.08
(3,499)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	10	1.08
(3,499)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	10	1.08
(3,298)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	9	1.08
(3,298)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	9	1.08
(3,298)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	9	1.08
(3,298)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	9	1.08
(3,298)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	9	1.08
(3,298)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	9	1.08
(3,248)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	1	1.08
(3,248)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	1	1.08
(3,248)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	1	1.08
(3,248)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	4	1.08
(3,248)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	4	1.08
(3,248)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	4	1.08
(2,592)	1:11:A:TRP:HE3	1:16:A:GLY:HA3	5	1.08

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,527)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	10	1.08
(2,527)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	10	1.08
(2,527)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	10	1.08
(2,310)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	9	1.08
(2,310)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	9	1.08
(2,310)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	9	1.08
(2,310)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	9	1.08
(2,310)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	9	1.08
(2,310)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	9	1.08
(2,259)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	1	1.08
(2,259)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	1	1.08
(2,259)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	1	1.08
(2,259)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	4	1.08
(2,259)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	4	1.08
(2,259)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	4	1.08
(1,642)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HB3	8	1.08
(1,608)	1:3:A:GLU:HA	1:6:A:ARG:HD2	1	1.08
(1,525)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HD2	2	1.08
(1,387)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HZ3	3	1.08
(1,387)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HZ3	3	1.08
(1,42)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HE	10	1.08
(1,42)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HE	10	1.08
(4,30)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG11	3	1.07
(4,30)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG12	3	1.07
(4,30)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG13	3	1.07
(4,30)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG11	3	1.07
(4,30)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG12	3	1.07
(4,30)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG13	3	1.07
(4,30)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG11	3	1.07
(4,30)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG12	3	1.07
(4,30)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG13	3	1.07
(4,30)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	3	1.07
(4,30)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	3	1.07
(4,30)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	3	1.07
(4,30)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	3	1.07
(4,30)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	3	1.07
(4,30)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	3	1.07
(4,30)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	3	1.07
(4,30)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	3	1.07
(4,30)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	3	1.07
(3,330)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	3	1.07
(3,330)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	8	1.07

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,330)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	10	1.07
(3,248)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	2	1.07
(3,248)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	2	1.07
(3,248)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	2	1.07
(3,248)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	5	1.07
(3,248)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	5	1.07
(3,248)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	5	1.07
(2,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG11	3	1.07
(2,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG12	3	1.07
(2,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG13	3	1.07
(2,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG11	3	1.07
(2,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG12	3	1.07
(2,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG13	3	1.07
(2,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG11	3	1.07
(2,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG12	3	1.07
(2,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG13	3	1.07
(2,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	3	1.07
(2,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	3	1.07
(2,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	3	1.07
(2,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	3	1.07
(2,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	3	1.07
(2,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	3	1.07
(2,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	3	1.07
(2,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	3	1.07
(2,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	3	1.07
(2,346)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	3	1.07
(2,346)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	8	1.07
(2,346)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	10	1.07
(2,259)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	2	1.07
(2,259)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	2	1.07
(2,259)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	2	1.07
(2,259)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	5	1.07
(2,259)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	5	1.07
(2,259)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	5	1.07
(1,525)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HD2	9	1.07
(1,464)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:H	2	1.07
(1,387)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HZ3	5	1.07
(1,387)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HZ3	5	1.07
(4,30)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG11	10	1.06
(4,30)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG12	10	1.06
(4,30)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG13	10	1.06
(4,30)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG11	10	1.06

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,30)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG12	10	1.06
(4,30)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG13	10	1.06
(4,30)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG11	10	1.06
(4,30)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG12	10	1.06
(4,30)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG13	10	1.06
(4,30)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	10	1.06
(4,30)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	10	1.06
(4,30)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	10	1.06
(4,30)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	10	1.06
(4,30)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	10	1.06
(4,30)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	10	1.06
(4,30)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	10	1.06
(4,30)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	10	1.06
(4,30)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	10	1.06
(4,27)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:HA	2	1.06
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	6	1.06
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	6	1.06
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	6	1.06
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	10	1.06
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	10	1.06
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	10	1.06
(3,558)	1:11:A:TRP:HE3	1:16:A:GLY:HA3	3	1.06
(3,298)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	8	1.06
(3,298)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	8	1.06
(3,298)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	8	1.06
(3,298)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	8	1.06
(3,298)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	8	1.06
(3,298)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	8	1.06
(2,592)	1:11:A:TRP:HE3	1:16:A:GLY:HA3	3	1.06
(2,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG11	10	1.06
(2,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG12	10	1.06
(2,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG13	10	1.06
(2,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG11	10	1.06
(2,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG12	10	1.06
(2,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG13	10	1.06
(2,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG11	10	1.06
(2,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG12	10	1.06
(2,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG13	10	1.06
(2,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	10	1.06
(2,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	10	1.06
(2,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	10	1.06
(2,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	10	1.06

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	10	1.06
(2,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	10	1.06
(2,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	10	1.06
(2,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	10	1.06
(2,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	10	1.06
(2,486)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:HA	2	1.06
(2,310)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	8	1.06
(2,310)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	8	1.06
(2,310)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	8	1.06
(2,310)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	8	1.06
(2,310)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	8	1.06
(2,310)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	8	1.06
(2,120)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	6	1.06
(2,120)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	6	1.06
(2,120)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	6	1.06
(2,120)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	10	1.06
(2,120)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	10	1.06
(2,120)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	10	1.06
(1,631)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HG3	9	1.06
(1,631)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HG3	9	1.06
(1,631)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HG3	9	1.06
(1,42)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HE	7	1.06
(1,42)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HE	7	1.06
(1,40)	1:21:A:ARG:HE	1:21:A:ARG:HG3	9	1.06
(3,499)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	8	1.05
(3,499)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	8	1.05
(3,499)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	8	1.05
(3,298)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	2	1.05
(3,298)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	2	1.05
(3,298)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	2	1.05
(3,298)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	2	1.05
(3,298)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	2	1.05
(3,298)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	2	1.05
(3,298)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	10	1.05
(3,298)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	10	1.05
(3,298)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	10	1.05
(3,298)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	10	1.05
(3,298)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	10	1.05
(3,298)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	10	1.05
(2,527)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	8	1.05
(2,527)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	8	1.05
(2,527)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	8	1.05

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,310)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	2	1.05
(2,310)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	2	1.05
(2,310)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	2	1.05
(2,310)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	2	1.05
(2,310)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	2	1.05
(2,310)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	2	1.05
(2,310)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	10	1.05
(2,310)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	10	1.05
(2,310)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	10	1.05
(2,310)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	10	1.05
(2,310)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	10	1.05
(2,310)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	10	1.05
(1,600)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HG3	6	1.05
(1,359)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HG3	9	1.05
(1,320)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HD2	3	1.05
(1,320)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HD3	3	1.05
(1,40)	1:21:A:ARG:HE	1:21:A:ARG:HG3	4	1.05
(4,30)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG11	7	1.04
(4,30)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG12	7	1.04
(4,30)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG13	7	1.04
(4,30)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG11	7	1.04
(4,30)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG12	7	1.04
(4,30)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG13	7	1.04
(4,30)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG11	7	1.04
(4,30)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG12	7	1.04
(4,30)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG13	7	1.04
(4,30)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	7	1.04
(4,30)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	7	1.04
(4,30)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	7	1.04
(4,30)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	7	1.04
(4,30)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	7	1.04
(4,30)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	7	1.04
(4,30)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	7	1.04
(4,30)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	7	1.04
(4,30)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	7	1.04
(4,27)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:HA	8	1.04
(3,596)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD11	4	1.04
(3,596)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD12	4	1.04
(3,596)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD13	4	1.04
(3,596)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD11	4	1.04
(3,596)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD12	4	1.04
(3,596)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD13	4	1.04

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,596)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD11	4	1.04
(3,596)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD12	4	1.04
(3,596)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD13	4	1.04
(3,298)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	1	1.04
(3,298)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	1	1.04
(3,298)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	1	1.04
(3,298)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	1	1.04
(3,298)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	1	1.04
(3,298)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	1	1.04
(2,635)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD11	4	1.04
(2,635)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD12	4	1.04
(2,635)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD13	4	1.04
(2,635)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD11	4	1.04
(2,635)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD12	4	1.04
(2,635)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD13	4	1.04
(2,635)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD11	4	1.04
(2,635)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD12	4	1.04
(2,635)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD13	4	1.04
(2,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG11	7	1.04
(2,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG12	7	1.04
(2,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG13	7	1.04
(2,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG11	7	1.04
(2,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG12	7	1.04
(2,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG13	7	1.04
(2,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG11	7	1.04
(2,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG12	7	1.04
(2,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG13	7	1.04
(2,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	7	1.04
(2,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	7	1.04
(2,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	7	1.04
(2,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	7	1.04
(2,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	7	1.04
(2,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	7	1.04
(2,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	7	1.04
(2,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	7	1.04
(2,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	7	1.04
(2,486)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:HA	8	1.04
(2,310)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	1	1.04
(2,310)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	1	1.04
(2,310)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	1	1.04
(2,310)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	1	1.04
(2,310)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	1	1.04

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,310)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	1	1.04
(1,600)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HG3	8	1.04
(1,600)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HG3	10	1.04
(4,30)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG11	8	1.03
(4,30)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG12	8	1.03
(4,30)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG13	8	1.03
(4,30)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG11	8	1.03
(4,30)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG12	8	1.03
(4,30)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG13	8	1.03
(4,30)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG11	8	1.03
(4,30)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG12	8	1.03
(4,30)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG13	8	1.03
(4,30)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	8	1.03
(4,30)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	8	1.03
(4,30)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	8	1.03
(4,30)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	8	1.03
(4,30)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	8	1.03
(4,30)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	8	1.03
(4,30)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	8	1.03
(4,30)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	8	1.03
(4,30)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	8	1.03
(4,30)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG11	9	1.03
(4,30)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG12	9	1.03
(4,30)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG13	9	1.03
(4,30)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG11	9	1.03
(4,30)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG12	9	1.03
(4,30)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG13	9	1.03
(4,30)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG11	9	1.03
(4,30)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG12	9	1.03
(4,30)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG13	9	1.03
(4,30)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	9	1.03
(4,30)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	9	1.03
(4,30)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	9	1.03
(4,30)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	9	1.03
(4,30)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	9	1.03
(4,30)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	9	1.03
(4,30)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	9	1.03
(4,30)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	9	1.03
(4,30)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	9	1.03
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	9	1.03
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	9	1.03
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	9	1.03

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,558)	1:11:A:TRP:HE3	1:16:A:GLY:HA3	4	1.03
(3,558)	1:11:A:TRP:HE3	1:16:A:GLY:HA3	6	1.03
(2,592)	1:11:A:TRP:HE3	1:16:A:GLY:HA3	4	1.03
(2,592)	1:11:A:TRP:HE3	1:16:A:GLY:HA3	6	1.03
(2,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG11	8	1.03
(2,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG12	8	1.03
(2,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG13	8	1.03
(2,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG11	8	1.03
(2,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG12	8	1.03
(2,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG13	8	1.03
(2,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG11	8	1.03
(2,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG12	8	1.03
(2,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG13	8	1.03
(2,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	8	1.03
(2,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	8	1.03
(2,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	8	1.03
(2,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	8	1.03
(2,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	8	1.03
(2,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	8	1.03
(2,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	8	1.03
(2,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	8	1.03
(2,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	8	1.03
(2,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG11	9	1.03
(2,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG12	9	1.03
(2,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG13	9	1.03
(2,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG11	9	1.03
(2,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG12	9	1.03
(2,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG13	9	1.03
(2,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG11	9	1.03
(2,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG12	9	1.03
(2,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG13	9	1.03
(2,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	9	1.03
(2,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	9	1.03
(2,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	9	1.03
(2,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	9	1.03
(2,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	9	1.03
(2,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	9	1.03
(2,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	9	1.03
(2,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	9	1.03
(2,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	9	1.03
(2,120)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	9	1.03
(2,120)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	9	1.03

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,120)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	9	1.03
(1,600)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HG3	3	1.03
(1,525)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HD2	7	1.03
(1,404)	1:8:A:TYR:HB3	1:9:A:ILE:H	9	1.03
(1,40)	1:21:A:ARG:HE	1:21:A:ARG:HG3	7	1.03
(4,23)	1:5:A:VAL:HB	1:6:A:ARG:H	5	1.02
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	3	1.02
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	3	1.02
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	3	1.02
(3,594)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HG3	10	1.02
(3,594)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HG3	10	1.02
(3,594)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HG3	10	1.02
(3,558)	1:11:A:TRP:HE3	1:16:A:GLY:HA3	10	1.02
(2,633)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HG3	10	1.02
(2,633)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HG3	10	1.02
(2,633)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HG3	10	1.02
(2,592)	1:11:A:TRP:HE3	1:16:A:GLY:HA3	10	1.02
(2,447)	1:5:A:VAL:HB	1:6:A:ARG:H	5	1.02
(2,120)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	3	1.02
(2,120)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	3	1.02
(2,120)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	3	1.02
(1,540)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HG3	2	1.02
(1,540)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HG3	2	1.02
(1,540)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HG3	2	1.02
(1,540)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HG3	4	1.02
(1,540)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HG3	4	1.02
(1,540)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HG3	4	1.02
(1,540)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HG3	7	1.02
(1,540)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HG3	7	1.02
(1,540)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HG3	7	1.02
(1,525)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HD2	1	1.02
(1,320)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HD2	5	1.02
(1,320)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HD3	5	1.02
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	8	1.01
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	8	1.01
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	8	1.01
(3,499)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	6	1.01
(3,499)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	6	1.01
(3,499)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	6	1.01
(2,527)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	6	1.01
(2,527)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	6	1.01
(2,527)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	6	1.01

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,120)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	8	1.01
(2,120)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	8	1.01
(2,120)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	8	1.01
(1,580)	1:17:A:PRO:HB2	1:18:A:SER:H	9	1.01
(1,540)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HG3	5	1.01
(1,540)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HG3	5	1.01
(1,540)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HG3	5	1.01
(1,485)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	7	1.01
(1,485)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB3	7	1.01
(4,23)	1:5:A:VAL:HB	1:6:A:ARG:H	2	1.0
(3,558)	1:11:A:TRP:HE3	1:16:A:GLY:HA3	2	1.0
(3,506)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	1	1.0
(3,506)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	1	1.0
(3,506)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	1	1.0
(2,592)	1:11:A:TRP:HE3	1:16:A:GLY:HA3	2	1.0
(2,534)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	1	1.0
(2,534)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	1	1.0
(2,534)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	1	1.0
(2,447)	1:5:A:VAL:HB	1:6:A:ARG:H	2	1.0
(1,657)	1:10:A:GLN:HG2	1:14:A:GLU:HG2	7	1.0
(1,580)	1:17:A:PRO:HB2	1:18:A:SER:H	6	1.0
(1,540)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HG3	1	1.0
(1,540)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HG3	1	1.0
(1,540)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HG3	1	1.0
(1,540)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HG3	8	1.0
(1,540)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HG3	8	1.0
(1,540)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HG3	8	1.0
(1,538)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HB2	9	1.0
(1,538)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HB2	9	1.0
(1,538)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HB2	9	1.0
(1,529)	1:12:A:LEU:HA	1:16:A:GLY:HA3	7	1.0
(1,97)	1:23:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HD2	7	1.0
(4,40)	1:2:A:GLU:HB3	1:6:A:ARG:H	2	0.99
(4,40)	1:2:A:GLU:HB3	1:6:A:ARG:H	7	0.99
(3,558)	1:11:A:TRP:HE3	1:16:A:GLY:HA3	7	0.99
(3,506)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	7	0.99
(3,506)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	7	0.99
(3,506)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	7	0.99
(3,174)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	1	0.99
(3,174)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	4	0.99
(2,637)	1:2:A:GLU:HB3	1:6:A:ARG:H	2	0.99
(2,637)	1:2:A:GLU:HB3	1:6:A:ARG:H	7	0.99

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,592)	1:11:A:TRP:HE3	1:16:A:GLY:HA3	7	0.99
(2,534)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	7	0.99
(2,534)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	7	0.99
(2,534)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	7	0.99
(2,184)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	1	0.99
(2,184)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	4	0.99
(1,540)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HG3	3	0.99
(1,540)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HG3	3	0.99
(1,540)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HG3	3	0.99
(1,540)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HG3	6	0.99
(1,540)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HG3	6	0.99
(1,540)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HG3	6	0.99
(1,540)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HG3	10	0.99
(1,540)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HG3	10	0.99
(1,540)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HG3	10	0.99
(1,529)	1:12:A:LEU:HA	1:16:A:GLY:HA3	6	0.99
(1,485)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	10	0.99
(1,485)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB3	10	0.99
(4,23)	1:5:A:VAL:HB	1:6:A:ARG:H	8	0.98
(3,423)	1:10:A:GLN:H	1:11:A:TRP:HB2	5	0.98
(3,423)	1:10:A:GLN:H	1:11:A:TRP:HB2	6	0.98
(3,423)	1:10:A:GLN:H	1:11:A:TRP:HB2	9	0.98
(3,298)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	7	0.98
(3,298)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	7	0.98
(3,298)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	7	0.98
(3,298)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	7	0.98
(3,298)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	7	0.98
(3,298)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	7	0.98
(3,174)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	2	0.98
(2,447)	1:5:A:VAL:HB	1:6:A:ARG:H	8	0.98
(2,444)	1:10:A:GLN:H	1:11:A:TRP:HB2	5	0.98
(2,444)	1:10:A:GLN:H	1:11:A:TRP:HB2	6	0.98
(2,444)	1:10:A:GLN:H	1:11:A:TRP:HB2	9	0.98
(2,310)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	7	0.98
(2,310)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	7	0.98
(2,310)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	7	0.98
(2,310)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	7	0.98
(2,310)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	7	0.98
(2,310)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	7	0.98
(2,184)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	2	0.98
(1,613)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HG3	9	0.98
(1,485)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	3	0.98

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,485)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB3	3	0.98
(1,485)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	6	0.98
(1,485)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB3	6	0.98
(1,229)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HG3	9	0.98
(4,40)	1:2:A:GLU:HB3	1:6:A:ARG:H	8	0.97
(3,558)	1:11:A:TRP:HE3	1:16:A:GLY:HA3	8	0.97
(3,174)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	5	0.97
(3,174)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	7	0.97
(2,637)	1:2:A:GLU:HB3	1:6:A:ARG:H	8	0.97
(2,592)	1:11:A:TRP:HE3	1:16:A:GLY:HA3	8	0.97
(2,184)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	5	0.97
(2,184)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	7	0.97
(1,540)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HG3	9	0.97
(1,540)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HG3	9	0.97
(1,540)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HG3	9	0.97
(1,530)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HD3	7	0.97
(1,529)	1:12:A:LEU:HA	1:16:A:GLY:HA3	5	0.97
(1,485)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	8	0.97
(1,485)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB3	8	0.97
(1,485)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	9	0.97
(1,485)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB3	9	0.97
(1,320)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HD2	6	0.97
(1,320)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HD3	6	0.97
(4,40)	1:2:A:GLU:HB3	1:6:A:ARG:H	10	0.96
(4,1)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	1	0.96
(3,594)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HG3	1	0.96
(3,594)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HG3	1	0.96
(3,594)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HG3	1	0.96
(3,423)	1:10:A:GLN:H	1:11:A:TRP:HB2	7	0.96
(2,637)	1:2:A:GLU:HB3	1:6:A:ARG:H	10	0.96
(2,633)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HG3	1	0.96
(2,633)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HG3	1	0.96
(2,633)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HG3	1	0.96
(2,444)	1:10:A:GLN:H	1:11:A:TRP:HB2	7	0.96
(2,114)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	1	0.96
(1,642)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HB3	6	0.96
(1,530)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HD3	1	0.96
(1,529)	1:12:A:LEU:HA	1:16:A:GLY:HA3	9	0.96
(1,359)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HG3	2	0.96
(4,1)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	2	0.95
(3,558)	1:11:A:TRP:HE3	1:16:A:GLY:HA3	9	0.95
(3,423)	1:10:A:GLN:H	1:11:A:TRP:HB2	2	0.95

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,592)	1:11:A:TRP:HE3	1:16:A:GLY:HA3	9	0.95
(2,444)	1:10:A:GLN:H	1:11:A:TRP:HB2	2	0.95
(2,114)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	2	0.95
(1,642)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HB3	4	0.95
(1,642)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HB3	7	0.95
(1,529)	1:12:A:LEU:HA	1:16:A:GLY:HA3	1	0.95
(1,529)	1:12:A:LEU:HA	1:16:A:GLY:HA3	8	0.95
(1,485)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	4	0.95
(1,485)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB3	4	0.95
(1,359)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HG3	7	0.95
(4,23)	1:5:A:VAL:HB	1:6:A:ARG:H	1	0.94
(4,1)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	4	0.94
(4,1)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	5	0.94
(3,423)	1:10:A:GLN:H	1:11:A:TRP:HB2	3	0.94
(3,423)	1:10:A:GLN:H	1:11:A:TRP:HB2	4	0.94
(3,174)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	3	0.94
(3,174)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	6	0.94
(3,174)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	9	0.94
(3,174)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	10	0.94
(2,447)	1:5:A:VAL:HB	1:6:A:ARG:H	1	0.94
(2,444)	1:10:A:GLN:H	1:11:A:TRP:HB2	3	0.94
(2,444)	1:10:A:GLN:H	1:11:A:TRP:HB2	4	0.94
(2,184)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	3	0.94
(2,184)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	6	0.94
(2,184)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	9	0.94
(2,184)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	10	0.94
(2,114)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	4	0.94
(2,114)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	5	0.94
(1,529)	1:12:A:LEU:HA	1:16:A:GLY:HA3	2	0.94
(1,418)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:H	9	0.94
(1,404)	1:8:A:TYR:HB3	1:9:A:ILE:H	3	0.94
(1,359)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HG3	1	0.94
(3,558)	1:11:A:TRP:HE3	1:16:A:GLY:HA3	1	0.93
(3,443)	1:23:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	4	0.93
(3,423)	1:10:A:GLN:H	1:11:A:TRP:HB2	1	0.93
(2,592)	1:11:A:TRP:HE3	1:16:A:GLY:HA3	1	0.93
(2,469)	1:23:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	4	0.93
(2,444)	1:10:A:GLN:H	1:11:A:TRP:HB2	1	0.93
(1,580)	1:17:A:PRO:HB2	1:18:A:SER:H	7	0.93
(1,529)	1:12:A:LEU:HA	1:16:A:GLY:HA3	3	0.93
(1,485)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	2	0.93
(1,485)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB3	2	0.93

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,418)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:H	10	0.93
(1,404)	1:8:A:TYR:HB3	1:9:A:ILE:H	6	0.93
(1,359)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HG3	6	0.93
(1,217)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HE2	9	0.93
(1,217)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HE2	9	0.93
(4,23)	1:5:A:VAL:HB	1:6:A:ARG:H	3	0.92
(4,23)	1:5:A:VAL:HB	1:6:A:ARG:H	7	0.92
(4,1)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	7	0.92
(4,1)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	9	0.92
(3,499)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	7	0.92
(3,499)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	7	0.92
(3,499)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	7	0.92
(3,423)	1:10:A:GLN:H	1:11:A:TRP:HB2	10	0.92
(3,174)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	8	0.92
(2,527)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	7	0.92
(2,527)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	7	0.92
(2,527)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	7	0.92
(2,447)	1:5:A:VAL:HB	1:6:A:ARG:H	3	0.92
(2,447)	1:5:A:VAL:HB	1:6:A:ARG:H	7	0.92
(2,444)	1:10:A:GLN:H	1:11:A:TRP:HB2	10	0.92
(2,184)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	8	0.92
(2,114)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	7	0.92
(2,114)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	9	0.92
(1,602)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG2	7	0.92
(1,601)	1:3:A:GLU:HA	1:6:A:ARG:HG2	6	0.92
(1,529)	1:12:A:LEU:HA	1:16:A:GLY:HA3	10	0.92
(1,418)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:H	4	0.92
(1,404)	1:8:A:TYR:HB3	1:9:A:ILE:H	10	0.92
(1,355)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HG	6	0.92
(1,41)	1:21:A:ARG:HE	1:21:A:ARG:HG2	2	0.92
(4,40)	1:2:A:GLU:HB3	1:6:A:ARG:H	1	0.91
(4,23)	1:5:A:VAL:HB	1:6:A:ARG:H	9	0.91
(3,594)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HG3	4	0.91
(3,594)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HG3	4	0.91
(3,594)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HG3	4	0.91
(2,637)	1:2:A:GLU:HB3	1:6:A:ARG:H	1	0.91
(2,633)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HG3	4	0.91
(2,633)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HG3	4	0.91
(2,633)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HG3	4	0.91
(2,447)	1:5:A:VAL:HB	1:6:A:ARG:H	9	0.91
(1,529)	1:12:A:LEU:HA	1:16:A:GLY:HA3	4	0.91
(1,418)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:H	2	0.91

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,404)	1:8:A:TYR:HB3	1:9:A:ILE:H	8	0.91
(1,355)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HG	8	0.91
(1,320)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HD2	9	0.91
(1,320)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HD3	9	0.91
(1,41)	1:21:A:ARG:HE	1:21:A:ARG:HG2	8	0.91
(4,40)	1:2:A:GLU:HB3	1:6:A:ARG:H	9	0.9
(3,590)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	9	0.9
(3,590)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	9	0.9
(3,590)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	9	0.9
(2,637)	1:2:A:GLU:HB3	1:6:A:ARG:H	9	0.9
(2,628)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	9	0.9
(2,628)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	9	0.9
(2,628)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	9	0.9
(1,642)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HB3	5	0.9
(1,548)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG12	5	0.9
(1,548)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG12	5	0.9
(1,548)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG12	5	0.9
(1,530)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HD3	8	0.9
(1,485)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	5	0.9
(1,485)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB3	5	0.9
(1,418)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:H	1	0.9
(1,418)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:H	8	0.9
(1,404)	1:8:A:TYR:HB3	1:9:A:ILE:H	7	0.9
(1,320)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HD2	4	0.9
(1,320)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HD3	4	0.9
(1,149)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HE	3	0.9
(1,97)	1:23:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HD2	1	0.9
(1,41)	1:21:A:ARG:HE	1:21:A:ARG:HG2	3	0.9
(4,27)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:HA	1	0.89
(4,11)	1:14:A:GLU:HB3	1:14:A:GLU:HG3	1	0.89
(4,1)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	10	0.89
(3,508)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	5	0.89
(3,508)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	5	0.89
(3,508)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	5	0.89
(3,423)	1:10:A:GLN:H	1:11:A:TRP:HB2	8	0.89
(2,536)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	5	0.89
(2,536)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	5	0.89
(2,536)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	5	0.89
(2,486)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:HA	1	0.89
(2,444)	1:10:A:GLN:H	1:11:A:TRP:HB2	8	0.89
(2,239)	1:14:A:GLU:HB3	1:14:A:GLU:HG3	1	0.89
(2,114)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	10	0.89

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,530)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HD3	2	0.89
(1,418)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:H	3	0.89
(1,418)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:H	6	0.89
(4,40)	1:2:A:GLU:HB3	1:6:A:ARG:H	4	0.88
(4,23)	1:5:A:VAL:HB	1:6:A:ARG:H	10	0.88
(4,20)	1:11:A:TRP:HE3	1:11:A:TRP:HH2	7	0.88
(4,20)	1:11:A:TRP:HE3	1:11:A:TRP:HH2	9	0.88
(4,20)	1:11:A:TRP:HE3	1:11:A:TRP:HH2	10	0.88
(4,11)	1:14:A:GLU:HB3	1:14:A:GLU:HG3	2	0.88
(4,11)	1:14:A:GLU:HB3	1:14:A:GLU:HG3	3	0.88
(4,11)	1:14:A:GLU:HB3	1:14:A:GLU:HG3	4	0.88
(4,1)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	6	0.88
(3,507)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	1	0.88
(3,507)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	1	0.88
(3,507)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	1	0.88
(3,507)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG21	1	0.88
(3,507)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG22	1	0.88
(3,507)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG23	1	0.88
(3,332)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB2	6	0.88
(2,637)	1:2:A:GLU:HB3	1:6:A:ARG:H	4	0.88
(2,535)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	1	0.88
(2,535)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	1	0.88
(2,535)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	1	0.88
(2,535)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG21	1	0.88
(2,535)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG22	1	0.88
(2,535)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG23	1	0.88
(2,447)	1:5:A:VAL:HB	1:6:A:ARG:H	10	0.88
(2,390)	1:11:A:TRP:HE3	1:11:A:TRP:HH2	7	0.88
(2,390)	1:11:A:TRP:HE3	1:11:A:TRP:HH2	9	0.88
(2,390)	1:11:A:TRP:HE3	1:11:A:TRP:HH2	10	0.88
(2,348)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB2	6	0.88
(2,239)	1:14:A:GLU:HB3	1:14:A:GLU:HG3	2	0.88
(2,239)	1:14:A:GLU:HB3	1:14:A:GLU:HG3	3	0.88
(2,239)	1:14:A:GLU:HB3	1:14:A:GLU:HG3	4	0.88
(2,114)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	6	0.88
(1,642)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HB3	1	0.88
(1,642)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HB3	2	0.88
(1,580)	1:17:A:PRO:HB2	1:18:A:SER:H	5	0.88
(1,580)	1:17:A:PRO:HB2	1:18:A:SER:H	8	0.88
(1,530)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HD3	9	0.88
(1,485)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	1	0.88
(1,485)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB3	1	0.88

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,464)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:H	1	0.88
(1,387)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HZ3	9	0.88
(1,387)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HZ3	9	0.88
(4,40)	1:2:A:GLU:HB3	1:6:A:ARG:H	5	0.87
(4,20)	1:11:A:TRP:HE3	1:11:A:TRP:HH2	3	0.87
(4,20)	1:11:A:TRP:HE3	1:11:A:TRP:HH2	6	0.87
(4,20)	1:11:A:TRP:HE3	1:11:A:TRP:HH2	8	0.87
(3,589)	1:7:A:LEU:HD21	1:10:A:GLN:HG2	3	0.87
(3,589)	1:7:A:LEU:HD22	1:10:A:GLN:HG2	3	0.87
(3,589)	1:7:A:LEU:HD23	1:10:A:GLN:HG2	3	0.87
(3,428)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:H	3	0.87
(3,428)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:H	3	0.87
(3,428)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:H	3	0.87
(3,298)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	6	0.87
(3,298)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	6	0.87
(3,298)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	6	0.87
(3,298)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	6	0.87
(3,298)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	6	0.87
(3,298)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	6	0.87
(2,637)	1:2:A:GLU:HB3	1:6:A:ARG:H	5	0.87
(2,627)	1:7:A:LEU:HD21	1:10:A:GLN:HG2	3	0.87
(2,627)	1:7:A:LEU:HD22	1:10:A:GLN:HG2	3	0.87
(2,627)	1:7:A:LEU:HD23	1:10:A:GLN:HG2	3	0.87
(2,453)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:H	3	0.87
(2,453)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:H	3	0.87
(2,453)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:H	3	0.87
(2,390)	1:11:A:TRP:HE3	1:11:A:TRP:HH2	3	0.87
(2,390)	1:11:A:TRP:HE3	1:11:A:TRP:HH2	6	0.87
(2,390)	1:11:A:TRP:HE3	1:11:A:TRP:HH2	8	0.87
(2,310)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	6	0.87
(2,310)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	6	0.87
(2,310)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	6	0.87
(2,310)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	6	0.87
(2,310)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	6	0.87
(2,310)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	6	0.87
(1,530)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HD3	6	0.87
(1,502)	1:11:A:TRP:HB3	1:24:A:PRO:HG3	9	0.87
(1,449)	1:3:A:GLU:HB2	1:6:A:ARG:H	4	0.87
(1,418)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:H	5	0.87
(1,404)	1:8:A:TYR:HB3	1:9:A:ILE:H	5	0.87
(1,369)	1:3:A:GLU:H	1:4:A:ALA:H	6	0.87
(1,355)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HG	3	0.87

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,355)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HG	7	0.87
(4,30)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG11	1	0.86
(4,30)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG12	1	0.86
(4,30)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG13	1	0.86
(4,30)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG11	1	0.86
(4,30)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG12	1	0.86
(4,30)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG13	1	0.86
(4,30)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG11	1	0.86
(4,30)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG12	1	0.86
(4,30)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG13	1	0.86
(4,30)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	1	0.86
(4,30)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	1	0.86
(4,30)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	1	0.86
(4,30)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	1	0.86
(4,30)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	1	0.86
(4,30)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	1	0.86
(4,30)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	1	0.86
(4,30)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	1	0.86
(4,30)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	1	0.86
(4,27)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:HA	7	0.86
(4,20)	1:11:A:TRP:HE3	1:11:A:TRP:HH2	1	0.86
(4,20)	1:11:A:TRP:HE3	1:11:A:TRP:HH2	2	0.86
(4,20)	1:11:A:TRP:HE3	1:11:A:TRP:HH2	4	0.86
(3,589)	1:7:A:LEU:HD21	1:10:A:GLN:HG2	8	0.86
(3,589)	1:7:A:LEU:HD22	1:10:A:GLN:HG2	8	0.86
(3,589)	1:7:A:LEU:HD23	1:10:A:GLN:HG2	8	0.86
(3,506)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	2	0.86
(3,506)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	2	0.86
(3,506)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	2	0.86
(3,428)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:H	10	0.86
(3,428)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:H	10	0.86
(3,428)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:H	10	0.86
(3,376)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:H	9	0.86
(2,627)	1:7:A:LEU:HD21	1:10:A:GLN:HG2	8	0.86
(2,627)	1:7:A:LEU:HD22	1:10:A:GLN:HG2	8	0.86
(2,627)	1:7:A:LEU:HD23	1:10:A:GLN:HG2	8	0.86
(2,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG11	1	0.86
(2,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG12	1	0.86
(2,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG13	1	0.86
(2,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG11	1	0.86
(2,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG12	1	0.86
(2,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG13	1	0.86

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG11	1	0.86
(2,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG12	1	0.86
(2,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG13	1	0.86
(2,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	1	0.86
(2,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	1	0.86
(2,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	1	0.86
(2,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	1	0.86
(2,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	1	0.86
(2,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	1	0.86
(2,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	1	0.86
(2,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	1	0.86
(2,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	1	0.86
(2,534)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	2	0.86
(2,534)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	2	0.86
(2,534)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	2	0.86
(2,486)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:HA	7	0.86
(2,453)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:H	10	0.86
(2,453)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:H	10	0.86
(2,453)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:H	10	0.86
(2,396)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:H	9	0.86
(2,390)	1:11:A:TRP:HE3	1:11:A:TRP:HH2	1	0.86
(2,390)	1:11:A:TRP:HE3	1:11:A:TRP:HH2	2	0.86
(2,390)	1:11:A:TRP:HE3	1:11:A:TRP:HH2	4	0.86
(1,533)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HE2	7	0.86
(1,533)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HE2	7	0.86
(1,533)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HE2	7	0.86
(1,530)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HD3	4	0.86
(1,530)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HD3	10	0.86
(1,418)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:H	7	0.86
(1,404)	1:8:A:TYR:HB3	1:9:A:ILE:H	2	0.86
(4,27)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:HA	5	0.85
(4,23)	1:5:A:VAL:HB	1:6:A:ARG:H	6	0.85
(4,20)	1:11:A:TRP:HE3	1:11:A:TRP:HH2	5	0.85
(4,1)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	3	0.85
(4,1)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	8	0.85
(3,590)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	10	0.85
(3,590)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	10	0.85
(3,590)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	10	0.85
(3,589)	1:7:A:LEU:HD21	1:10:A:GLN:HG2	10	0.85
(3,589)	1:7:A:LEU:HD22	1:10:A:GLN:HG2	10	0.85
(3,589)	1:7:A:LEU:HD23	1:10:A:GLN:HG2	10	0.85
(3,587)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HG2	4	0.85

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,587)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HG2	4	0.85
(3,587)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HG2	7	0.85
(3,587)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HG2	7	0.85
(3,376)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:H	6	0.85
(3,376)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:H	10	0.85
(2,628)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	10	0.85
(2,628)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	10	0.85
(2,628)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	10	0.85
(2,627)	1:7:A:LEU:HD21	1:10:A:GLN:HG2	10	0.85
(2,627)	1:7:A:LEU:HD22	1:10:A:GLN:HG2	10	0.85
(2,627)	1:7:A:LEU:HD23	1:10:A:GLN:HG2	10	0.85
(2,625)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HG2	4	0.85
(2,625)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HG2	4	0.85
(2,625)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HG2	7	0.85
(2,625)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HG2	7	0.85
(2,486)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:HA	5	0.85
(2,447)	1:5:A:VAL:HB	1:6:A:ARG:H	6	0.85
(2,396)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:H	6	0.85
(2,396)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:H	10	0.85
(2,390)	1:11:A:TRP:HE3	1:11:A:TRP:HH2	5	0.85
(2,114)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	3	0.85
(2,114)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	8	0.85
(1,560)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	9	0.85
(1,536)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	2	0.85
(1,536)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	2	0.85
(1,536)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	2	0.85
(1,499)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HD3	2	0.85
(1,404)	1:8:A:TYR:HB3	1:9:A:ILE:H	1	0.85
(1,355)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HG	10	0.85
(3,590)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	3	0.84
(3,590)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	3	0.84
(3,590)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	3	0.84
(3,590)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	8	0.84
(3,590)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	8	0.84
(3,590)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	8	0.84
(3,428)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:H	2	0.84
(3,428)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:H	2	0.84
(3,428)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:H	2	0.84
(3,428)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:H	6	0.84
(3,428)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:H	6	0.84
(3,428)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:H	6	0.84
(3,376)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:H	3	0.84

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,376)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:H	8	0.84
(2,628)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	3	0.84
(2,628)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	3	0.84
(2,628)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	3	0.84
(2,628)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	8	0.84
(2,628)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	8	0.84
(2,628)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	8	0.84
(2,453)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:H	2	0.84
(2,453)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:H	2	0.84
(2,453)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:H	2	0.84
(2,453)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:H	6	0.84
(2,453)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:H	6	0.84
(2,453)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:H	6	0.84
(2,396)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:H	3	0.84
(2,396)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:H	8	0.84
(1,560)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	6	0.84
(1,530)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HD3	3	0.84
(1,530)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HD3	5	0.84
(1,404)	1:8:A:TYR:HB3	1:9:A:ILE:H	4	0.84
(1,359)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HG3	3	0.84
(1,324)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HD2	9	0.84
(1,324)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HD2	9	0.84
(1,97)	1:23:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HD2	2	0.84
(1,97)	1:23:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HD2	5	0.84
(3,600)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	10	0.83
(3,589)	1:7:A:LEU:HD21	1:10:A:GLN:HG2	6	0.83
(3,589)	1:7:A:LEU:HD22	1:10:A:GLN:HG2	6	0.83
(3,589)	1:7:A:LEU:HD23	1:10:A:GLN:HG2	6	0.83
(3,499)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	9	0.83
(3,499)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	9	0.83
(3,499)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	9	0.83
(3,428)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:H	9	0.83
(3,428)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:H	9	0.83
(3,428)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:H	9	0.83
(2,641)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	10	0.83
(2,627)	1:7:A:LEU:HD21	1:10:A:GLN:HG2	6	0.83
(2,627)	1:7:A:LEU:HD22	1:10:A:GLN:HG2	6	0.83
(2,627)	1:7:A:LEU:HD23	1:10:A:GLN:HG2	6	0.83
(2,527)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	9	0.83
(2,527)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	9	0.83
(2,527)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	9	0.83
(2,453)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:H	9	0.83

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,453)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:H	9	0.83
(2,453)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:H	9	0.83
(1,560)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	1	0.83
(1,560)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	5	0.83
(1,560)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	7	0.83
(1,320)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HD2	1	0.83
(1,320)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HD3	1	0.83
(4,30)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG11	2	0.82
(4,30)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG12	2	0.82
(4,30)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG13	2	0.82
(4,30)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG11	2	0.82
(4,30)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG12	2	0.82
(4,30)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG13	2	0.82
(4,30)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG11	2	0.82
(4,30)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG12	2	0.82
(4,30)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG13	2	0.82
(4,30)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	2	0.82
(4,30)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	2	0.82
(4,30)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	2	0.82
(4,30)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	2	0.82
(4,30)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	2	0.82
(4,30)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	2	0.82
(4,30)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	2	0.82
(4,30)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	2	0.82
(4,30)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	2	0.82
(4,27)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:HA	3	0.82
(3,590)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	6	0.82
(3,590)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	6	0.82
(3,590)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	6	0.82
(2,628)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	6	0.82
(2,628)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	6	0.82
(2,628)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	6	0.82
(2,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG11	2	0.82
(2,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG12	2	0.82
(2,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG13	2	0.82
(2,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG11	2	0.82
(2,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG12	2	0.82
(2,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG13	2	0.82
(2,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG11	2	0.82
(2,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG12	2	0.82
(2,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG13	2	0.82
(2,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	2	0.82

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	2	0.82
(2,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	2	0.82
(2,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	2	0.82
(2,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	2	0.82
(2,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	2	0.82
(2,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	2	0.82
(2,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	2	0.82
(2,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	2	0.82
(2,486)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:HA	3	0.82
(1,560)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	2	0.82
(1,560)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	3	0.82
(1,560)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	4	0.82
(1,560)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	8	0.82
(1,560)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	10	0.82
(1,533)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HE2	6	0.82
(1,533)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HE2	6	0.82
(1,533)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HE2	6	0.82
(1,499)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HD3	5	0.82
(1,387)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HZ3	10	0.82
(1,387)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HZ3	10	0.82
(1,355)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HG	5	0.82
(1,355)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HG	9	0.82
(4,40)	1:2:A:GLU:HB3	1:6:A:ARG:H	3	0.81
(3,428)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:H	1	0.81
(3,428)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:H	1	0.81
(3,428)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:H	1	0.81
(3,428)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:H	8	0.81
(3,428)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:H	8	0.81
(3,428)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:H	8	0.81
(2,637)	1:2:A:GLU:HB3	1:6:A:ARG:H	3	0.81
(2,453)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:H	1	0.81
(2,453)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:H	1	0.81
(2,453)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:H	1	0.81
(2,453)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:H	8	0.81
(2,453)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:H	8	0.81
(2,453)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:H	8	0.81
(1,387)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HZ3	6	0.81
(1,387)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HZ3	6	0.81
(1,359)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HG3	4	0.81
(1,359)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HG3	10	0.81
(1,331)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HG3	8	0.81
(1,229)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HG3	2	0.81

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,41)	1:9:A:ILE:HA	1:11:A:TRP:HE3	1	0.8
(3,589)	1:7:A:LEU:HD21	1:10:A:GLN:HG2	9	0.8
(3,589)	1:7:A:LEU:HD22	1:10:A:GLN:HG2	9	0.8
(3,589)	1:7:A:LEU:HD23	1:10:A:GLN:HG2	9	0.8
(3,506)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	5	0.8
(3,506)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	5	0.8
(3,506)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	5	0.8
(3,391)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:H	5	0.8
(3,391)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:H	5	0.8
(3,391)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:H	5	0.8
(3,376)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:H	2	0.8
(3,332)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB2	5	0.8
(2,638)	1:9:A:ILE:HA	1:11:A:TRP:HE3	1	0.8
(2,627)	1:7:A:LEU:HD21	1:10:A:GLN:HG2	9	0.8
(2,627)	1:7:A:LEU:HD22	1:10:A:GLN:HG2	9	0.8
(2,627)	1:7:A:LEU:HD23	1:10:A:GLN:HG2	9	0.8
(2,534)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	5	0.8
(2,534)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	5	0.8
(2,534)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	5	0.8
(2,411)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:H	5	0.8
(2,411)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:H	5	0.8
(2,411)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:H	5	0.8
(2,396)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:H	2	0.8
(2,348)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB2	5	0.8
(1,583)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HE21	1	0.8
(1,536)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	1	0.8
(1,536)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	1	0.8
(1,536)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	1	0.8
(1,499)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HD3	1	0.8
(1,499)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HD3	4	0.8
(1,449)	1:3:A:GLU:HB2	1:6:A:ARG:H	5	0.8
(1,387)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HZ3	8	0.8
(1,387)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HZ3	8	0.8
(3,428)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:H	7	0.79
(3,428)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:H	7	0.79
(3,428)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:H	7	0.79
(2,453)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:H	7	0.79
(2,453)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:H	7	0.79
(2,453)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:H	7	0.79
(1,580)	1:17:A:PRO:HB2	1:18:A:SER:H	1	0.79
(1,548)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG12	7	0.79
(1,548)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG12	7	0.79

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,548)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG12	7	0.79
(1,387)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HZ3	2	0.79
(1,387)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HZ3	2	0.79
(1,387)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HZ3	4	0.79
(1,387)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HZ3	4	0.79
(1,387)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HZ3	7	0.79
(1,387)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HZ3	7	0.79
(1,369)	1:3:A:GLU:H	1:4:A:ALA:H	4	0.79
(1,331)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HG3	7	0.79
(1,97)	1:23:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HD2	4	0.79
(1,40)	1:21:A:ARG:HE	1:21:A:ARG:HG3	6	0.79
(3,600)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	9	0.78
(3,443)	1:23:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	5	0.78
(3,428)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:H	5	0.78
(3,428)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:H	5	0.78
(3,428)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:H	5	0.78
(3,376)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:H	4	0.78
(3,332)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB2	2	0.78
(3,332)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB2	9	0.78
(2,641)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	9	0.78
(2,469)	1:23:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	5	0.78
(2,453)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:H	5	0.78
(2,453)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:H	5	0.78
(2,453)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:H	5	0.78
(2,396)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:H	4	0.78
(2,348)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB2	2	0.78
(2,348)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB2	9	0.78
(1,618)	1:8:A:TYR:HB2	1:24:A:PRO:HG2	9	0.78
(1,539)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HB2	1	0.78
(1,539)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HB2	1	0.78
(1,539)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HB2	1	0.78
(1,449)	1:3:A:GLU:HB2	1:6:A:ARG:H	3	0.78
(1,229)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HG3	3	0.78
(1,229)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HG3	5	0.78
(1,229)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HG3	7	0.78
(4,41)	1:9:A:ILE:HA	1:11:A:TRP:HE3	2	0.77
(3,600)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	2	0.77
(3,600)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	3	0.77
(3,600)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	7	0.77
(3,587)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HG2	5	0.77
(3,587)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HG2	5	0.77
(2,641)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	2	0.77

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,641)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	3	0.77
(2,641)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	7	0.77
(2,638)	1:9:A:ILE:HA	1:11:A:TRP:HE3	2	0.77
(2,625)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HG2	5	0.77
(2,625)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HG2	5	0.77
(1,562)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HG	3	0.77
(1,562)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HG	9	0.77
(1,548)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG12	8	0.77
(1,548)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG12	8	0.77
(1,548)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG12	8	0.77
(1,229)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HG3	6	0.77
(1,229)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HG3	8	0.77
(4,41)	1:9:A:ILE:HA	1:11:A:TRP:HE3	5	0.76
(4,30)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG11	5	0.76
(4,30)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG12	5	0.76
(4,30)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG13	5	0.76
(4,30)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG11	5	0.76
(4,30)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG12	5	0.76
(4,30)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG13	5	0.76
(4,30)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG11	5	0.76
(4,30)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG12	5	0.76
(4,30)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG13	5	0.76
(4,30)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	5	0.76
(4,30)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	5	0.76
(4,30)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	5	0.76
(4,30)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	5	0.76
(4,30)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	5	0.76
(4,30)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	5	0.76
(4,30)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	5	0.76
(4,30)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	5	0.76
(4,30)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	5	0.76
(3,600)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	8	0.76
(3,589)	1:7:A:LEU:HD21	1:10:A:GLN:HG2	7	0.76
(3,589)	1:7:A:LEU:HD22	1:10:A:GLN:HG2	7	0.76
(3,589)	1:7:A:LEU:HD23	1:10:A:GLN:HG2	7	0.76
(3,376)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:H	1	0.76
(3,332)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB2	1	0.76
(3,332)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB2	4	0.76
(3,332)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB2	8	0.76
(3,291)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB3	4	0.76
(3,291)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB3	4	0.76
(2,641)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	8	0.76

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,638)	1:9:A:ILE:HA	1:11:A:TRP:HE3	5	0.76
(2,627)	1:7:A:LEU:HD21	1:10:A:GLN:HG2	7	0.76
(2,627)	1:7:A:LEU:HD22	1:10:A:GLN:HG2	7	0.76
(2,627)	1:7:A:LEU:HD23	1:10:A:GLN:HG2	7	0.76
(2,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG11	5	0.76
(2,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG12	5	0.76
(2,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG13	5	0.76
(2,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG11	5	0.76
(2,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG12	5	0.76
(2,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG13	5	0.76
(2,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG11	5	0.76
(2,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG12	5	0.76
(2,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG13	5	0.76
(2,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	5	0.76
(2,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	5	0.76
(2,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	5	0.76
(2,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	5	0.76
(2,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	5	0.76
(2,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	5	0.76
(2,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	5	0.76
(2,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	5	0.76
(2,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	5	0.76
(2,396)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:H	1	0.76
(2,348)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB2	1	0.76
(2,348)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB2	4	0.76
(2,348)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB2	8	0.76
(2,303)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB3	4	0.76
(2,303)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB3	4	0.76
(1,630)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HG3	7	0.76
(1,630)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HG3	7	0.76
(1,630)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HG3	7	0.76
(1,562)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HG	8	0.76
(1,539)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HB2	2	0.76
(1,539)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HB2	2	0.76
(1,539)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HB2	2	0.76
(1,539)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HB2	5	0.76
(1,539)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HB2	5	0.76
(1,539)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HB2	5	0.76
(1,447)	1:5:A:VAL:HB	1:6:A:ARG:H	4	0.76
(1,359)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HG3	5	0.76
(1,355)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HG	1	0.76
(1,355)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HG	4	0.76

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,229)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HG3	1	0.76
(1,229)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HG3	4	0.76
(1,135)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HG	3	0.76
(1,135)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HG	9	0.76
(4,41)	1:9:A:ILE:HA	1:11:A:TRP:HE3	4	0.75
(4,40)	1:2:A:GLU:HB3	1:6:A:ARG:H	6	0.75
(3,600)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	4	0.75
(3,515)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG13	5	0.75
(3,515)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG13	5	0.75
(3,515)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG13	5	0.75
(3,391)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:H	7	0.75
(3,391)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:H	7	0.75
(3,391)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:H	7	0.75
(3,332)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB2	3	0.75
(2,641)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	4	0.75
(2,638)	1:9:A:ILE:HA	1:11:A:TRP:HE3	4	0.75
(2,637)	1:2:A:GLU:HB3	1:6:A:ARG:H	6	0.75
(2,544)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG13	5	0.75
(2,544)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG13	5	0.75
(2,544)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG13	5	0.75
(2,411)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:H	7	0.75
(2,411)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:H	7	0.75
(2,411)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:H	7	0.75
(2,348)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB2	3	0.75
(1,583)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HE21	4	0.75
(1,562)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HG	6	0.75
(1,562)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HG	7	0.75
(1,562)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HG	10	0.75
(1,548)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG12	2	0.75
(1,548)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG12	2	0.75
(1,548)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG12	2	0.75
(1,387)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HZ3	1	0.75
(1,387)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HZ3	1	0.75
(1,293)	1:10:A:GLN:HE21	1:14:A:GLU:HG3	7	0.75
(1,135)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HG	8	0.75
(3,600)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	1	0.74
(3,600)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	5	0.74
(3,507)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	8	0.74
(3,507)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	8	0.74
(3,507)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	8	0.74
(3,507)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG21	8	0.74
(3,507)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG22	8	0.74

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,507)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG23	8	0.74
(3,499)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	5	0.74
(3,499)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	5	0.74
(3,499)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	5	0.74
(3,332)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB2	10	0.74
(3,291)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB3	2	0.74
(3,291)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB3	2	0.74
(2,641)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	1	0.74
(2,641)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	5	0.74
(2,535)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	8	0.74
(2,535)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	8	0.74
(2,535)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	8	0.74
(2,535)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG21	8	0.74
(2,535)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG22	8	0.74
(2,535)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG23	8	0.74
(2,527)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	5	0.74
(2,527)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	5	0.74
(2,527)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	5	0.74
(2,348)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB2	10	0.74
(2,303)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB3	2	0.74
(2,303)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB3	2	0.74
(1,657)	1:10:A:GLN:HG2	1:14:A:GLU:HG2	9	0.74
(1,657)	1:10:A:GLN:HG2	1:14:A:GLU:HG2	10	0.74
(1,616)	1:12:A:LEU:HA	1:16:A:GLY:HA2	5	0.74
(1,616)	1:12:A:LEU:HA	1:16:A:GLY:HA2	6	0.74
(1,598)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD21	4	0.74
(1,598)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD22	4	0.74
(1,598)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD23	4	0.74
(1,548)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG12	1	0.74
(1,548)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG12	1	0.74
(1,548)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG12	1	0.74
(1,538)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HB2	10	0.74
(1,538)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HB2	10	0.74
(1,538)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HB2	10	0.74
(1,449)	1:3:A:GLU:HB2	1:6:A:ARG:H	8	0.74
(1,355)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HG	2	0.74
(1,229)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HG3	10	0.74
(3,600)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	6	0.73
(3,391)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:H	8	0.73
(3,391)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:H	8	0.73
(3,391)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:H	8	0.73
(2,641)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	6	0.73

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,411)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:H	8	0.73
(2,411)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:H	8	0.73
(2,411)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:H	8	0.73
(1,562)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HG	1	0.73
(1,562)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HG	2	0.73
(1,562)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HG	4	0.73
(1,562)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HG	5	0.73
(1,539)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HB2	4	0.73
(1,539)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HB2	4	0.73
(1,539)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HB2	4	0.73
(1,474)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:H	6	0.73
(1,449)	1:3:A:GLU:HB2	1:6:A:ARG:H	2	0.73
(1,360)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HG2	7	0.73
(1,135)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HG	6	0.73
(1,135)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HG	10	0.73
(1,99)	1:23:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD2	3	0.73
(1,99)	1:23:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD2	6	0.73
(3,325)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	5	0.72
(3,325)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	8	0.72
(2,341)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	5	0.72
(2,341)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	8	0.72
(1,543)	1:7:A:LEU:HD21	1:10:A:GLN:HB2	4	0.72
(1,543)	1:7:A:LEU:HD22	1:10:A:GLN:HB2	4	0.72
(1,543)	1:7:A:LEU:HD23	1:10:A:GLN:HB2	4	0.72
(1,543)	1:7:A:LEU:HD21	1:10:A:GLN:HB3	4	0.72
(1,543)	1:7:A:LEU:HD22	1:10:A:GLN:HB3	4	0.72
(1,543)	1:7:A:LEU:HD23	1:10:A:GLN:HB3	4	0.72
(1,536)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	4	0.72
(1,536)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	4	0.72
(1,536)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	4	0.72
(1,474)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:H	1	0.72
(1,449)	1:3:A:GLU:HB2	1:6:A:ARG:H	7	0.72
(1,449)	1:3:A:GLU:HB2	1:6:A:ARG:H	10	0.72
(1,324)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HD2	7	0.72
(1,324)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HD2	7	0.72
(1,99)	1:23:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD2	10	0.72
(3,428)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:H	4	0.71
(3,428)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:H	4	0.71
(3,428)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:H	4	0.71
(3,376)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:H	7	0.71
(3,325)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	2	0.71
(3,325)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	6	0.71

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,325)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	9	0.71
(3,291)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB3	1	0.71
(3,291)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB3	1	0.71
(2,453)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:H	4	0.71
(2,453)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:H	4	0.71
(2,453)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:H	4	0.71
(2,396)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:H	7	0.71
(2,341)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	2	0.71
(2,341)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	6	0.71
(2,341)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	9	0.71
(2,303)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB3	1	0.71
(2,303)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB3	1	0.71
(1,628)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	5	0.71
(1,628)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	5	0.71
(1,628)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	5	0.71
(1,616)	1:12:A:LEU:HA	1:16:A:GLY:HA2	3	0.71
(1,616)	1:12:A:LEU:HA	1:16:A:GLY:HA2	10	0.71
(1,449)	1:3:A:GLU:HB2	1:6:A:ARG:H	6	0.71
(1,331)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HG3	9	0.71
(1,310)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	4	0.71
(1,310)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	4	0.71
(1,310)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	4	0.71
(1,310)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	4	0.71
(1,310)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	4	0.71
(1,310)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	4	0.71
(1,310)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HD1	4	0.71
(1,310)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HD2	4	0.71
(1,310)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HD1	4	0.71
(1,310)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HD2	4	0.71
(1,310)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HD1	4	0.71
(1,310)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HD2	4	0.71
(1,38)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HG2	7	0.71
(4,27)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:HA	10	0.7
(3,325)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	4	0.7
(3,325)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	7	0.7
(3,325)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	10	0.7
(2,486)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:HA	10	0.7
(2,341)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	4	0.7
(2,341)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	7	0.7
(2,341)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	10	0.7
(1,628)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	2	0.7
(1,628)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	2	0.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,628)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	2	0.7
(1,616)	1:12:A:LEU:HA	1:16:A:GLY:HA2	4	0.7
(1,519)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD11	9	0.7
(1,519)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD12	9	0.7
(1,519)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD13	9	0.7
(1,449)	1:3:A:GLU:HB2	1:6:A:ARG:H	1	0.7
(1,449)	1:3:A:GLU:HB2	1:6:A:ARG:H	9	0.7
(1,331)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HG3	4	0.7
(1,331)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HG3	5	0.7
(1,309)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB3	9	0.7
(1,309)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB3	9	0.7
(3,499)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	2	0.69
(3,499)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	2	0.69
(3,499)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	2	0.69
(3,325)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	1	0.69
(3,289)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HE3	9	0.69
(2,527)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	2	0.69
(2,527)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	2	0.69
(2,527)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	2	0.69
(2,341)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	1	0.69
(2,301)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HE3	9	0.69
(1,657)	1:10:A:GLN:HG2	1:14:A:GLU:HG2	6	0.69
(1,631)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HG3	6	0.69
(1,631)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HG3	6	0.69
(1,631)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HG3	6	0.69
(1,583)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HE21	2	0.69
(1,528)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB3	4	0.69
(1,528)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB3	4	0.69
(1,528)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB3	4	0.69
(1,528)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HB3	4	0.69
(1,528)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HB3	4	0.69
(1,528)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HB3	4	0.69
(1,511)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HB2	6	0.69
(1,99)	1:23:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD2	9	0.69
(1,48)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG2	7	0.69
(3,515)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG13	8	0.68
(3,515)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG13	8	0.68
(3,515)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG13	8	0.68
(3,325)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	3	0.68
(3,291)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB3	7	0.68
(3,291)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB3	7	0.68
(3,289)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HE3	6	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,127)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD11	7	0.68
(3,127)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD12	7	0.68
(3,127)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD13	7	0.68
(2,544)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG13	8	0.68
(2,544)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG13	8	0.68
(2,544)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG13	8	0.68
(2,341)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	3	0.68
(2,303)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB3	7	0.68
(2,303)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB3	7	0.68
(2,301)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HE3	6	0.68
(2,130)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD11	7	0.68
(2,130)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD12	7	0.68
(2,130)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD13	7	0.68
(1,631)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HG3	8	0.68
(1,631)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HG3	8	0.68
(1,631)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HG3	8	0.68
(1,616)	1:12:A:LEU:HA	1:16:A:GLY:HA2	8	0.68
(1,598)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD21	2	0.68
(1,598)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD22	2	0.68
(1,598)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD23	2	0.68
(1,583)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HE21	7	0.68
(1,519)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD11	3	0.68
(1,519)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD12	3	0.68
(1,519)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD13	3	0.68
(1,519)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD11	8	0.68
(1,519)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD12	8	0.68
(1,519)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD13	8	0.68
(1,474)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:H	3	0.68
(1,360)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HG2	8	0.68
(1,324)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HD2	3	0.68
(1,324)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HD2	3	0.68
(1,87)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG2	6	0.68
(3,515)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG13	7	0.67
(3,515)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG13	7	0.67
(3,515)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG13	7	0.67
(3,347)	1:11:A:TRP:HE1	1:19:A:SER:HB2	7	0.67
(2,544)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG13	7	0.67
(2,544)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG13	7	0.67
(2,544)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG13	7	0.67
(2,364)	1:11:A:TRP:HE1	1:19:A:SER:HB2	7	0.67
(1,616)	1:12:A:LEU:HA	1:16:A:GLY:HA2	2	0.67
(1,499)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HD3	9	0.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,331)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HG3	3	0.67
(1,324)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HD2	1	0.67
(1,324)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HD2	1	0.67
(1,40)	1:21:A:ARG:HE	1:21:A:ARG:HG3	1	0.67
(4,4)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB2	7	0.66
(3,587)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HG2	1	0.66
(3,587)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HG2	1	0.66
(3,514)	1:7:A:LEU:HD21	1:10:A:GLN:HB2	3	0.66
(3,514)	1:7:A:LEU:HD22	1:10:A:GLN:HB2	3	0.66
(3,514)	1:7:A:LEU:HD23	1:10:A:GLN:HB2	3	0.66
(3,510)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HB2	5	0.66
(3,510)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HB2	5	0.66
(3,510)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HB2	5	0.66
(3,443)	1:23:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	2	0.66
(3,376)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:H	5	0.66
(3,332)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB2	7	0.66
(3,291)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB3	5	0.66
(3,291)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB3	5	0.66
(3,291)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB3	6	0.66
(3,291)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB3	6	0.66
(3,289)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HE3	1	0.66
(3,289)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HE3	3	0.66
(3,289)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HE3	5	0.66
(3,289)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HE3	10	0.66
(3,245)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	7	0.66
(3,245)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	7	0.66
(3,245)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	7	0.66
(3,245)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	8	0.66
(3,245)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	8	0.66
(3,245)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	8	0.66
(2,625)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HG2	1	0.66
(2,625)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HG2	1	0.66
(2,543)	1:7:A:LEU:HD21	1:10:A:GLN:HB2	3	0.66
(2,543)	1:7:A:LEU:HD22	1:10:A:GLN:HB2	3	0.66
(2,543)	1:7:A:LEU:HD23	1:10:A:GLN:HB2	3	0.66
(2,538)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HB2	5	0.66
(2,538)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HB2	5	0.66
(2,538)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HB2	5	0.66
(2,469)	1:23:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	2	0.66
(2,396)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:H	5	0.66
(2,348)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB2	7	0.66
(2,303)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB3	5	0.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,303)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB3	5	0.66
(2,303)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB3	6	0.66
(2,303)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB3	6	0.66
(2,301)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HE3	1	0.66
(2,301)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HE3	3	0.66
(2,301)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HE3	5	0.66
(2,301)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HE3	10	0.66
(2,256)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	7	0.66
(2,256)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	7	0.66
(2,256)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	7	0.66
(2,256)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	8	0.66
(2,256)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	8	0.66
(2,256)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	8	0.66
(2,136)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB2	7	0.66
(1,631)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HG3	10	0.66
(1,631)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HG3	10	0.66
(1,631)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HG3	10	0.66
(1,628)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	1	0.66
(1,628)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	1	0.66
(1,628)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	1	0.66
(1,616)	1:12:A:LEU:HA	1:16:A:GLY:HA2	1	0.66
(1,616)	1:12:A:LEU:HA	1:16:A:GLY:HA2	7	0.66
(1,616)	1:12:A:LEU:HA	1:16:A:GLY:HA2	9	0.66
(1,601)	1:3:A:GLU:HA	1:6:A:ARG:HG2	9	0.66
(1,583)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HE21	3	0.66
(1,583)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HE21	5	0.66
(1,583)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HE21	6	0.66
(1,538)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HB2	6	0.66
(1,538)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HB2	6	0.66
(1,538)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HB2	6	0.66
(1,535)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG11	6	0.66
(1,535)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG12	6	0.66
(1,535)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG13	6	0.66
(1,535)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	6	0.66
(1,535)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	6	0.66
(1,535)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	6	0.66
(1,535)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG11	6	0.66
(1,535)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG12	6	0.66
(1,535)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG13	6	0.66
(1,535)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG21	6	0.66
(1,535)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG22	6	0.66
(1,535)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG23	6	0.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,519)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD11	6	0.66
(1,519)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD12	6	0.66
(1,519)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD13	6	0.66
(1,519)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD11	10	0.66
(1,519)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD12	10	0.66
(1,519)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD13	10	0.66
(1,499)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HD3	7	0.66
(1,488)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HD2	2	0.66
(1,488)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HD2	4	0.66
(1,488)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HD2	5	0.66
(1,324)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HD2	8	0.66
(1,324)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HD2	8	0.66
(1,99)	1:23:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD2	8	0.66
(1,87)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG2	8	0.66
(1,87)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG2	9	0.66
(1,65)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD3	1	0.66
(1,48)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG2	4	0.66
(3,514)	1:7:A:LEU:HD21	1:10:A:GLN:HB2	10	0.65
(3,514)	1:7:A:LEU:HD22	1:10:A:GLN:HB2	10	0.65
(3,514)	1:7:A:LEU:HD23	1:10:A:GLN:HB2	10	0.65
(3,507)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	9	0.65
(3,507)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	9	0.65
(3,507)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	9	0.65
(3,507)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG21	9	0.65
(3,507)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG22	9	0.65
(3,507)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG23	9	0.65
(3,506)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	9	0.65
(3,506)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	9	0.65
(3,506)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	9	0.65
(3,391)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:H	2	0.65
(3,391)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:H	2	0.65
(3,391)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:H	2	0.65
(3,291)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB3	8	0.65
(3,291)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB3	8	0.65
(3,291)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB3	10	0.65
(3,291)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB3	10	0.65
(3,289)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HE3	2	0.65
(3,289)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HE3	4	0.65
(3,289)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HE3	7	0.65
(3,289)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HE3	8	0.65
(3,245)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	1	0.65
(3,245)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	1	0.65

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,245)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	1	0.65
(3,245)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	6	0.65
(3,245)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	6	0.65
(3,245)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	6	0.65
(3,245)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	9	0.65
(3,245)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	9	0.65
(3,245)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	9	0.65
(3,245)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	10	0.65
(3,245)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	10	0.65
(3,245)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	10	0.65
(2,543)	1:7:A:LEU:HD21	1:10:A:GLN:HB2	10	0.65
(2,543)	1:7:A:LEU:HD22	1:10:A:GLN:HB2	10	0.65
(2,543)	1:7:A:LEU:HD23	1:10:A:GLN:HB2	10	0.65
(2,535)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	9	0.65
(2,535)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	9	0.65
(2,535)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	9	0.65
(2,535)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG21	9	0.65
(2,535)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG22	9	0.65
(2,535)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG23	9	0.65
(2,534)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	9	0.65
(2,534)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	9	0.65
(2,534)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	9	0.65
(2,411)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:H	2	0.65
(2,411)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:H	2	0.65
(2,411)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:H	2	0.65
(2,303)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB3	8	0.65
(2,303)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB3	8	0.65
(2,303)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB3	10	0.65
(2,303)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB3	10	0.65
(2,301)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HE3	2	0.65
(2,301)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HE3	4	0.65
(2,301)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HE3	7	0.65
(2,301)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HE3	8	0.65
(2,256)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	1	0.65
(2,256)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	1	0.65
(2,256)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	1	0.65
(2,256)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	6	0.65
(2,256)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	6	0.65
(2,256)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	6	0.65
(2,256)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	9	0.65
(2,256)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	9	0.65
(2,256)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	9	0.65

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,256)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	10	0.65
(2,256)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	10	0.65
(2,256)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	10	0.65
(1,632)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HD2	1	0.65
(1,632)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HD2	1	0.65
(1,632)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HD2	1	0.65
(1,632)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HD3	1	0.65
(1,632)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HD3	1	0.65
(1,632)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HD3	1	0.65
(1,631)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HG3	3	0.65
(1,631)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HG3	3	0.65
(1,631)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HG3	3	0.65
(1,606)	1:3:A:GLU:HA	1:6:A:ARG:HB2	7	0.65
(1,606)	1:3:A:GLU:HA	1:6:A:ARG:HB2	9	0.65
(1,598)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD21	5	0.65
(1,598)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD22	5	0.65
(1,598)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD23	5	0.65
(1,511)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HB2	3	0.65
(1,488)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HD2	1	0.65
(1,331)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HG3	6	0.65
(1,324)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HD2	4	0.65
(1,324)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HD2	4	0.65
(1,324)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HD2	5	0.65
(1,324)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HD2	5	0.65
(1,324)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HD2	10	0.65
(1,324)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HD2	10	0.65
(4,27)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:HA	6	0.64
(4,6)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	3	0.64
(4,6)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	3	0.64
(3,514)	1:7:A:LEU:HD21	1:10:A:GLN:HB2	8	0.64
(3,514)	1:7:A:LEU:HD22	1:10:A:GLN:HB2	8	0.64
(3,514)	1:7:A:LEU:HD23	1:10:A:GLN:HB2	8	0.64
(3,514)	1:7:A:LEU:HD21	1:10:A:GLN:HB2	9	0.64
(3,514)	1:7:A:LEU:HD22	1:10:A:GLN:HB2	9	0.64
(3,514)	1:7:A:LEU:HD23	1:10:A:GLN:HB2	9	0.64
(3,510)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HB2	1	0.64
(3,510)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HB2	1	0.64
(3,510)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HB2	1	0.64
(3,245)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	2	0.64
(3,245)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	2	0.64
(3,245)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	2	0.64
(3,245)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	3	0.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,245)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	3	0.64
(3,245)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	3	0.64
(3,245)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	4	0.64
(3,245)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	4	0.64
(3,245)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	4	0.64
(3,245)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	5	0.64
(3,245)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	5	0.64
(3,245)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	5	0.64
(2,543)	1:7:A:LEU:HD21	1:10:A:GLN:HB2	8	0.64
(2,543)	1:7:A:LEU:HD22	1:10:A:GLN:HB2	8	0.64
(2,543)	1:7:A:LEU:HD23	1:10:A:GLN:HB2	8	0.64
(2,543)	1:7:A:LEU:HD21	1:10:A:GLN:HB2	9	0.64
(2,543)	1:7:A:LEU:HD22	1:10:A:GLN:HB2	9	0.64
(2,543)	1:7:A:LEU:HD23	1:10:A:GLN:HB2	9	0.64
(2,538)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HB2	1	0.64
(2,538)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HB2	1	0.64
(2,538)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HB2	1	0.64
(2,486)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:HA	6	0.64
(2,256)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	2	0.64
(2,256)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	2	0.64
(2,256)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	2	0.64
(2,256)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	3	0.64
(2,256)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	3	0.64
(2,256)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	3	0.64
(2,256)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	4	0.64
(2,256)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	4	0.64
(2,256)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	4	0.64
(2,256)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	5	0.64
(2,256)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	5	0.64
(2,256)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	5	0.64
(2,145)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	3	0.64
(2,145)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	3	0.64
(1,606)	1:3:A:GLU:HA	1:6:A:ARG:HB2	1	0.64
(1,606)	1:3:A:GLU:HA	1:6:A:ARG:HB2	2	0.64
(1,606)	1:3:A:GLU:HA	1:6:A:ARG:HB2	10	0.64
(1,600)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HG3	7	0.64
(1,583)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HE21	9	0.64
(1,499)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HD3	6	0.64
(1,474)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:H	9	0.64
(1,87)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG2	3	0.64
(1,87)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG2	10	0.64
(1,38)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HG2	8	0.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,6)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	5	0.63
(4,6)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	5	0.63
(4,6)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	9	0.63
(4,6)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	9	0.63
(3,587)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HG2	2	0.63
(3,587)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HG2	2	0.63
(3,510)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HB2	2	0.63
(3,510)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HB2	2	0.63
(3,510)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HB2	2	0.63
(3,225)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HG3	7	0.63
(2,625)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HG2	2	0.63
(2,625)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HG2	2	0.63
(2,538)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HB2	2	0.63
(2,538)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HB2	2	0.63
(2,538)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HB2	2	0.63
(2,235)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HG3	7	0.63
(2,145)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	5	0.63
(2,145)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	5	0.63
(2,145)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	9	0.63
(2,145)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	9	0.63
(1,606)	1:3:A:GLU:HA	1:6:A:ARG:HB2	3	0.63
(1,603)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG3	10	0.63
(1,548)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG12	10	0.63
(1,548)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG12	10	0.63
(1,548)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG12	10	0.63
(1,544)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG13	4	0.63
(1,544)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG13	4	0.63
(1,544)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG13	4	0.63
(1,369)	1:3:A:GLU:H	1:4:A:ALA:H	5	0.63
(1,331)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HG3	1	0.63
(1,331)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HG3	10	0.63
(1,152)	1:6:A:ARG:HD3	1:6:A:ARG:HE	7	0.63
(3,579)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HA	6	0.62
(3,514)	1:7:A:LEU:HD21	1:10:A:GLN:HB2	6	0.62
(3,514)	1:7:A:LEU:HD22	1:10:A:GLN:HB2	6	0.62
(3,514)	1:7:A:LEU:HD23	1:10:A:GLN:HB2	6	0.62
(2,615)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HA	6	0.62
(2,543)	1:7:A:LEU:HD21	1:10:A:GLN:HB2	6	0.62
(2,543)	1:7:A:LEU:HD22	1:10:A:GLN:HB2	6	0.62
(2,543)	1:7:A:LEU:HD23	1:10:A:GLN:HB2	6	0.62
(1,632)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HD2	3	0.62
(1,632)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HD2	3	0.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,632)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HD2	3	0.62
(1,632)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HD3	3	0.62
(1,632)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HD3	3	0.62
(1,632)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HD3	3	0.62
(1,628)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	4	0.62
(1,628)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	4	0.62
(1,628)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	4	0.62
(1,606)	1:3:A:GLU:HA	1:6:A:ARG:HB2	8	0.62
(1,603)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG3	6	0.62
(1,603)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG3	7	0.62
(1,583)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HE21	10	0.62
(1,548)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG12	9	0.62
(1,548)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG12	9	0.62
(1,548)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG12	9	0.62
(1,324)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HD2	2	0.62
(1,324)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HD2	2	0.62
(1,152)	1:6:A:ARG:HD3	1:6:A:ARG:HE	9	0.62
(1,87)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG2	1	0.62
(1,87)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG2	5	0.62
(1,65)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD3	8	0.62
(1,54)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HD3	10	0.62
(3,587)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HG2	3	0.61
(3,587)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HG2	3	0.61
(3,579)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HA	10	0.61
(3,510)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HB2	4	0.61
(3,510)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HB2	4	0.61
(3,510)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HB2	4	0.61
(3,391)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:H	1	0.61
(3,391)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:H	1	0.61
(3,391)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:H	1	0.61
(3,307)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	1	0.61
(3,307)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	5	0.61
(2,625)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HG2	3	0.61
(2,625)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HG2	3	0.61
(2,615)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HA	10	0.61
(2,538)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HB2	4	0.61
(2,538)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HB2	4	0.61
(2,538)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HB2	4	0.61
(2,411)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:H	1	0.61
(2,411)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:H	1	0.61
(2,411)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:H	1	0.61
(2,321)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	1	0.61

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,321)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	5	0.61
(1,657)	1:10:A:GLN:HG2	1:14:A:GLU:HG2	5	0.61
(1,606)	1:3:A:GLU:HA	1:6:A:ARG:HB2	4	0.61
(1,606)	1:3:A:GLU:HA	1:6:A:ARG:HB2	6	0.61
(1,598)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD21	1	0.61
(1,598)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD22	1	0.61
(1,598)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD23	1	0.61
(1,543)	1:7:A:LEU:HD21	1:10:A:GLN:HB2	5	0.61
(1,543)	1:7:A:LEU:HD22	1:10:A:GLN:HB2	5	0.61
(1,543)	1:7:A:LEU:HD23	1:10:A:GLN:HB2	5	0.61
(1,543)	1:7:A:LEU:HD21	1:10:A:GLN:HB3	5	0.61
(1,543)	1:7:A:LEU:HD22	1:10:A:GLN:HB3	5	0.61
(1,543)	1:7:A:LEU:HD23	1:10:A:GLN:HB3	5	0.61
(1,511)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HB2	10	0.61
(1,488)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HD2	7	0.61
(1,474)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:H	5	0.61
(1,379)	1:15:A:GLY:H	1:16:A:GLY:H	9	0.61
(1,359)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HG3	8	0.61
(1,87)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG2	2	0.61
(1,87)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG2	4	0.61
(1,55)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HD2	3	0.61
(1,54)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HD3	1	0.61
(4,37)	1:8:A:TYR:HB2	1:24:A:PRO:HB3	9	0.6
(4,12)	1:3:A:GLU:H	1:3:A:GLU:HG2	6	0.6
(4,12)	1:3:A:GLU:H	1:3:A:GLU:HG3	6	0.6
(4,6)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	10	0.6
(4,6)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	10	0.6
(3,590)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	7	0.6
(3,590)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	7	0.6
(3,590)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	7	0.6
(3,579)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HA	1	0.6
(3,579)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HA	2	0.6
(3,579)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HA	4	0.6
(3,579)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HA	5	0.6
(3,507)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	2	0.6
(3,507)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	2	0.6
(3,507)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	2	0.6
(3,507)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG21	2	0.6
(3,507)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG22	2	0.6
(3,507)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG23	2	0.6
(3,499)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	1	0.6
(3,499)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	1	0.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,499)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	1	0.6
(3,499)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	4	0.6
(3,499)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	4	0.6
(3,499)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	4	0.6
(3,465)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HD2	1	0.6
(3,391)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:H	3	0.6
(3,391)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:H	3	0.6
(3,391)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:H	3	0.6
(3,347)	1:11:A:TRP:HE1	1:19:A:SER:HB2	2	0.6
(3,307)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	2	0.6
(3,307)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	3	0.6
(3,307)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	4	0.6
(3,307)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	6	0.6
(3,307)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	9	0.6
(3,307)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	10	0.6
(3,225)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HG3	8	0.6
(2,628)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	7	0.6
(2,628)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	7	0.6
(2,628)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	7	0.6
(2,617)	1:8:A:TYR:HB2	1:24:A:PRO:HB3	9	0.6
(2,615)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HA	1	0.6
(2,615)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HA	2	0.6
(2,615)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HA	4	0.6
(2,615)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HA	5	0.6
(2,535)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	2	0.6
(2,535)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	2	0.6
(2,535)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	2	0.6
(2,535)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG21	2	0.6
(2,535)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG22	2	0.6
(2,535)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG23	2	0.6
(2,527)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	1	0.6
(2,527)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	1	0.6
(2,527)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	1	0.6
(2,527)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	4	0.6
(2,527)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	4	0.6
(2,527)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	4	0.6
(2,492)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HD2	1	0.6
(2,411)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:H	3	0.6
(2,411)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:H	3	0.6
(2,411)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:H	3	0.6
(2,364)	1:11:A:TRP:HE1	1:19:A:SER:HB2	2	0.6
(2,321)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	2	0.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,321)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	3	0.6
(2,321)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	4	0.6
(2,321)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	6	0.6
(2,321)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	9	0.6
(2,321)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	10	0.6
(2,268)	1:3:A:GLU:H	1:3:A:GLU:HG2	6	0.6
(2,268)	1:3:A:GLU:H	1:3:A:GLU:HG3	6	0.6
(2,235)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HG3	8	0.6
(2,145)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	10	0.6
(2,145)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	10	0.6
(1,603)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG3	8	0.6
(1,603)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG3	9	0.6
(1,586)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:H	9	0.6
(1,543)	1:7:A:LEU:HD21	1:10:A:GLN:HB2	1	0.6
(1,543)	1:7:A:LEU:HD22	1:10:A:GLN:HB2	1	0.6
(1,543)	1:7:A:LEU:HD23	1:10:A:GLN:HB2	1	0.6
(1,543)	1:7:A:LEU:HD21	1:10:A:GLN:HB3	1	0.6
(1,543)	1:7:A:LEU:HD22	1:10:A:GLN:HB3	1	0.6
(1,543)	1:7:A:LEU:HD23	1:10:A:GLN:HB3	1	0.6
(1,543)	1:7:A:LEU:HD21	1:10:A:GLN:HB2	2	0.6
(1,543)	1:7:A:LEU:HD22	1:10:A:GLN:HB2	2	0.6
(1,543)	1:7:A:LEU:HD23	1:10:A:GLN:HB2	2	0.6
(1,543)	1:7:A:LEU:HD21	1:10:A:GLN:HB3	2	0.6
(1,543)	1:7:A:LEU:HD22	1:10:A:GLN:HB3	2	0.6
(1,543)	1:7:A:LEU:HD23	1:10:A:GLN:HB3	2	0.6
(1,519)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD11	1	0.6
(1,519)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD12	1	0.6
(1,519)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD13	1	0.6
(1,511)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HB2	8	0.6
(1,499)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HD3	10	0.6
(1,369)	1:3:A:GLU:H	1:4:A:ALA:H	10	0.6
(1,324)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HD2	6	0.6
(1,324)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HD2	6	0.6
(1,302)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG2	9	0.6
(1,302)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG2	9	0.6
(1,149)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HE	4	0.6
(1,120)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	7	0.6
(1,120)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	7	0.6
(1,120)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	7	0.6
(1,87)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG2	7	0.6
(1,65)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD3	7	0.6
(4,6)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	6	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,6)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	6	0.59
(4,6)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	7	0.59
(4,6)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	7	0.59
(4,6)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	8	0.59
(4,6)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	8	0.59
(3,579)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HA	3	0.59
(3,579)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HA	7	0.59
(3,579)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HA	8	0.59
(3,507)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	4	0.59
(3,507)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	4	0.59
(3,507)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	4	0.59
(3,507)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG21	4	0.59
(3,507)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG22	4	0.59
(3,507)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG23	4	0.59
(3,465)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HD2	7	0.59
(3,391)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:H	9	0.59
(3,391)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:H	9	0.59
(3,391)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:H	9	0.59
(3,307)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	7	0.59
(3,307)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	8	0.59
(2,615)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HA	3	0.59
(2,615)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HA	7	0.59
(2,615)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HA	8	0.59
(2,535)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	4	0.59
(2,535)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	4	0.59
(2,535)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	4	0.59
(2,535)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG21	4	0.59
(2,535)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG22	4	0.59
(2,535)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG23	4	0.59
(2,492)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HD2	7	0.59
(2,411)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:H	9	0.59
(2,411)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:H	9	0.59
(2,411)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:H	9	0.59
(2,321)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	7	0.59
(2,321)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	8	0.59
(2,145)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	6	0.59
(2,145)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	6	0.59
(2,145)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	7	0.59
(2,145)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	7	0.59
(2,145)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	8	0.59
(2,145)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	8	0.59
(1,603)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG3	3	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,379)	1:15:A:GLY:H	1:16:A:GLY:H	6	0.59
(1,379)	1:15:A:GLY:H	1:16:A:GLY:H	10	0.59
(1,317)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB2	1	0.59
(1,317)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB2	1	0.59
(1,91)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HB3	9	0.59
(1,65)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD3	6	0.59
(4,4)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB2	9	0.58
(3,587)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HG2	10	0.58
(3,587)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HG2	10	0.58
(3,515)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG13	2	0.58
(3,515)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG13	2	0.58
(3,515)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG13	2	0.58
(3,391)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:H	6	0.58
(3,391)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:H	6	0.58
(3,391)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:H	6	0.58
(2,625)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HG2	10	0.58
(2,625)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HG2	10	0.58
(2,544)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG13	2	0.58
(2,544)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG13	2	0.58
(2,544)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG13	2	0.58
(2,411)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:H	6	0.58
(2,411)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:H	6	0.58
(2,411)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:H	6	0.58
(2,136)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB2	9	0.58
(1,583)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HE21	8	0.58
(1,528)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB3	1	0.58
(1,528)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB3	1	0.58
(1,528)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB3	1	0.58
(1,528)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HB3	1	0.58
(1,528)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HB3	1	0.58
(1,528)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HB3	1	0.58
(1,519)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD11	2	0.58
(1,519)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD12	2	0.58
(1,519)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD13	2	0.58
(1,91)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HB3	6	0.58
(1,88)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG3	7	0.58
(1,65)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD3	2	0.58
(1,55)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HD2	4	0.58
(1,51)	1:6:A:ARG:HD2	1:6:A:ARG:HG3	6	0.58
(4,29)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HB2	1	0.57
(4,29)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HB2	1	0.57
(4,29)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HB2	1	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,29)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HB3	1	0.57
(4,29)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HB3	1	0.57
(4,29)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HB3	1	0.57
(4,29)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HB2	5	0.57
(4,29)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HB2	5	0.57
(4,29)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HB2	5	0.57
(4,29)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HB3	5	0.57
(4,29)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HB3	5	0.57
(4,29)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HB3	5	0.57
(4,12)	1:3:A:GLU:H	1:3:A:GLU:HG2	4	0.57
(4,12)	1:3:A:GLU:H	1:3:A:GLU:HG3	4	0.57
(4,6)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	1	0.57
(4,6)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	1	0.57
(4,6)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	2	0.57
(4,6)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	2	0.57
(4,6)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	4	0.57
(4,6)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	4	0.57
(3,391)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:H	10	0.57
(3,391)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:H	10	0.57
(3,391)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:H	10	0.57
(2,542)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HB2	1	0.57
(2,542)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HB2	1	0.57
(2,542)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HB2	1	0.57
(2,542)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HB3	1	0.57
(2,542)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HB3	1	0.57
(2,542)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HB3	1	0.57
(2,542)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HB2	5	0.57
(2,542)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HB2	5	0.57
(2,542)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HB2	5	0.57
(2,542)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HB3	5	0.57
(2,542)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HB3	5	0.57
(2,542)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HB3	5	0.57
(2,411)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:H	10	0.57
(2,411)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:H	10	0.57
(2,411)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:H	10	0.57
(2,268)	1:3:A:GLU:H	1:3:A:GLU:HG2	4	0.57
(2,268)	1:3:A:GLU:H	1:3:A:GLU:HG3	4	0.57
(2,145)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	1	0.57
(2,145)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	1	0.57
(2,145)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	2	0.57
(2,145)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	2	0.57
(2,145)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	4	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,145)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	4	0.57
(1,606)	1:3:A:GLU:HA	1:6:A:ARG:HB2	5	0.57
(1,602)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG2	6	0.57
(1,586)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:H	6	0.57
(1,548)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG12	3	0.57
(1,548)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG12	3	0.57
(1,548)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG12	3	0.57
(1,519)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD11	7	0.57
(1,519)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD12	7	0.57
(1,519)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD13	7	0.57
(1,317)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB2	4	0.57
(1,317)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB2	4	0.57
(1,297)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HD1	9	0.57
(1,297)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HD2	9	0.57
(1,293)	1:10:A:GLN:HE21	1:14:A:GLU:HG3	8	0.57
(1,262)	1:3:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HG2	4	0.57
(1,262)	1:3:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HG3	4	0.57
(1,152)	1:6:A:ARG:HD3	1:6:A:ARG:HE	2	0.57
(1,91)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HB3	8	0.57
(1,88)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG3	1	0.57
(1,88)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG3	2	0.57
(1,88)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG3	4	0.57
(1,88)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG3	5	0.57
(1,65)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD3	10	0.57
(3,591)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG2	3	0.56
(3,576)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HG	6	0.56
(3,515)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG13	10	0.56
(3,515)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG13	10	0.56
(3,515)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG13	10	0.56
(3,291)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB3	3	0.56
(3,291)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB3	3	0.56
(2,629)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG2	3	0.56
(2,612)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HG	6	0.56
(2,544)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG13	10	0.56
(2,544)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG13	10	0.56
(2,544)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG13	10	0.56
(2,303)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB3	3	0.56
(2,303)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB3	3	0.56
(1,632)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HD2	9	0.56
(1,632)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HD2	9	0.56
(1,632)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HD2	9	0.56
(1,632)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HD3	9	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,632)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HD3	9	0.56
(1,632)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HD3	9	0.56
(1,602)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG2	9	0.56
(1,528)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB3	2	0.56
(1,528)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB3	2	0.56
(1,528)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB3	2	0.56
(1,528)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HB3	2	0.56
(1,528)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HB3	2	0.56
(1,528)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HB3	2	0.56
(1,519)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD11	4	0.56
(1,519)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD12	4	0.56
(1,519)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD13	4	0.56
(1,519)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD11	5	0.56
(1,519)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD12	5	0.56
(1,519)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD13	5	0.56
(1,499)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HD3	3	0.56
(1,331)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HG3	2	0.56
(1,219)	1:13:A:LYS:HE2	1:13:A:LYS:HG2	5	0.56
(1,215)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HG2	10	0.56
(1,152)	1:6:A:ARG:HD3	1:6:A:ARG:HE	4	0.56
(1,91)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HB3	3	0.56
(1,91)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HB3	10	0.56
(1,88)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG3	10	0.56
(1,65)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD3	4	0.56
(1,65)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD3	9	0.56
(4,29)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HB2	2	0.55
(4,29)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HB2	2	0.55
(4,29)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HB2	2	0.55
(4,29)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HB3	2	0.55
(4,29)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HB3	2	0.55
(4,29)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HB3	2	0.55
(4,12)	1:3:A:GLU:H	1:3:A:GLU:HG2	10	0.55
(4,12)	1:3:A:GLU:H	1:3:A:GLU:HG3	10	0.55
(4,4)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB2	6	0.55
(3,591)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG2	1	0.55
(3,591)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG2	2	0.55
(3,591)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG2	4	0.55
(3,591)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG2	6	0.55
(3,591)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG2	9	0.55
(3,591)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG2	10	0.55
(3,579)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HA	9	0.55
(3,523)	1:2:A:GLU:HB2	1:3:A:GLU:HA	1	0.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,515)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG13	1	0.55
(3,515)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG13	1	0.55
(3,515)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG13	1	0.55
(3,465)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HD2	8	0.55
(2,629)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG2	1	0.55
(2,629)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG2	2	0.55
(2,629)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG2	4	0.55
(2,629)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG2	6	0.55
(2,629)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG2	9	0.55
(2,629)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG2	10	0.55
(2,615)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HA	9	0.55
(2,553)	1:2:A:GLU:HB2	1:3:A:GLU:HA	1	0.55
(2,544)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG13	1	0.55
(2,544)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG13	1	0.55
(2,544)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG13	1	0.55
(2,542)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HB2	2	0.55
(2,542)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HB2	2	0.55
(2,542)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HB2	2	0.55
(2,542)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HB3	2	0.55
(2,542)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HB3	2	0.55
(2,542)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HB3	2	0.55
(2,492)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HD2	8	0.55
(2,268)	1:3:A:GLU:H	1:3:A:GLU:HG2	10	0.55
(2,268)	1:3:A:GLU:H	1:3:A:GLU:HG3	10	0.55
(2,136)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB2	6	0.55
(1,531)	1:16:A:GLY:HA2	1:16:A:GLY:HA3	1	0.55
(1,531)	1:16:A:GLY:HA2	1:16:A:GLY:HA3	2	0.55
(1,531)	1:16:A:GLY:HA2	1:16:A:GLY:HA3	3	0.55
(1,531)	1:16:A:GLY:HA2	1:16:A:GLY:HA3	4	0.55
(1,531)	1:16:A:GLY:HA2	1:16:A:GLY:HA3	5	0.55
(1,531)	1:16:A:GLY:HA2	1:16:A:GLY:HA3	6	0.55
(1,531)	1:16:A:GLY:HA2	1:16:A:GLY:HA3	7	0.55
(1,531)	1:16:A:GLY:HA2	1:16:A:GLY:HA3	8	0.55
(1,531)	1:16:A:GLY:HA2	1:16:A:GLY:HA3	9	0.55
(1,531)	1:16:A:GLY:HA2	1:16:A:GLY:HA3	10	0.55
(1,520)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD11	4	0.55
(1,520)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD12	4	0.55
(1,520)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD13	4	0.55
(1,490)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB2	4	0.55
(1,474)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:H	10	0.55
(1,384)	1:19:A:SER:H	1:20:A:GLY:H	5	0.55
(1,262)	1:3:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HG2	2	0.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,262)	1:3:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HG3	2	0.55
(1,171)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG13	5	0.55
(1,91)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HB3	1	0.55
(1,91)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HB3	2	0.55
(1,91)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HB3	4	0.55
(1,91)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HB3	5	0.55
(1,88)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG3	3	0.55
(1,88)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG3	8	0.55
(4,12)	1:3:A:GLU:H	1:3:A:GLU:HG2	2	0.54
(4,12)	1:3:A:GLU:H	1:3:A:GLU:HG3	2	0.54
(4,12)	1:3:A:GLU:H	1:3:A:GLU:HG2	3	0.54
(4,12)	1:3:A:GLU:H	1:3:A:GLU:HG3	3	0.54
(4,12)	1:3:A:GLU:H	1:3:A:GLU:HG2	9	0.54
(4,12)	1:3:A:GLU:H	1:3:A:GLU:HG3	9	0.54
(4,4)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB2	10	0.54
(3,576)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HG	9	0.54
(3,347)	1:11:A:TRP:HE1	1:19:A:SER:HB2	3	0.54
(2,612)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HG	9	0.54
(2,364)	1:11:A:TRP:HE1	1:19:A:SER:HB2	3	0.54
(2,268)	1:3:A:GLU:H	1:3:A:GLU:HG2	2	0.54
(2,268)	1:3:A:GLU:H	1:3:A:GLU:HG3	2	0.54
(2,268)	1:3:A:GLU:H	1:3:A:GLU:HG2	3	0.54
(2,268)	1:3:A:GLU:H	1:3:A:GLU:HG3	3	0.54
(2,268)	1:3:A:GLU:H	1:3:A:GLU:HG2	9	0.54
(2,268)	1:3:A:GLU:H	1:3:A:GLU:HG3	9	0.54
(2,136)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB2	10	0.54
(1,613)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HG3	6	0.54
(1,590)	1:2:A:GLU:HB2	1:5:A:VAL:H	1	0.54
(1,499)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HD3	8	0.54
(1,369)	1:3:A:GLU:H	1:4:A:ALA:H	2	0.54
(1,369)	1:3:A:GLU:H	1:4:A:ALA:H	3	0.54
(1,346)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	5	0.54
(1,219)	1:13:A:LYS:HE2	1:13:A:LYS:HG2	4	0.54
(1,171)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG13	1	0.54
(1,171)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG13	2	0.54
(1,171)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG13	4	0.54
(1,91)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HB3	7	0.54
(1,55)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HD2	7	0.54
(1,48)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG2	3	0.54
(3,465)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HD2	2	0.53
(3,465)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HD2	9	0.53
(2,492)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HD2	2	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,492)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HD2	9	0.53
(1,643)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB3	7	0.53
(1,632)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HD2	8	0.53
(1,632)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HD2	8	0.53
(1,632)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HD2	8	0.53
(1,632)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HD3	8	0.53
(1,632)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HD3	8	0.53
(1,632)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HD3	8	0.53
(1,602)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG2	10	0.53
(1,586)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:H	8	0.53
(1,586)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:H	10	0.53
(1,538)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HB2	8	0.53
(1,538)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HB2	8	0.53
(1,538)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HB2	8	0.53
(1,474)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:H	8	0.53
(1,346)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	4	0.53
(1,290)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HB2	6	0.53
(1,290)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HB3	6	0.53
(1,219)	1:13:A:LYS:HE2	1:13:A:LYS:HG2	2	0.53
(1,215)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HG2	5	0.53
(1,88)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG3	6	0.53
(1,88)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG3	9	0.53
(1,65)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD3	3	0.53
(1,48)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG2	1	0.53
(4,12)	1:3:A:GLU:H	1:3:A:GLU:HG2	7	0.52
(4,12)	1:3:A:GLU:H	1:3:A:GLU:HG3	7	0.52
(4,12)	1:3:A:GLU:H	1:3:A:GLU:HG2	8	0.52
(4,12)	1:3:A:GLU:H	1:3:A:GLU:HG3	8	0.52
(3,591)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG2	5	0.52
(3,576)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HG	10	0.52
(3,523)	1:2:A:GLU:HB2	1:3:A:GLU:HA	3	0.52
(3,515)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG13	3	0.52
(3,515)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG13	3	0.52
(3,515)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG13	3	0.52
(3,465)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HD2	4	0.52
(3,465)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HD2	10	0.52
(3,443)	1:23:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	1	0.52
(3,411)	1:19:A:SER:H	1:20:A:GLY:HA3	7	0.52
(3,141)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HG2	3	0.52
(3,127)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD11	6	0.52
(3,127)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD12	6	0.52
(3,127)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD13	6	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,127)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD11	10	0.52
(3,127)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD12	10	0.52
(3,127)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD13	10	0.52
(2,629)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG2	5	0.52
(2,612)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HG	10	0.52
(2,553)	1:2:A:GLU:HB2	1:3:A:GLU:HA	3	0.52
(2,544)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG13	3	0.52
(2,544)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG13	3	0.52
(2,544)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG13	3	0.52
(2,492)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HD2	4	0.52
(2,492)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HD2	10	0.52
(2,469)	1:23:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	1	0.52
(2,431)	1:19:A:SER:H	1:20:A:GLY:HA3	7	0.52
(2,268)	1:3:A:GLU:H	1:3:A:GLU:HG2	7	0.52
(2,268)	1:3:A:GLU:H	1:3:A:GLU:HG3	7	0.52
(2,268)	1:3:A:GLU:H	1:3:A:GLU:HG2	8	0.52
(2,268)	1:3:A:GLU:H	1:3:A:GLU:HG3	8	0.52
(2,148)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HG2	3	0.52
(2,130)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD11	6	0.52
(2,130)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD12	6	0.52
(2,130)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD13	6	0.52
(2,130)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD11	10	0.52
(2,130)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD12	10	0.52
(2,130)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD13	10	0.52
(1,601)	1:3:A:GLU:HA	1:6:A:ARG:HG2	8	0.52
(1,586)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:H	3	0.52
(1,548)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG12	6	0.52
(1,548)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG12	6	0.52
(1,548)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG12	6	0.52
(1,379)	1:15:A:GLY:H	1:16:A:GLY:H	5	0.52
(1,369)	1:3:A:GLU:H	1:4:A:ALA:H	8	0.52
(1,369)	1:3:A:GLU:H	1:4:A:ALA:H	9	0.52
(1,346)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	1	0.52
(1,316)	1:8:A:TYR:HD1	1:23:A:PRO:HB2	5	0.52
(1,316)	1:8:A:TYR:HD2	1:23:A:PRO:HB2	5	0.52
(1,302)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG2	3	0.52
(1,302)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG2	3	0.52
(1,233)	1:14:A:GLU:H	1:14:A:GLU:HG2	5	0.52
(1,171)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG13	6	0.52
(1,48)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG2	2	0.52
(4,42)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HB2	7	0.51
(4,12)	1:3:A:GLU:H	1:3:A:GLU:HG2	1	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,12)	1:3:A:GLU:H	1:3:A:GLU:HG3	1	0.51
(4,12)	1:3:A:GLU:H	1:3:A:GLU:HG2	5	0.51
(4,12)	1:3:A:GLU:H	1:3:A:GLU:HG3	5	0.51
(3,576)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HG	8	0.51
(3,548)	1:19:A:SER:HB2	1:20:A:GLY:H	10	0.51
(3,539)	1:2:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:H	1	0.51
(3,523)	1:2:A:GLU:HB2	1:3:A:GLU:HA	5	0.51
(3,523)	1:2:A:GLU:HB2	1:3:A:GLU:HA	8	0.51
(3,523)	1:2:A:GLU:HB2	1:3:A:GLU:HA	9	0.51
(3,506)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	10	0.51
(3,506)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	10	0.51
(3,506)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	10	0.51
(3,465)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HD2	6	0.51
(3,143)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HB3	6	0.51
(3,127)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD11	3	0.51
(3,127)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD12	3	0.51
(3,127)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD13	3	0.51
(3,127)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD11	8	0.51
(3,127)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD12	8	0.51
(3,127)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD13	8	0.51
(2,653)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HB2	7	0.51
(2,612)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HG	8	0.51
(2,581)	1:19:A:SER:HB2	1:20:A:GLY:H	10	0.51
(2,572)	1:2:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:H	1	0.51
(2,553)	1:2:A:GLU:HB2	1:3:A:GLU:HA	5	0.51
(2,553)	1:2:A:GLU:HB2	1:3:A:GLU:HA	8	0.51
(2,553)	1:2:A:GLU:HB2	1:3:A:GLU:HA	9	0.51
(2,534)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	10	0.51
(2,534)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	10	0.51
(2,534)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	10	0.51
(2,492)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HD2	6	0.51
(2,268)	1:3:A:GLU:H	1:3:A:GLU:HG2	1	0.51
(2,268)	1:3:A:GLU:H	1:3:A:GLU:HG3	1	0.51
(2,268)	1:3:A:GLU:H	1:3:A:GLU:HG2	5	0.51
(2,268)	1:3:A:GLU:H	1:3:A:GLU:HG3	5	0.51
(2,150)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HB3	6	0.51
(2,130)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD11	3	0.51
(2,130)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD12	3	0.51
(2,130)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD13	3	0.51
(2,130)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD11	8	0.51
(2,130)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD12	8	0.51
(2,130)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD13	8	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,613)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HG3	8	0.51
(1,538)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HB2	3	0.51
(1,538)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HB2	3	0.51
(1,538)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HB2	3	0.51
(1,493)	1:21:A:ARG:HB2	1:22:A:PRO:HD2	5	0.51
(1,493)	1:21:A:ARG:HB3	1:22:A:PRO:HD2	5	0.51
(1,490)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB2	1	0.51
(1,474)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:H	7	0.51
(1,468)	1:24:A:PRO:HG2	1:25:A:SER:H	10	0.51
(1,369)	1:3:A:GLU:H	1:4:A:ALA:H	1	0.51
(1,369)	1:3:A:GLU:H	1:4:A:ALA:H	7	0.51
(1,346)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	2	0.51
(1,317)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB2	7	0.51
(1,317)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB2	7	0.51
(1,316)	1:8:A:TYR:HD1	1:23:A:PRO:HB2	1	0.51
(1,316)	1:8:A:TYR:HD2	1:23:A:PRO:HB2	1	0.51
(1,262)	1:3:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HG2	1	0.51
(1,262)	1:3:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HG3	1	0.51
(1,262)	1:3:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HG2	3	0.51
(1,262)	1:3:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HG3	3	0.51
(1,259)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	8	0.51
(1,259)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	8	0.51
(1,259)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	8	0.51
(1,220)	1:13:A:LYS:HE2	1:13:A:LYS:HG3	7	0.51
(1,215)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HG2	1	0.51
(1,215)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HG2	4	0.51
(1,215)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HG2	8	0.51
(1,171)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG13	8	0.51
(1,171)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG13	9	0.51
(1,110)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HG2	2	0.51
(1,110)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HG2	4	0.51
(1,110)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HG2	5	0.51
(1,99)	1:23:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD2	4	0.51
(1,65)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD3	5	0.51
(4,42)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HB2	1	0.5
(4,42)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HB2	2	0.5
(4,42)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HB2	4	0.5
(4,42)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HB2	5	0.5
(4,4)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB2	3	0.5
(3,576)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HG	3	0.5
(3,576)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HG	5	0.5
(3,523)	1:2:A:GLU:HB2	1:3:A:GLU:HA	2	0.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,515)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG13	9	0.5
(3,515)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG13	9	0.5
(3,515)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG13	9	0.5
(3,465)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HD2	3	0.5
(3,127)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD11	9	0.5
(3,127)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD12	9	0.5
(3,127)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD13	9	0.5
(2,653)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HB2	1	0.5
(2,653)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HB2	2	0.5
(2,653)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HB2	4	0.5
(2,653)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HB2	5	0.5
(2,612)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HG	3	0.5
(2,612)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HG	5	0.5
(2,553)	1:2:A:GLU:HB2	1:3:A:GLU:HA	2	0.5
(2,544)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG13	9	0.5
(2,544)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG13	9	0.5
(2,544)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG13	9	0.5
(2,492)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HD2	3	0.5
(2,136)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB2	3	0.5
(2,130)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD11	9	0.5
(2,130)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD12	9	0.5
(2,130)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD13	9	0.5
(1,613)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HG3	10	0.5
(1,491)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB3	1	0.5
(1,488)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HD2	3	0.5
(1,476)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HD2	9	0.5
(1,476)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HD2	9	0.5
(1,346)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	6	0.5
(1,339)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD3	7	0.5
(1,259)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	7	0.5
(1,259)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	7	0.5
(1,259)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	7	0.5
(1,220)	1:13:A:LYS:HE2	1:13:A:LYS:HG3	6	0.5
(1,215)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HG2	3	0.5
(1,215)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HG2	6	0.5
(1,215)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HG2	7	0.5
(1,171)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG13	3	0.5
(1,171)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG13	7	0.5
(1,135)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HG	7	0.5
(1,110)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HG2	1	0.5
(1,110)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HG2	7	0.5
(1,108)	1:24:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	9	0.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,99)	1:23:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD2	2	0.5
(1,99)	1:23:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD2	5	0.5
(1,55)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HD2	8	0.5
(1,48)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG2	10	0.5
(4,29)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HB2	4	0.49
(4,29)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HB2	4	0.49
(4,29)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HB2	4	0.49
(4,29)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HB3	4	0.49
(4,29)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HB3	4	0.49
(4,29)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HB3	4	0.49
(4,19)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:H	9	0.49
(4,19)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:H	9	0.49
(3,576)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HG	1	0.49
(3,576)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HG	7	0.49
(3,523)	1:2:A:GLU:HB2	1:3:A:GLU:HA	7	0.49
(3,515)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG13	6	0.49
(3,515)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG13	6	0.49
(3,515)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG13	6	0.49
(3,411)	1:19:A:SER:H	1:20:A:GLY:HA3	6	0.49
(3,347)	1:11:A:TRP:HE1	1:19:A:SER:HB2	5	0.49
(2,612)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HG	1	0.49
(2,612)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HG	7	0.49
(2,553)	1:2:A:GLU:HB2	1:3:A:GLU:HA	7	0.49
(2,544)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG13	6	0.49
(2,544)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG13	6	0.49
(2,544)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG13	6	0.49
(2,542)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HB2	4	0.49
(2,542)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HB2	4	0.49
(2,542)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HB2	4	0.49
(2,542)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HB3	4	0.49
(2,542)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HB3	4	0.49
(2,542)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HB3	4	0.49
(2,431)	1:19:A:SER:H	1:20:A:GLY:HA3	6	0.49
(2,372)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:H	9	0.49
(2,372)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:H	9	0.49
(2,364)	1:11:A:TRP:HE1	1:19:A:SER:HB2	5	0.49
(1,590)	1:2:A:GLU:HB2	1:5:A:VAL:H	7	0.49
(1,534)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG11	4	0.49
(1,534)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG12	4	0.49
(1,534)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG13	4	0.49
(1,534)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	4	0.49
(1,534)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	4	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,534)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	4	0.49
(1,468)	1:24:A:PRO:HG2	1:25:A:SER:H	8	0.49
(1,346)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	7	0.49
(1,346)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	9	0.49
(1,297)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HD1	1	0.49
(1,297)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HD2	1	0.49
(1,259)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	9	0.49
(1,259)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	9	0.49
(1,259)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	9	0.49
(1,151)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HB2	3	0.49
(1,151)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HB2	5	0.49
(1,116)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HB2	1	0.49
(1,116)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HB3	1	0.49
(4,38)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:HA2	9	0.48
(4,38)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:HA2	9	0.48
(4,38)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:HA2	9	0.48
(4,19)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:H	5	0.48
(4,19)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:H	5	0.48
(4,4)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB2	8	0.48
(3,576)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HG	4	0.48
(3,548)	1:19:A:SER:HB2	1:20:A:GLY:H	3	0.48
(3,539)	1:2:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:H	7	0.48
(3,465)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HD2	5	0.48
(3,411)	1:19:A:SER:H	1:20:A:GLY:HA3	1	0.48
(3,411)	1:19:A:SER:H	1:20:A:GLY:HA3	2	0.48
(2,620)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:HA2	9	0.48
(2,620)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:HA2	9	0.48
(2,620)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:HA2	9	0.48
(2,612)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HG	4	0.48
(2,581)	1:19:A:SER:HB2	1:20:A:GLY:H	3	0.48
(2,572)	1:2:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:H	7	0.48
(2,492)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HD2	5	0.48
(2,431)	1:19:A:SER:H	1:20:A:GLY:HA3	1	0.48
(2,431)	1:19:A:SER:H	1:20:A:GLY:HA3	2	0.48
(2,372)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:H	5	0.48
(2,372)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:H	5	0.48
(2,136)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB2	8	0.48
(1,586)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:H	7	0.48
(1,520)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD11	5	0.48
(1,520)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD12	5	0.48
(1,520)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD13	5	0.48
(1,463)	1:24:A:PRO:HD2	1:25:A:SER:H	8	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,346)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	8	0.48
(1,339)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD3	5	0.48
(1,339)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD3	9	0.48
(1,317)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB2	2	0.48
(1,317)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB2	2	0.48
(1,259)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	3	0.48
(1,259)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	3	0.48
(1,259)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	3	0.48
(1,259)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	6	0.48
(1,259)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	6	0.48
(1,259)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	6	0.48
(1,233)	1:14:A:GLU:H	1:14:A:GLU:HG2	9	0.48
(1,215)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HG2	2	0.48
(1,171)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG13	10	0.48
(1,151)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HB2	8	0.48
(4,18)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HA	8	0.47
(4,11)	1:14:A:GLU:HB3	1:14:A:GLU:HG3	8	0.47
(3,592)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HG3	7	0.47
(3,592)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HG3	7	0.47
(3,592)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HG3	7	0.47
(3,591)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG2	7	0.47
(3,548)	1:19:A:SER:HB2	1:20:A:GLY:H	1	0.47
(3,548)	1:19:A:SER:HB2	1:20:A:GLY:H	4	0.47
(3,411)	1:19:A:SER:H	1:20:A:GLY:HA3	5	0.47
(3,347)	1:11:A:TRP:HE1	1:19:A:SER:HB2	10	0.47
(2,631)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HG3	7	0.47
(2,631)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HG3	7	0.47
(2,631)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HG3	7	0.47
(2,629)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG2	7	0.47
(2,581)	1:19:A:SER:HB2	1:20:A:GLY:H	1	0.47
(2,581)	1:19:A:SER:HB2	1:20:A:GLY:H	4	0.47
(2,431)	1:19:A:SER:H	1:20:A:GLY:HA3	5	0.47
(2,365)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HA	8	0.47
(2,364)	1:11:A:TRP:HE1	1:19:A:SER:HB2	10	0.47
(2,239)	1:14:A:GLU:HB3	1:14:A:GLU:HG3	8	0.47
(1,614)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HB2	7	0.47
(1,602)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG2	8	0.47
(1,590)	1:2:A:GLU:HB2	1:5:A:VAL:H	10	0.47
(1,488)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HD2	8	0.47
(1,468)	1:24:A:PRO:HG2	1:25:A:SER:H	7	0.47
(1,346)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	3	0.47
(1,346)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	10	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,339)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD3	2	0.47
(1,297)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HD1	2	0.47
(1,297)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HD2	2	0.47
(1,297)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HD1	3	0.47
(1,297)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HD2	3	0.47
(1,297)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HD1	4	0.47
(1,297)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HD2	4	0.47
(1,297)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HD1	5	0.47
(1,297)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HD2	5	0.47
(1,262)	1:3:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HG2	5	0.47
(1,262)	1:3:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HG3	5	0.47
(1,262)	1:3:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HG2	10	0.47
(1,262)	1:3:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HG3	10	0.47
(1,259)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	10	0.47
(1,259)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	10	0.47
(1,259)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	10	0.47
(1,233)	1:14:A:GLU:H	1:14:A:GLU:HG2	6	0.47
(1,110)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HG2	6	0.47
(1,97)	1:23:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HD2	8	0.47
(3,591)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG2	8	0.46
(3,576)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HG	2	0.46
(3,548)	1:19:A:SER:HB2	1:20:A:GLY:H	8	0.46
(3,411)	1:19:A:SER:H	1:20:A:GLY:HA3	9	0.46
(3,168)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG3	1	0.46
(3,168)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG3	5	0.46
(3,168)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG3	8	0.46
(3,168)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG3	9	0.46
(3,141)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HG2	2	0.46
(2,629)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG2	8	0.46
(2,612)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HG	2	0.46
(2,581)	1:19:A:SER:HB2	1:20:A:GLY:H	8	0.46
(2,431)	1:19:A:SER:H	1:20:A:GLY:HA3	9	0.46
(2,178)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG3	1	0.46
(2,178)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG3	5	0.46
(2,178)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG3	8	0.46
(2,178)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG3	9	0.46
(2,148)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HG2	2	0.46
(1,614)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HB2	10	0.46
(1,592)	1:11:A:TRP:HE3	1:16:A:GLY:HA3	5	0.46
(1,590)	1:2:A:GLU:HB2	1:5:A:VAL:H	2	0.46
(1,590)	1:2:A:GLU:HB2	1:5:A:VAL:H	9	0.46
(1,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG11	6	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG12	6	0.46
(1,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG13	6	0.46
(1,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG11	6	0.46
(1,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG12	6	0.46
(1,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG13	6	0.46
(1,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG11	6	0.46
(1,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG12	6	0.46
(1,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG13	6	0.46
(1,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	6	0.46
(1,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	6	0.46
(1,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	6	0.46
(1,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	6	0.46
(1,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	6	0.46
(1,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	6	0.46
(1,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	6	0.46
(1,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	6	0.46
(1,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	6	0.46
(1,496)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD2	3	0.46
(1,496)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	3	0.46
(1,488)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HD2	10	0.46
(1,486)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:HA	4	0.46
(1,473)	1:14:A:GLU:HB2	1:15:A:GLY:H	9	0.46
(1,473)	1:14:A:GLU:HB3	1:15:A:GLY:H	9	0.46
(1,423)	1:16:A:GLY:H	1:19:A:SER:HB3	5	0.46
(1,339)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD3	3	0.46
(1,339)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD3	8	0.46
(1,339)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD3	10	0.46
(1,310)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	1	0.46
(1,310)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	1	0.46
(1,310)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	1	0.46
(1,310)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	1	0.46
(1,310)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	1	0.46
(1,310)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	1	0.46
(1,310)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HD1	1	0.46
(1,310)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HD2	1	0.46
(1,310)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HD1	1	0.46
(1,310)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HD2	1	0.46
(1,310)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HD1	1	0.46
(1,310)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HD2	1	0.46
(1,272)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG3	1	0.46
(1,262)	1:3:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HG2	8	0.46
(1,262)	1:3:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HG3	8	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,262)	1:3:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HG2	9	0.46
(1,262)	1:3:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HG3	9	0.46
(1,255)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HB	4	0.46
(1,233)	1:14:A:GLU:H	1:14:A:GLU:HG2	10	0.46
(1,186)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HB2	3	0.46
(1,186)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HB2	5	0.46
(1,186)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HB2	6	0.46
(1,186)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HB2	9	0.46
(1,132)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD11	10	0.46
(1,132)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD12	10	0.46
(1,132)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD13	10	0.46
(1,110)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HG2	3	0.46
(1,110)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HG2	8	0.46
(1,110)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HG2	10	0.46
(1,55)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HD2	5	0.46
(4,41)	1:9:A:ILE:HA	1:11:A:TRP:HE3	3	0.45
(4,41)	1:9:A:ILE:HA	1:11:A:TRP:HE3	10	0.45
(3,548)	1:19:A:SER:HB2	1:20:A:GLY:H	9	0.45
(3,168)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG3	3	0.45
(3,168)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG3	6	0.45
(3,168)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG3	10	0.45
(3,143)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HB3	4	0.45
(3,143)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HB3	9	0.45
(2,638)	1:9:A:ILE:HA	1:11:A:TRP:HE3	3	0.45
(2,638)	1:9:A:ILE:HA	1:11:A:TRP:HE3	10	0.45
(2,581)	1:19:A:SER:HB2	1:20:A:GLY:H	9	0.45
(2,178)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG3	3	0.45
(2,178)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG3	6	0.45
(2,178)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG3	10	0.45
(2,150)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HB3	4	0.45
(2,150)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HB3	9	0.45
(1,632)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HD2	2	0.45
(1,632)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HD2	2	0.45
(1,632)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HD2	2	0.45
(1,632)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HD3	2	0.45
(1,632)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HD3	2	0.45
(1,632)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HD3	2	0.45
(1,614)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HB2	6	0.45
(1,602)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG2	3	0.45
(1,586)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:H	5	0.45
(1,473)	1:14:A:GLU:HB2	1:15:A:GLY:H	10	0.45
(1,473)	1:14:A:GLU:HB3	1:15:A:GLY:H	10	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,376)	1:5:A:VAL:H	1:6:A:ARG:H	8	0.45
(1,339)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD3	1	0.45
(1,339)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD3	4	0.45
(1,339)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD3	6	0.45
(1,316)	1:8:A:TYR:HD1	1:23:A:PRO:HB2	2	0.45
(1,316)	1:8:A:TYR:HD2	1:23:A:PRO:HB2	2	0.45
(1,310)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	2	0.45
(1,310)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	2	0.45
(1,310)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	2	0.45
(1,310)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	2	0.45
(1,310)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	2	0.45
(1,310)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	2	0.45
(1,310)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HD1	2	0.45
(1,310)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HD2	2	0.45
(1,310)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HD1	2	0.45
(1,310)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HD2	2	0.45
(1,310)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HD1	2	0.45
(1,310)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HD2	2	0.45
(1,310)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	7	0.45
(1,310)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	7	0.45
(1,310)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	7	0.45
(1,310)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	7	0.45
(1,310)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	7	0.45
(1,310)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	7	0.45
(1,310)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HD1	7	0.45
(1,310)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HD2	7	0.45
(1,310)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HD1	7	0.45
(1,310)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HD2	7	0.45
(1,310)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HD1	7	0.45
(1,310)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HD2	7	0.45
(1,259)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	1	0.45
(1,259)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	1	0.45
(1,259)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	1	0.45
(1,259)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	4	0.45
(1,259)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	4	0.45
(1,259)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	4	0.45
(1,186)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HB2	1	0.45
(1,186)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HB2	2	0.45
(1,186)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HB2	4	0.45
(1,186)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HB2	7	0.45
(1,186)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HB2	8	0.45
(1,186)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HB2	10	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,151)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HB2	10	0.45
(1,132)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD11	7	0.45
(1,132)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD12	7	0.45
(1,132)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD13	7	0.45
(1,27)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HB3	1	0.45
(1,27)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HB3	2	0.45
(1,27)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HB3	4	0.45
(1,27)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HB3	5	0.45
(1,27)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HB3	6	0.45
(1,27)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HB3	7	0.45
(1,27)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HB3	9	0.45
(1,27)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HB3	10	0.45
(4,41)	1:9:A:ILE:HA	1:11:A:TRP:HE3	9	0.44
(4,11)	1:14:A:GLU:HB3	1:14:A:GLU:HG3	7	0.44
(3,548)	1:19:A:SER:HB2	1:20:A:GLY:H	6	0.44
(3,526)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	4	0.44
(3,526)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	4	0.44
(3,526)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	4	0.44
(3,526)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	6	0.44
(3,526)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	6	0.44
(3,526)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	6	0.44
(3,523)	1:2:A:GLU:HB2	1:3:A:GLU:HA	10	0.44
(3,506)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	3	0.44
(3,506)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	3	0.44
(3,506)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	3	0.44
(3,168)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG3	2	0.44
(3,168)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG3	4	0.44
(3,168)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG3	7	0.44
(3,76)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD3	6	0.44
(3,76)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD3	7	0.44
(3,76)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD3	10	0.44
(2,638)	1:9:A:ILE:HA	1:11:A:TRP:HE3	9	0.44
(2,581)	1:19:A:SER:HB2	1:20:A:GLY:H	6	0.44
(2,556)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	4	0.44
(2,556)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	4	0.44
(2,556)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	4	0.44
(2,556)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	6	0.44
(2,556)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	6	0.44
(2,556)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	6	0.44
(2,553)	1:2:A:GLU:HB2	1:3:A:GLU:HA	10	0.44
(2,534)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	3	0.44
(2,534)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	3	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,534)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	3	0.44
(2,239)	1:14:A:GLU:HB3	1:14:A:GLU:HG3	7	0.44
(2,178)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG3	2	0.44
(2,178)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG3	4	0.44
(2,178)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG3	7	0.44
(2,76)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD3	6	0.44
(2,76)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD3	7	0.44
(2,76)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD3	10	0.44
(1,614)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HB2	8	0.44
(1,586)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:H	1	0.44
(1,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG11	3	0.44
(1,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG12	3	0.44
(1,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG13	3	0.44
(1,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG11	3	0.44
(1,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG12	3	0.44
(1,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG13	3	0.44
(1,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG11	3	0.44
(1,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG12	3	0.44
(1,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG13	3	0.44
(1,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	3	0.44
(1,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	3	0.44
(1,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	3	0.44
(1,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	3	0.44
(1,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	3	0.44
(1,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	3	0.44
(1,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	3	0.44
(1,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	3	0.44
(1,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	3	0.44
(1,528)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB3	5	0.44
(1,528)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB3	5	0.44
(1,528)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB3	5	0.44
(1,528)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HB3	5	0.44
(1,528)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HB3	5	0.44
(1,528)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HB3	5	0.44
(1,496)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD2	10	0.44
(1,496)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	10	0.44
(1,489)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:HB3	7	0.44
(1,488)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HD2	6	0.44
(1,327)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HE3	7	0.44
(1,327)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HE3	8	0.44
(1,316)	1:8:A:TYR:HD1	1:23:A:PRO:HB2	4	0.44
(1,316)	1:8:A:TYR:HD2	1:23:A:PRO:HB2	4	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,309)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB3	6	0.44
(1,309)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB3	6	0.44
(1,272)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG3	8	0.44
(1,262)	1:3:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HG2	6	0.44
(1,262)	1:3:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HG3	6	0.44
(1,259)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	2	0.44
(1,259)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	2	0.44
(1,259)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	2	0.44
(1,259)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	5	0.44
(1,259)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	5	0.44
(1,259)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	5	0.44
(1,151)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HB2	1	0.44
(1,151)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HB2	2	0.44
(1,151)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HB2	9	0.44
(1,149)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HE	7	0.44
(1,132)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD11	6	0.44
(1,132)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD12	6	0.44
(1,132)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD13	6	0.44
(1,99)	1:23:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD2	1	0.44
(1,38)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HG2	6	0.44
(1,27)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HB3	3	0.44
(1,27)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HB3	8	0.44
(4,41)	1:9:A:ILE:HA	1:11:A:TRP:HE3	7	0.43
(4,21)	1:7:A:LEU:HB3	1:8:A:TYR:H	7	0.43
(3,568)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HB3	1	0.43
(3,568)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HB3	4	0.43
(3,548)	1:19:A:SER:HB2	1:20:A:GLY:H	2	0.43
(3,526)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	5	0.43
(3,526)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	5	0.43
(3,526)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	5	0.43
(3,526)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	10	0.43
(3,526)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	10	0.43
(3,526)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	10	0.43
(3,511)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HB2	7	0.43
(3,511)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HB2	7	0.43
(3,511)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HB2	7	0.43
(3,411)	1:19:A:SER:H	1:20:A:GLY:HA3	3	0.43
(3,411)	1:19:A:SER:H	1:20:A:GLY:HA3	10	0.43
(3,76)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD3	4	0.43
(3,76)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD3	5	0.43
(3,76)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD3	9	0.43
(2,638)	1:9:A:ILE:HA	1:11:A:TRP:HE3	7	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,604)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HB3	1	0.43
(2,604)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HB3	4	0.43
(2,581)	1:19:A:SER:HB2	1:20:A:GLY:H	2	0.43
(2,556)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	5	0.43
(2,556)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	5	0.43
(2,556)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	5	0.43
(2,556)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	10	0.43
(2,556)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	10	0.43
(2,556)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	10	0.43
(2,539)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HB2	7	0.43
(2,539)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HB2	7	0.43
(2,539)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HB2	7	0.43
(2,435)	1:7:A:LEU:HB3	1:8:A:TYR:H	7	0.43
(2,431)	1:19:A:SER:H	1:20:A:GLY:HA3	3	0.43
(2,431)	1:19:A:SER:H	1:20:A:GLY:HA3	10	0.43
(2,76)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD3	4	0.43
(2,76)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD3	5	0.43
(2,76)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD3	9	0.43
(1,632)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HD2	5	0.43
(1,632)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HD2	5	0.43
(1,632)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HD2	5	0.43
(1,632)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HD3	5	0.43
(1,632)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HD3	5	0.43
(1,632)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HD3	5	0.43
(1,632)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HD2	10	0.43
(1,632)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HD2	10	0.43
(1,632)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HD2	10	0.43
(1,632)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HD3	10	0.43
(1,632)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HD3	10	0.43
(1,632)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HD3	10	0.43
(1,592)	1:11:A:TRP:HE3	1:16:A:GLY:HA3	3	0.43
(1,590)	1:2:A:GLU:HB2	1:5:A:VAL:H	8	0.43
(1,586)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:H	4	0.43
(1,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG11	10	0.43
(1,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG12	10	0.43
(1,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG13	10	0.43
(1,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG11	10	0.43
(1,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG12	10	0.43
(1,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG13	10	0.43
(1,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG11	10	0.43
(1,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG12	10	0.43
(1,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG13	10	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	10	0.43
(1,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	10	0.43
(1,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	10	0.43
(1,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	10	0.43
(1,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	10	0.43
(1,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	10	0.43
(1,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	10	0.43
(1,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	10	0.43
(1,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	10	0.43
(1,486)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:HA	2	0.43
(1,474)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:H	2	0.43
(1,473)	1:14:A:GLU:HB2	1:15:A:GLY:H	6	0.43
(1,473)	1:14:A:GLU:HB3	1:15:A:GLY:H	6	0.43
(1,376)	1:5:A:VAL:H	1:6:A:ARG:H	9	0.43
(1,327)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HE3	3	0.43
(1,327)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HE3	4	0.43
(1,327)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HE3	10	0.43
(1,310)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	6	0.43
(1,310)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	6	0.43
(1,310)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	6	0.43
(1,310)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	6	0.43
(1,310)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	6	0.43
(1,310)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	6	0.43
(1,310)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HD1	6	0.43
(1,310)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HD2	6	0.43
(1,310)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HD1	6	0.43
(1,310)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HD2	6	0.43
(1,310)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HD1	6	0.43
(1,310)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HD2	6	0.43
(1,293)	1:10:A:GLN:HE21	1:14:A:GLU:HG3	5	0.43
(1,262)	1:3:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HG2	7	0.43
(1,262)	1:3:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HG3	7	0.43
(1,222)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HG3	5	0.43
(1,222)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HG3	5	0.43
(1,222)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HG3	10	0.43
(1,222)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HG3	10	0.43
(1,151)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HB2	7	0.43
(1,120)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	6	0.43
(1,120)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	6	0.43
(1,120)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	6	0.43
(1,120)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	10	0.43
(1,120)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	10	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,120)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	10	0.43
(4,38)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:HA2	1	0.42
(4,38)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:HA2	1	0.42
(4,38)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:HA2	1	0.42
(4,19)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:H	3	0.42
(4,19)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:H	3	0.42
(4,9)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	5	0.42
(4,9)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	5	0.42
(4,9)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	5	0.42
(3,568)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HB3	2	0.42
(3,568)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HB3	5	0.42
(3,539)	1:2:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:H	6	0.42
(3,526)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	1	0.42
(3,526)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	1	0.42
(3,526)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	1	0.42
(3,526)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	2	0.42
(3,526)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	2	0.42
(3,526)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	2	0.42
(3,526)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	3	0.42
(3,526)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	3	0.42
(3,526)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	3	0.42
(3,514)	1:7:A:LEU:HD21	1:10:A:GLN:HB2	7	0.42
(3,514)	1:7:A:LEU:HD22	1:10:A:GLN:HB2	7	0.42
(3,514)	1:7:A:LEU:HD23	1:10:A:GLN:HB2	7	0.42
(3,506)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	6	0.42
(3,506)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	6	0.42
(3,506)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	6	0.42
(3,443)	1:23:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	7	0.42
(3,413)	1:7:A:LEU:HB2	1:8:A:TYR:H	7	0.42
(3,411)	1:19:A:SER:H	1:20:A:GLY:HA3	8	0.42
(3,143)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HB3	1	0.42
(3,143)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HB3	7	0.42
(3,143)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HB3	8	0.42
(3,143)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HB3	10	0.42
(3,76)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD3	2	0.42
(2,620)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:HA2	1	0.42
(2,620)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:HA2	1	0.42
(2,620)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:HA2	1	0.42
(2,604)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HB3	2	0.42
(2,604)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HB3	5	0.42
(2,572)	1:2:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:H	6	0.42
(2,556)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	1	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,556)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	1	0.42
(2,556)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	1	0.42
(2,556)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	2	0.42
(2,556)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	2	0.42
(2,556)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	2	0.42
(2,556)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	3	0.42
(2,556)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	3	0.42
(2,556)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	3	0.42
(2,543)	1:7:A:LEU:HD21	1:10:A:GLN:HB2	7	0.42
(2,543)	1:7:A:LEU:HD22	1:10:A:GLN:HB2	7	0.42
(2,543)	1:7:A:LEU:HD23	1:10:A:GLN:HB2	7	0.42
(2,534)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	6	0.42
(2,534)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	6	0.42
(2,534)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	6	0.42
(2,469)	1:23:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	7	0.42
(2,433)	1:7:A:LEU:HB2	1:8:A:TYR:H	7	0.42
(2,431)	1:19:A:SER:H	1:20:A:GLY:HA3	8	0.42
(2,372)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:H	3	0.42
(2,372)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:H	3	0.42
(2,159)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	5	0.42
(2,159)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	5	0.42
(2,159)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	5	0.42
(2,150)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HB3	1	0.42
(2,150)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HB3	7	0.42
(2,150)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HB3	8	0.42
(2,150)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HB3	10	0.42
(2,76)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD3	2	0.42
(1,643)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB3	4	0.42
(1,627)	1:7:A:LEU:HD21	1:10:A:GLN:HG2	3	0.42
(1,627)	1:7:A:LEU:HD22	1:10:A:GLN:HG2	3	0.42
(1,627)	1:7:A:LEU:HD23	1:10:A:GLN:HG2	3	0.42
(1,614)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HB2	9	0.42
(1,602)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG2	4	0.42
(1,489)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:HB3	1	0.42
(1,489)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:HB3	8	0.42
(1,357)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD21	9	0.42
(1,357)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD22	9	0.42
(1,357)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD23	9	0.42
(1,327)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HE3	1	0.42
(1,327)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HE3	2	0.42
(1,327)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HE3	5	0.42
(1,293)	1:10:A:GLN:HE21	1:14:A:GLU:HG3	4	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,272)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG3	6	0.42
(1,222)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HG3	1	0.42
(1,222)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HG3	1	0.42
(1,222)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HG3	4	0.42
(1,222)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HG3	4	0.42
(1,222)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HG3	6	0.42
(1,222)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HG3	6	0.42
(1,222)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HG3	7	0.42
(1,222)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HG3	7	0.42
(1,222)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HG3	8	0.42
(1,222)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HG3	8	0.42
(1,131)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD21	9	0.42
(1,131)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD22	9	0.42
(1,131)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD23	9	0.42
(1,51)	1:6:A:ARG:HD2	1:6:A:ARG:HG3	2	0.42
(1,51)	1:6:A:ARG:HD2	1:6:A:ARG:HG3	10	0.42
(1,25)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HB3	1	0.42
(1,25)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HB3	7	0.42
(4,35)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HB3	2	0.41
(4,19)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:H	2	0.41
(4,19)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:H	2	0.41
(4,18)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HA	4	0.41
(4,18)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HA	5	0.41
(4,16)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	1	0.41
(4,9)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	1	0.41
(4,9)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	1	0.41
(4,9)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	1	0.41
(4,9)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	4	0.41
(4,9)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	4	0.41
(4,9)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	4	0.41
(3,411)	1:19:A:SER:H	1:20:A:GLY:HA3	4	0.41
(3,280)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HG2	2	0.41
(3,280)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HG2	4	0.41
(3,280)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HG2	5	0.41
(3,280)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HG2	6	0.41
(3,280)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HG2	7	0.41
(3,280)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HG2	8	0.41
(3,280)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HG2	9	0.41
(3,280)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HG2	10	0.41
(3,143)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HB3	5	0.41
(3,76)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD3	3	0.41
(2,593)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HB3	2	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,431)	1:19:A:SER:H	1:20:A:GLY:HA3	4	0.41
(2,372)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:H	2	0.41
(2,372)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:H	2	0.41
(2,365)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HA	4	0.41
(2,365)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HA	5	0.41
(2,335)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	1	0.41
(2,292)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HG2	2	0.41
(2,292)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HG2	4	0.41
(2,292)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HG2	5	0.41
(2,292)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HG2	6	0.41
(2,292)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HG2	7	0.41
(2,292)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HG2	8	0.41
(2,292)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HG2	9	0.41
(2,292)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HG2	10	0.41
(2,159)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	1	0.41
(2,159)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	1	0.41
(2,159)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	1	0.41
(2,159)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	4	0.41
(2,159)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	4	0.41
(2,159)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	4	0.41
(2,150)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HB3	5	0.41
(2,76)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD3	3	0.41
(1,643)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB3	1	0.41
(1,628)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	9	0.41
(1,628)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	9	0.41
(1,628)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	9	0.41
(1,627)	1:7:A:LEU:HD21	1:10:A:GLN:HG2	8	0.41
(1,627)	1:7:A:LEU:HD22	1:10:A:GLN:HG2	8	0.41
(1,627)	1:7:A:LEU:HD23	1:10:A:GLN:HG2	8	0.41
(1,614)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HB2	3	0.41
(1,607)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HD3	7	0.41
(1,592)	1:11:A:TRP:HE3	1:16:A:GLY:HA3	4	0.41
(1,586)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:H	2	0.41
(1,577)	1:11:A:TRP:H	1:24:A:PRO:HG3	9	0.41
(1,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG11	7	0.41
(1,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG12	7	0.41
(1,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG13	7	0.41
(1,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG11	7	0.41
(1,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG12	7	0.41
(1,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG13	7	0.41
(1,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG11	7	0.41
(1,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG12	7	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG13	7	0.41
(1,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	7	0.41
(1,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	7	0.41
(1,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	7	0.41
(1,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	7	0.41
(1,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	7	0.41
(1,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	7	0.41
(1,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	7	0.41
(1,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	7	0.41
(1,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	7	0.41
(1,526)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HD3	7	0.41
(1,526)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HD3	7	0.41
(1,526)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HD3	7	0.41
(1,493)	1:21:A:ARG:HB2	1:22:A:PRO:HD2	3	0.41
(1,493)	1:21:A:ARG:HB3	1:22:A:PRO:HD2	3	0.41
(1,491)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB3	2	0.41
(1,489)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:HB3	10	0.41
(1,486)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:HA	8	0.41
(1,468)	1:24:A:PRO:HG2	1:25:A:SER:H	3	0.41
(1,376)	1:5:A:VAL:H	1:6:A:ARG:H	3	0.41
(1,376)	1:5:A:VAL:H	1:6:A:ARG:H	6	0.41
(1,327)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HE3	6	0.41
(1,316)	1:8:A:TYR:HD1	1:23:A:PRO:HB2	7	0.41
(1,316)	1:8:A:TYR:HD2	1:23:A:PRO:HB2	7	0.41
(1,302)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG2	10	0.41
(1,302)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG2	10	0.41
(1,272)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG3	7	0.41
(1,222)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HG3	3	0.41
(1,222)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HG3	3	0.41
(1,180)	1:10:A:GLN:HG2	1:10:A:GLN:HG3	1	0.41
(1,180)	1:10:A:GLN:HG2	1:10:A:GLN:HG3	4	0.41
(1,180)	1:10:A:GLN:HG2	1:10:A:GLN:HG3	6	0.41
(1,180)	1:10:A:GLN:HG2	1:10:A:GLN:HG3	7	0.41
(1,180)	1:10:A:GLN:HG2	1:10:A:GLN:HG3	8	0.41
(1,180)	1:10:A:GLN:HG2	1:10:A:GLN:HG3	9	0.41
(1,180)	1:10:A:GLN:HG2	1:10:A:GLN:HG3	10	0.41
(1,152)	1:6:A:ARG:HD3	1:6:A:ARG:HE	3	0.41
(1,116)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HB2	2	0.41
(1,116)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HB3	2	0.41
(1,97)	1:23:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HD2	6	0.41
(1,97)	1:23:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HD2	10	0.41
(1,51)	1:6:A:ARG:HD2	1:6:A:ARG:HG3	9	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,25)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HB3	2	0.41
(1,25)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HB3	5	0.41
(1,25)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HB3	6	0.41
(1,25)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HB3	9	0.41
(4,41)	1:9:A:ILE:HA	1:11:A:TRP:HE3	6	0.4
(4,41)	1:9:A:ILE:HA	1:11:A:TRP:HE3	8	0.4
(4,38)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:HA2	2	0.4
(4,38)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:HA2	2	0.4
(4,38)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:HA2	2	0.4
(4,38)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:HA2	7	0.4
(4,38)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:HA2	7	0.4
(4,38)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:HA2	7	0.4
(4,35)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HB3	4	0.4
(4,9)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	2	0.4
(4,9)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	2	0.4
(4,9)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	2	0.4
(4,9)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	3	0.4
(4,9)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	3	0.4
(4,9)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	3	0.4
(4,9)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	6	0.4
(4,9)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	6	0.4
(4,9)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	6	0.4
(4,9)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	7	0.4
(4,9)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	7	0.4
(4,9)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	7	0.4
(4,9)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	8	0.4
(4,9)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	8	0.4
(4,9)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	8	0.4
(4,9)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	9	0.4
(4,9)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	9	0.4
(4,9)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	9	0.4
(3,526)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	7	0.4
(3,526)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	7	0.4
(3,526)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	7	0.4
(3,405)	1:16:A:GLY:H	1:19:A:SER:HB2	5	0.4
(3,283)	1:10:A:GLN:HE22	1:10:A:GLN:HG2	7	0.4
(3,283)	1:10:A:GLN:HE22	1:10:A:GLN:HG2	8	0.4
(3,283)	1:10:A:GLN:HE22	1:10:A:GLN:HG2	9	0.4
(3,283)	1:10:A:GLN:HE22	1:10:A:GLN:HG2	10	0.4
(3,280)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HG2	1	0.4
(3,280)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HG2	3	0.4
(3,225)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HG3	5	0.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,638)	1:9:A:ILE:HA	1:11:A:TRP:HE3	6	0.4
(2,638)	1:9:A:ILE:HA	1:11:A:TRP:HE3	8	0.4
(2,620)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:HA2	2	0.4
(2,620)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:HA2	2	0.4
(2,620)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:HA2	2	0.4
(2,620)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:HA2	7	0.4
(2,620)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:HA2	7	0.4
(2,620)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:HA2	7	0.4
(2,593)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HB3	4	0.4
(2,556)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	7	0.4
(2,556)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	7	0.4
(2,556)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	7	0.4
(2,425)	1:16:A:GLY:H	1:19:A:SER:HB2	5	0.4
(2,295)	1:10:A:GLN:HE22	1:10:A:GLN:HG2	7	0.4
(2,295)	1:10:A:GLN:HE22	1:10:A:GLN:HG2	8	0.4
(2,295)	1:10:A:GLN:HE22	1:10:A:GLN:HG2	9	0.4
(2,295)	1:10:A:GLN:HE22	1:10:A:GLN:HG2	10	0.4
(2,292)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HG2	1	0.4
(2,292)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HG2	3	0.4
(2,235)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HG3	5	0.4
(2,159)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	2	0.4
(2,159)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	2	0.4
(2,159)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	2	0.4
(2,159)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	3	0.4
(2,159)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	3	0.4
(2,159)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	3	0.4
(2,159)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	6	0.4
(2,159)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	6	0.4
(2,159)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	6	0.4
(2,159)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	7	0.4
(2,159)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	7	0.4
(2,159)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	7	0.4
(2,159)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	8	0.4
(2,159)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	8	0.4
(2,159)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	8	0.4
(2,159)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	9	0.4
(2,159)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	9	0.4
(2,159)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	9	0.4
(1,627)	1:7:A:LEU:HD21	1:10:A:GLN:HG2	10	0.4
(1,627)	1:7:A:LEU:HD22	1:10:A:GLN:HG2	10	0.4
(1,627)	1:7:A:LEU:HD23	1:10:A:GLN:HG2	10	0.4
(1,602)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG2	1	0.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,599)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HG	7	0.4
(1,592)	1:11:A:TRP:HE3	1:16:A:GLY:HA3	6	0.4
(1,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG11	8	0.4
(1,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG12	8	0.4
(1,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG13	8	0.4
(1,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG11	8	0.4
(1,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG12	8	0.4
(1,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG13	8	0.4
(1,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG11	8	0.4
(1,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG12	8	0.4
(1,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG13	8	0.4
(1,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	8	0.4
(1,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	8	0.4
(1,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	8	0.4
(1,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	8	0.4
(1,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	8	0.4
(1,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	8	0.4
(1,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	8	0.4
(1,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	8	0.4
(1,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	8	0.4
(1,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG11	9	0.4
(1,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG12	9	0.4
(1,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG13	9	0.4
(1,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG11	9	0.4
(1,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG12	9	0.4
(1,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG13	9	0.4
(1,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG11	9	0.4
(1,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG12	9	0.4
(1,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG13	9	0.4
(1,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	9	0.4
(1,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	9	0.4
(1,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	9	0.4
(1,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	9	0.4
(1,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	9	0.4
(1,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	9	0.4
(1,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	9	0.4
(1,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	9	0.4
(1,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	9	0.4
(1,535)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG11	9	0.4
(1,535)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG12	9	0.4
(1,535)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG13	9	0.4
(1,535)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	9	0.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,535)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	9	0.4
(1,535)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	9	0.4
(1,535)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG11	9	0.4
(1,535)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG12	9	0.4
(1,535)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG13	9	0.4
(1,535)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG21	9	0.4
(1,535)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG22	9	0.4
(1,535)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG23	9	0.4
(1,489)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:HB3	3	0.4
(1,489)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:HB3	5	0.4
(1,489)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:HB3	6	0.4
(1,376)	1:5:A:VAL:H	1:6:A:ARG:H	7	0.4
(1,327)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HE3	9	0.4
(1,297)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HD1	8	0.4
(1,297)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HD2	8	0.4
(1,233)	1:14:A:GLU:H	1:14:A:GLU:HG2	7	0.4
(1,222)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HG3	2	0.4
(1,222)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HG3	2	0.4
(1,180)	1:10:A:GLN:HG2	1:10:A:GLN:HG3	2	0.4
(1,180)	1:10:A:GLN:HG2	1:10:A:GLN:HG3	3	0.4
(1,180)	1:10:A:GLN:HG2	1:10:A:GLN:HG3	5	0.4
(1,120)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	9	0.4
(1,120)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	9	0.4
(1,120)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	9	0.4
(1,51)	1:6:A:ARG:HD2	1:6:A:ARG:HG3	5	0.4
(1,25)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HB3	3	0.4
(1,25)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HB3	4	0.4
(1,25)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HB3	8	0.4
(1,25)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HB3	10	0.4
(4,35)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HB3	1	0.39
(4,35)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HB3	5	0.39
(4,19)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:H	4	0.39
(4,19)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:H	4	0.39
(4,18)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HA	9	0.39
(4,16)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	2	0.39
(4,16)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	7	0.39
(4,16)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	9	0.39
(4,9)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	10	0.39
(4,9)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	10	0.39
(4,9)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	10	0.39
(4,2)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	6	0.39
(4,2)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	6	0.39

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,2)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	6	0.39
(4,2)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	10	0.39
(4,2)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	10	0.39
(4,2)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	10	0.39
(3,526)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	9	0.39
(3,526)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	9	0.39
(3,526)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	9	0.39
(3,347)	1:11:A:TRP:HE1	1:19:A:SER:HB2	1	0.39
(3,347)	1:11:A:TRP:HE1	1:19:A:SER:HB2	9	0.39
(3,283)	1:10:A:GLN:HE22	1:10:A:GLN:HG2	2	0.39
(3,283)	1:10:A:GLN:HE22	1:10:A:GLN:HG2	3	0.39
(3,283)	1:10:A:GLN:HE22	1:10:A:GLN:HG2	4	0.39
(3,283)	1:10:A:GLN:HE22	1:10:A:GLN:HG2	5	0.39
(3,283)	1:10:A:GLN:HE22	1:10:A:GLN:HG2	6	0.39
(3,141)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HG2	10	0.39
(2,593)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HB3	1	0.39
(2,593)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HB3	5	0.39
(2,556)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	9	0.39
(2,556)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	9	0.39
(2,556)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	9	0.39
(2,372)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:H	4	0.39
(2,372)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:H	4	0.39
(2,365)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HA	9	0.39
(2,364)	1:11:A:TRP:HE1	1:19:A:SER:HB2	1	0.39
(2,364)	1:11:A:TRP:HE1	1:19:A:SER:HB2	9	0.39
(2,335)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	2	0.39
(2,335)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	7	0.39
(2,335)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	9	0.39
(2,295)	1:10:A:GLN:HE22	1:10:A:GLN:HG2	2	0.39
(2,295)	1:10:A:GLN:HE22	1:10:A:GLN:HG2	3	0.39
(2,295)	1:10:A:GLN:HE22	1:10:A:GLN:HG2	4	0.39
(2,295)	1:10:A:GLN:HE22	1:10:A:GLN:HG2	5	0.39
(2,295)	1:10:A:GLN:HE22	1:10:A:GLN:HG2	6	0.39
(2,159)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	10	0.39
(2,159)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	10	0.39
(2,159)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	10	0.39
(2,148)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HG2	10	0.39
(2,119)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	6	0.39
(2,119)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	6	0.39
(2,119)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	6	0.39
(2,119)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	10	0.39
(2,119)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	10	0.39

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,119)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	10	0.39
(1,643)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB3	2	0.39
(1,627)	1:7:A:LEU:HD21	1:10:A:GLN:HG2	6	0.39
(1,627)	1:7:A:LEU:HD22	1:10:A:GLN:HG2	6	0.39
(1,627)	1:7:A:LEU:HD23	1:10:A:GLN:HG2	6	0.39
(1,613)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HG3	3	0.39
(1,600)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HG3	4	0.39
(1,592)	1:11:A:TRP:HE3	1:16:A:GLY:HA3	10	0.39
(1,493)	1:21:A:ARG:HB2	1:22:A:PRO:HD2	4	0.39
(1,493)	1:21:A:ARG:HB3	1:22:A:PRO:HD2	4	0.39
(1,489)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:HB3	2	0.39
(1,489)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:HB3	4	0.39
(1,469)	1:23:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	4	0.39
(1,463)	1:24:A:PRO:HD2	1:25:A:SER:H	3	0.39
(1,463)	1:24:A:PRO:HD2	1:25:A:SER:H	9	0.39
(1,447)	1:5:A:VAL:HB	1:6:A:ARG:H	5	0.39
(1,444)	1:10:A:GLN:H	1:11:A:TRP:HB2	5	0.39
(1,444)	1:10:A:GLN:H	1:11:A:TRP:HB2	6	0.39
(1,444)	1:10:A:GLN:H	1:11:A:TRP:HB2	9	0.39
(1,310)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	5	0.39
(1,310)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	5	0.39
(1,310)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	5	0.39
(1,310)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	5	0.39
(1,310)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	5	0.39
(1,310)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	5	0.39
(1,310)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HD1	5	0.39
(1,310)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HD2	5	0.39
(1,310)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HD1	5	0.39
(1,310)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HD2	5	0.39
(1,310)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HD1	5	0.39
(1,310)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HD2	5	0.39
(1,310)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	8	0.39
(1,310)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	8	0.39
(1,310)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	8	0.39
(1,310)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	8	0.39
(1,310)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	8	0.39
(1,310)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	8	0.39
(1,310)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HD1	8	0.39
(1,310)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HD2	8	0.39
(1,310)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HD1	8	0.39
(1,310)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HD2	8	0.39
(1,310)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HD1	8	0.39

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,310)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HD2	8	0.39
(1,302)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG2	6	0.39
(1,302)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG2	6	0.39
(1,302)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG2	8	0.39
(1,302)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG2	8	0.39
(1,272)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG3	4	0.39
(1,272)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG3	9	0.39
(1,237)	1:14:A:GLU:HG2	1:14:A:GLU:HG3	5	0.39
(1,237)	1:14:A:GLU:HG2	1:14:A:GLU:HG3	6	0.39
(1,237)	1:14:A:GLU:HG2	1:14:A:GLU:HG3	10	0.39
(1,188)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HB3	1	0.39
(1,188)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HB3	3	0.39
(1,188)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HB3	5	0.39
(1,188)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HB3	6	0.39
(1,188)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HB3	8	0.39
(1,188)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HB3	9	0.39
(1,188)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HB3	10	0.39
(1,151)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HB2	4	0.39
(1,131)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD21	6	0.39
(1,131)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD22	6	0.39
(1,131)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD23	6	0.39
(1,120)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	3	0.39
(1,120)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	3	0.39
(1,120)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	3	0.39
(1,120)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	8	0.39
(1,120)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	8	0.39
(1,120)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	8	0.39
(1,112)	1:24:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HG3	3	0.39
(1,112)	1:24:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HG3	6	0.39
(1,112)	1:24:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HG3	7	0.39
(1,112)	1:24:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HG3	8	0.39
(1,112)	1:24:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HG3	10	0.39
(1,110)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HG2	9	0.39
(1,51)	1:6:A:ARG:HD2	1:6:A:ARG:HG3	1	0.39
(1,38)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HG2	1	0.39
(1,35)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HG3	2	0.39
(1,35)	1:21:A:ARG:HD3	1:21:A:ARG:HG3	2	0.39
(1,35)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HG3	3	0.39
(1,35)	1:21:A:ARG:HD3	1:21:A:ARG:HG3	3	0.39
(1,35)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HG3	8	0.39
(1,35)	1:21:A:ARG:HD3	1:21:A:ARG:HG3	8	0.39
(1,35)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HG3	10	0.39

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,35)	1:21:A:ARG:HD3	1:21:A:ARG:HG3	10	0.39
(4,45)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HA	1	0.38
(4,42)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HB2	3	0.38
(4,38)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:HA2	4	0.38
(4,38)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:HA2	4	0.38
(4,38)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:HA2	4	0.38
(4,38)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:HA2	8	0.38
(4,38)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:HA2	8	0.38
(4,38)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:HA2	8	0.38
(4,38)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:HA2	10	0.38
(4,38)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:HA2	10	0.38
(4,38)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:HA2	10	0.38
(4,35)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HB3	7	0.38
(4,19)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:H	1	0.38
(4,19)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:H	1	0.38
(4,19)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:H	10	0.38
(4,19)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:H	10	0.38
(4,18)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HA	1	0.38
(4,18)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HA	3	0.38
(4,18)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HA	6	0.38
(4,16)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	5	0.38
(4,16)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	6	0.38
(4,16)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	8	0.38
(4,2)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	1	0.38
(4,2)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	1	0.38
(4,2)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	1	0.38
(3,526)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	8	0.38
(3,526)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	8	0.38
(3,526)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	8	0.38
(3,283)	1:10:A:GLN:HE22	1:10:A:GLN:HG2	1	0.38
(3,76)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD3	8	0.38
(2,659)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HA	1	0.38
(2,653)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HB2	3	0.38
(2,620)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:HA2	4	0.38
(2,620)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:HA2	4	0.38
(2,620)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:HA2	4	0.38
(2,620)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:HA2	8	0.38
(2,620)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:HA2	8	0.38
(2,620)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:HA2	8	0.38
(2,620)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:HA2	10	0.38
(2,620)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:HA2	10	0.38
(2,620)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:HA2	10	0.38

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,593)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HB3	7	0.38
(2,556)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	8	0.38
(2,556)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	8	0.38
(2,556)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	8	0.38
(2,372)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:H	1	0.38
(2,372)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:H	1	0.38
(2,372)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:H	10	0.38
(2,372)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:H	10	0.38
(2,365)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HA	1	0.38
(2,365)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HA	3	0.38
(2,365)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HA	6	0.38
(2,335)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	5	0.38
(2,335)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	6	0.38
(2,335)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	8	0.38
(2,295)	1:10:A:GLN:HE22	1:10:A:GLN:HG2	1	0.38
(2,119)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	1	0.38
(2,119)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	1	0.38
(2,119)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	1	0.38
(2,76)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD3	8	0.38
(1,632)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HD2	4	0.38
(1,632)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HD2	4	0.38
(1,632)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HD2	4	0.38
(1,632)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HD3	4	0.38
(1,632)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HD3	4	0.38
(1,632)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HD3	4	0.38
(1,600)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HG3	2	0.38
(1,600)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HG3	5	0.38
(1,526)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HD3	5	0.38
(1,526)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HD3	5	0.38
(1,526)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HD3	5	0.38
(1,502)	1:11:A:TRP:HB3	1:24:A:PRO:HG3	6	0.38
(1,491)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB3	4	0.38
(1,491)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB3	5	0.38
(1,384)	1:19:A:SER:H	1:20:A:GLY:H	2	0.38
(1,384)	1:19:A:SER:H	1:20:A:GLY:H	4	0.38
(1,384)	1:19:A:SER:H	1:20:A:GLY:H	8	0.38
(1,379)	1:15:A:GLY:H	1:16:A:GLY:H	3	0.38
(1,305)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG3	9	0.38
(1,305)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG3	9	0.38
(1,297)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HD1	7	0.38
(1,297)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HD2	7	0.38
(1,294)	1:10:A:GLN:HE22	1:14:A:GLU:HG2	6	0.38

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,294)	1:10:A:GLN:HE22	1:14:A:GLU:HG2	9	0.38
(1,293)	1:10:A:GLN:HE21	1:14:A:GLU:HG3	3	0.38
(1,247)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HD2	1	0.38
(1,247)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HD2	9	0.38
(1,237)	1:14:A:GLU:HG2	1:14:A:GLU:HG3	9	0.38
(1,225)	1:13:A:LYS:HG2	1:13:A:LYS:HG3	1	0.38
(1,225)	1:13:A:LYS:HG2	1:13:A:LYS:HG3	3	0.38
(1,225)	1:13:A:LYS:HG2	1:13:A:LYS:HG3	8	0.38
(1,222)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HG3	9	0.38
(1,222)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HG3	9	0.38
(1,188)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HB3	2	0.38
(1,188)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HB3	4	0.38
(1,188)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HB3	7	0.38
(1,138)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HB2	6	0.38
(1,131)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD21	3	0.38
(1,131)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD22	3	0.38
(1,131)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD23	3	0.38
(1,131)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD21	8	0.38
(1,131)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD22	8	0.38
(1,131)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD23	8	0.38
(1,112)	1:24:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HG3	1	0.38
(1,112)	1:24:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HG3	2	0.38
(1,112)	1:24:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HG3	4	0.38
(1,99)	1:23:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD2	7	0.38
(1,97)	1:23:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HD2	3	0.38
(1,43)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HE	10	0.38
(1,43)	1:21:A:ARG:HD3	1:21:A:ARG:HE	10	0.38
(4,38)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:HA2	6	0.37
(4,38)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:HA2	6	0.37
(4,38)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:HA2	6	0.37
(4,18)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HA	2	0.37
(4,18)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HA	7	0.37
(4,16)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	4	0.37
(4,2)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	2	0.37
(4,2)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	2	0.37
(4,2)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	2	0.37
(4,2)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	5	0.37
(4,2)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	5	0.37
(4,2)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	5	0.37
(3,548)	1:19:A:SER:HB2	1:20:A:GLY:H	7	0.37
(3,539)	1:2:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:H	2	0.37
(3,255)	1:3:A:GLU:HB3	1:3:A:GLU:HG3	4	0.37

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,255)	1:3:A:GLU:HB3	1:3:A:GLU:HG3	6	0.37
(3,143)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HB3	2	0.37
(2,620)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:HA2	6	0.37
(2,620)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:HA2	6	0.37
(2,620)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:HA2	6	0.37
(2,581)	1:19:A:SER:HB2	1:20:A:GLY:H	7	0.37
(2,572)	1:2:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:H	2	0.37
(2,365)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HA	2	0.37
(2,365)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HA	7	0.37
(2,335)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	4	0.37
(2,266)	1:3:A:GLU:HB3	1:3:A:GLU:HG3	4	0.37
(2,266)	1:3:A:GLU:HB3	1:3:A:GLU:HG3	6	0.37
(2,150)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HB3	2	0.37
(2,119)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	2	0.37
(2,119)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	2	0.37
(2,119)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	2	0.37
(2,119)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	5	0.37
(2,119)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	5	0.37
(2,119)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	5	0.37
(1,643)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB3	10	0.37
(1,592)	1:11:A:TRP:HE3	1:16:A:GLY:HA3	2	0.37
(1,526)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HD3	6	0.37
(1,526)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HD3	6	0.37
(1,526)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HD3	6	0.37
(1,520)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD11	1	0.37
(1,520)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD12	1	0.37
(1,520)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD13	1	0.37
(1,493)	1:21:A:ARG:HB2	1:22:A:PRO:HD2	9	0.37
(1,493)	1:21:A:ARG:HB3	1:22:A:PRO:HD2	9	0.37
(1,490)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB2	2	0.37
(1,473)	1:14:A:GLU:HB2	1:15:A:GLY:H	5	0.37
(1,473)	1:14:A:GLU:HB3	1:15:A:GLY:H	5	0.37
(1,463)	1:24:A:PRO:HD2	1:25:A:SER:H	10	0.37
(1,453)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:H	5	0.37
(1,453)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:H	5	0.37
(1,453)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:H	5	0.37
(1,453)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:H	5	0.37
(1,453)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:H	5	0.37
(1,453)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:H	5	0.37
(1,447)	1:5:A:VAL:HB	1:6:A:ARG:H	2	0.37
(1,376)	1:5:A:VAL:H	1:6:A:ARG:H	10	0.37
(1,297)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HD1	10	0.37

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,297)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HD2	10	0.37
(1,247)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HD2	5	0.37
(1,238)	1:14:A:GLU:HB2	1:14:A:GLU:HG2	9	0.37
(1,238)	1:14:A:GLU:HB3	1:14:A:GLU:HG2	9	0.37
(1,237)	1:14:A:GLU:HG2	1:14:A:GLU:HG3	7	0.37
(1,237)	1:14:A:GLU:HG2	1:14:A:GLU:HG3	8	0.37
(1,234)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HG2	2	0.37
(1,225)	1:13:A:LYS:HG2	1:13:A:LYS:HG3	2	0.37
(1,225)	1:13:A:LYS:HG2	1:13:A:LYS:HG3	4	0.37
(1,225)	1:13:A:LYS:HG2	1:13:A:LYS:HG3	5	0.37
(1,225)	1:13:A:LYS:HG2	1:13:A:LYS:HG3	6	0.37
(1,225)	1:13:A:LYS:HG2	1:13:A:LYS:HG3	7	0.37
(1,225)	1:13:A:LYS:HG2	1:13:A:LYS:HG3	9	0.37
(1,225)	1:13:A:LYS:HG2	1:13:A:LYS:HG3	10	0.37
(1,221)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HD2	1	0.37
(1,221)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HD3	1	0.37
(1,221)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HD2	1	0.37
(1,221)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HD3	1	0.37
(1,138)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HB2	3	0.37
(1,138)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HB2	7	0.37
(1,138)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HB2	8	0.37
(1,138)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HB2	10	0.37
(1,136)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB2	4	0.37
(1,131)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD21	10	0.37
(1,131)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD22	10	0.37
(1,131)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD23	10	0.37
(1,128)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD21	7	0.37
(1,128)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD22	7	0.37
(1,128)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD23	7	0.37
(1,125)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HG	7	0.37
(1,120)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	1	0.37
(1,120)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	1	0.37
(1,120)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	1	0.37
(1,112)	1:24:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HG3	5	0.37
(1,97)	1:23:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HD2	9	0.37
(1,55)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HD2	9	0.37
(1,51)	1:6:A:ARG:HD2	1:6:A:ARG:HG3	8	0.37
(4,42)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HB2	10	0.36
(4,38)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:HA2	5	0.36
(4,38)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:HA2	5	0.36
(4,38)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:HA2	5	0.36
(4,18)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HA	10	0.36

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,16)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	10	0.36
(4,13)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD11	1	0.36
(4,13)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD12	1	0.36
(4,13)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD13	1	0.36
(4,2)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	4	0.36
(4,2)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	4	0.36
(4,2)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	4	0.36
(4,2)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	9	0.36
(4,2)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	9	0.36
(4,2)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	9	0.36
(3,605)	1:11:A:TRP:HE3	1:23:A:PRO:HB2	9	0.36
(3,523)	1:2:A:GLU:HB2	1:3:A:GLU:HA	4	0.36
(3,255)	1:3:A:GLU:HB3	1:3:A:GLU:HG3	1	0.36
(3,255)	1:3:A:GLU:HB3	1:3:A:GLU:HG3	2	0.36
(3,255)	1:3:A:GLU:HB3	1:3:A:GLU:HG3	3	0.36
(3,255)	1:3:A:GLU:HB3	1:3:A:GLU:HG3	5	0.36
(3,255)	1:3:A:GLU:HB3	1:3:A:GLU:HG3	7	0.36
(3,255)	1:3:A:GLU:HB3	1:3:A:GLU:HG3	8	0.36
(3,255)	1:3:A:GLU:HB3	1:3:A:GLU:HG3	9	0.36
(3,255)	1:3:A:GLU:HB3	1:3:A:GLU:HG3	10	0.36
(3,141)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HG2	1	0.36
(2,653)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HB2	10	0.36
(2,646)	1:11:A:TRP:HE3	1:23:A:PRO:HB2	9	0.36
(2,620)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:HA2	5	0.36
(2,620)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:HA2	5	0.36
(2,620)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:HA2	5	0.36
(2,553)	1:2:A:GLU:HB2	1:3:A:GLU:HA	4	0.36
(2,365)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HA	10	0.36
(2,335)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	10	0.36
(2,312)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD11	1	0.36
(2,312)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD12	1	0.36
(2,312)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD13	1	0.36
(2,266)	1:3:A:GLU:HB3	1:3:A:GLU:HG3	1	0.36
(2,266)	1:3:A:GLU:HB3	1:3:A:GLU:HG3	2	0.36
(2,266)	1:3:A:GLU:HB3	1:3:A:GLU:HG3	3	0.36
(2,266)	1:3:A:GLU:HB3	1:3:A:GLU:HG3	5	0.36
(2,266)	1:3:A:GLU:HB3	1:3:A:GLU:HG3	7	0.36
(2,266)	1:3:A:GLU:HB3	1:3:A:GLU:HG3	8	0.36
(2,266)	1:3:A:GLU:HB3	1:3:A:GLU:HG3	9	0.36
(2,266)	1:3:A:GLU:HB3	1:3:A:GLU:HG3	10	0.36
(2,148)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HG2	1	0.36
(2,119)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	4	0.36

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,119)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	4	0.36
(2,119)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	4	0.36
(2,119)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	9	0.36
(2,119)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	9	0.36
(2,119)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	9	0.36
(1,643)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB3	3	0.36
(1,643)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB3	5	0.36
(1,628)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	10	0.36
(1,628)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	10	0.36
(1,628)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	10	0.36
(1,627)	1:7:A:LEU:HD21	1:10:A:GLN:HG2	9	0.36
(1,627)	1:7:A:LEU:HD22	1:10:A:GLN:HG2	9	0.36
(1,627)	1:7:A:LEU:HD23	1:10:A:GLN:HG2	9	0.36
(1,592)	1:11:A:TRP:HE3	1:16:A:GLY:HA3	7	0.36
(1,453)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:H	6	0.36
(1,453)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:H	6	0.36
(1,453)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:H	6	0.36
(1,453)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:H	6	0.36
(1,453)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:H	6	0.36
(1,453)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:H	6	0.36
(1,444)	1:10:A:GLN:H	1:11:A:TRP:HB2	2	0.36
(1,444)	1:10:A:GLN:H	1:11:A:TRP:HB2	7	0.36
(1,357)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD21	1	0.36
(1,357)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD22	1	0.36
(1,357)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD23	1	0.36
(1,357)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD21	5	0.36
(1,357)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD22	5	0.36
(1,357)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD23	5	0.36
(1,357)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD21	7	0.36
(1,357)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD22	7	0.36
(1,357)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD23	7	0.36
(1,310)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	9	0.36
(1,310)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	9	0.36
(1,310)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	9	0.36
(1,310)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	9	0.36
(1,310)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	9	0.36
(1,310)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	9	0.36
(1,310)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HD1	9	0.36
(1,310)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HD2	9	0.36
(1,310)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HD1	9	0.36
(1,310)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HD2	9	0.36
(1,310)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HD1	9	0.36

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,310)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HD2	9	0.36
(1,297)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HD1	6	0.36
(1,297)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HD2	6	0.36
(1,272)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG3	3	0.36
(1,247)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HD2	4	0.36
(1,247)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HD2	6	0.36
(1,247)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HD2	7	0.36
(1,247)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HD2	8	0.36
(1,221)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HD2	10	0.36
(1,221)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HD3	10	0.36
(1,221)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HD2	10	0.36
(1,221)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HD3	10	0.36
(1,152)	1:6:A:ARG:HD3	1:6:A:ARG:HE	6	0.36
(1,138)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HB2	1	0.36
(1,138)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HB2	2	0.36
(1,138)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HB2	4	0.36
(1,138)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HB2	5	0.36
(1,136)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB2	1	0.36
(1,136)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB2	5	0.36
(1,120)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	4	0.36
(1,120)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	4	0.36
(1,120)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	4	0.36
(1,120)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	5	0.36
(1,120)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	5	0.36
(1,120)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	5	0.36
(1,112)	1:24:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HG3	9	0.36
(1,77)	1:22:A:PRO:HD2	1:22:A:PRO:HG2	9	0.36
(1,54)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HD3	6	0.36
(4,45)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HA	6	0.35
(4,45)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HA	10	0.35
(4,42)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HB2	8	0.35
(4,38)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:HA2	3	0.35
(4,38)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:HA2	3	0.35
(4,38)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:HA2	3	0.35
(4,35)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HB3	3	0.35
(4,19)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:H	6	0.35
(4,19)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:H	6	0.35
(4,16)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	3	0.35
(3,573)	1:15:A:GLY:HA2	1:19:A:SER:HB3	5	0.35
(3,347)	1:11:A:TRP:HE1	1:19:A:SER:HB2	4	0.35
(3,83)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HG2	3	0.35
(2,659)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HA	6	0.35

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,659)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HA	10	0.35
(2,653)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HB2	8	0.35
(2,620)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:HA2	3	0.35
(2,620)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:HA2	3	0.35
(2,620)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:HA2	3	0.35
(2,609)	1:15:A:GLY:HA2	1:19:A:SER:HB3	5	0.35
(2,593)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HB3	3	0.35
(2,372)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:H	6	0.35
(2,372)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:H	6	0.35
(2,364)	1:11:A:TRP:HE1	1:19:A:SER:HB2	4	0.35
(2,335)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	3	0.35
(2,83)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HG2	3	0.35
(1,637)	1:2:A:GLU:HB3	1:6:A:ARG:H	2	0.35
(1,637)	1:2:A:GLU:HB3	1:6:A:ARG:H	7	0.35
(1,628)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	3	0.35
(1,628)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	3	0.35
(1,628)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	3	0.35
(1,628)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	8	0.35
(1,628)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	8	0.35
(1,628)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	8	0.35
(1,603)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG3	2	0.35
(1,603)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG3	5	0.35
(1,590)	1:2:A:GLU:HB2	1:5:A:VAL:H	5	0.35
(1,533)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HE2	9	0.35
(1,533)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HE2	9	0.35
(1,533)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HE2	9	0.35
(1,526)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HD3	2	0.35
(1,526)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HD3	2	0.35
(1,526)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HD3	2	0.35
(1,496)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD2	6	0.35
(1,496)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	6	0.35
(1,447)	1:5:A:VAL:HB	1:6:A:ARG:H	8	0.35
(1,444)	1:10:A:GLN:H	1:11:A:TRP:HB2	3	0.35
(1,444)	1:10:A:GLN:H	1:11:A:TRP:HB2	4	0.35
(1,384)	1:19:A:SER:H	1:20:A:GLY:H	3	0.35
(1,384)	1:19:A:SER:H	1:20:A:GLY:H	10	0.35
(1,357)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD21	4	0.35
(1,357)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD22	4	0.35
(1,357)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD23	4	0.35
(1,309)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB3	1	0.35
(1,309)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB3	1	0.35
(1,294)	1:10:A:GLN:HE22	1:14:A:GLU:HG2	10	0.35

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,293)	1:10:A:GLN:HE21	1:14:A:GLU:HG3	2	0.35
(1,272)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG3	5	0.35
(1,272)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG3	10	0.35
(1,247)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HD2	2	0.35
(1,247)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HD2	10	0.35
(1,237)	1:14:A:GLU:HG2	1:14:A:GLU:HG3	1	0.35
(1,237)	1:14:A:GLU:HG2	1:14:A:GLU:HG3	2	0.35
(1,237)	1:14:A:GLU:HG2	1:14:A:GLU:HG3	3	0.35
(1,237)	1:14:A:GLU:HG2	1:14:A:GLU:HG3	4	0.35
(1,234)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HG2	4	0.35
(1,221)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HD2	2	0.35
(1,221)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HD3	2	0.35
(1,221)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HD2	2	0.35
(1,221)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HD3	2	0.35
(1,221)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HD2	3	0.35
(1,221)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HD3	3	0.35
(1,221)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HD2	3	0.35
(1,221)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HD3	3	0.35
(1,221)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HD2	4	0.35
(1,221)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HD3	4	0.35
(1,221)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HD2	4	0.35
(1,221)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HD3	4	0.35
(1,221)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HD2	6	0.35
(1,221)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HD3	6	0.35
(1,221)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HD2	6	0.35
(1,221)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HD3	6	0.35
(1,184)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	1	0.35
(1,184)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	4	0.35
(1,151)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HB2	6	0.35
(1,136)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB2	2	0.35
(1,120)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	2	0.35
(1,120)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	2	0.35
(1,120)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	2	0.35
(1,90)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HG3	6	0.35
(1,90)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HG3	9	0.35
(1,77)	1:22:A:PRO:HD2	1:22:A:PRO:HG2	5	0.35
(1,38)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HG2	9	0.35
(1,34)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HG2	4	0.35
(1,34)	1:21:A:ARG:HD3	1:21:A:ARG:HG2	4	0.35
(4,45)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HA	7	0.34
(4,45)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HA	8	0.34
(4,21)	1:7:A:LEU:HB3	1:8:A:TYR:H	10	0.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,13)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD11	4	0.34
(4,13)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD12	4	0.34
(4,13)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD13	4	0.34
(4,2)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	3	0.34
(4,2)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	3	0.34
(4,2)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	3	0.34
(4,2)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	8	0.34
(4,2)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	8	0.34
(4,2)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	8	0.34
(3,294)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HG	9	0.34
(3,294)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HG	9	0.34
(3,225)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HG3	6	0.34
(3,225)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HG3	10	0.34
(2,659)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HA	7	0.34
(2,659)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HA	8	0.34
(2,435)	1:7:A:LEU:HB3	1:8:A:TYR:H	10	0.34
(2,312)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD11	4	0.34
(2,312)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD12	4	0.34
(2,312)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD13	4	0.34
(2,306)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HG	9	0.34
(2,306)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HG	9	0.34
(2,235)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HG3	6	0.34
(2,235)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HG3	10	0.34
(2,119)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	3	0.34
(2,119)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	3	0.34
(2,119)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	3	0.34
(2,119)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	8	0.34
(2,119)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	8	0.34
(2,119)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	8	0.34
(1,637)	1:2:A:GLU:HB3	1:6:A:ARG:H	8	0.34
(1,621)	1:1:A:GLU:HB2	1:1:A:GLU:HG2	2	0.34
(1,621)	1:1:A:GLU:HB3	1:1:A:GLU:HG2	2	0.34
(1,621)	1:1:A:GLU:HB2	1:1:A:GLU:HG2	8	0.34
(1,621)	1:1:A:GLU:HB3	1:1:A:GLU:HG2	8	0.34
(1,603)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG3	4	0.34
(1,600)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HG3	1	0.34
(1,592)	1:11:A:TRP:HE3	1:16:A:GLY:HA3	8	0.34
(1,537)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD21	3	0.34
(1,537)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD22	3	0.34
(1,537)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD23	3	0.34
(1,537)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD21	3	0.34
(1,537)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD22	3	0.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,537)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD23	3	0.34
(1,489)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:HB3	9	0.34
(1,488)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HD2	9	0.34
(1,444)	1:10:A:GLN:H	1:11:A:TRP:HB2	1	0.34
(1,438)	1:18:A:SER:HA	1:20:A:GLY:H	4	0.34
(1,384)	1:19:A:SER:H	1:20:A:GLY:H	1	0.34
(1,384)	1:19:A:SER:H	1:20:A:GLY:H	7	0.34
(1,384)	1:19:A:SER:H	1:20:A:GLY:H	9	0.34
(1,337)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD2	10	0.34
(1,337)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD3	10	0.34
(1,309)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB3	4	0.34
(1,309)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB3	4	0.34
(1,293)	1:10:A:GLN:HE21	1:14:A:GLU:HG3	1	0.34
(1,290)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HB2	1	0.34
(1,290)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HB3	1	0.34
(1,238)	1:14:A:GLU:HB2	1:14:A:GLU:HG2	6	0.34
(1,238)	1:14:A:GLU:HB3	1:14:A:GLU:HG2	6	0.34
(1,238)	1:14:A:GLU:HB2	1:14:A:GLU:HG2	10	0.34
(1,238)	1:14:A:GLU:HB3	1:14:A:GLU:HG2	10	0.34
(1,221)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HD2	5	0.34
(1,221)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HD3	5	0.34
(1,221)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HD2	5	0.34
(1,221)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HD3	5	0.34
(1,221)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HD2	7	0.34
(1,221)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HD3	7	0.34
(1,221)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HD2	7	0.34
(1,221)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HD3	7	0.34
(1,221)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HD2	8	0.34
(1,221)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HD3	8	0.34
(1,221)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HD2	8	0.34
(1,221)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HD3	8	0.34
(1,215)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HG2	9	0.34
(1,184)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	2	0.34
(1,184)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	7	0.34
(1,152)	1:6:A:ARG:HD3	1:6:A:ARG:HE	10	0.34
(1,138)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HB2	9	0.34
(1,123)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HB3	6	0.34
(1,123)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HB3	10	0.34
(1,77)	1:22:A:PRO:HD2	1:22:A:PRO:HG2	2	0.34
(1,77)	1:22:A:PRO:HD2	1:22:A:PRO:HG2	3	0.34
(1,77)	1:22:A:PRO:HD2	1:22:A:PRO:HG2	4	0.34
(1,77)	1:22:A:PRO:HD2	1:22:A:PRO:HG2	6	0.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,77)	1:22:A:PRO:HD2	1:22:A:PRO:HG2	7	0.34
(1,77)	1:22:A:PRO:HD2	1:22:A:PRO:HG2	10	0.34
(1,48)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG2	5	0.34
(1,48)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG2	8	0.34
(1,34)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HG2	5	0.34
(1,34)	1:21:A:ARG:HD3	1:21:A:ARG:HG2	5	0.34
(1,34)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HG2	9	0.34
(1,34)	1:21:A:ARG:HD3	1:21:A:ARG:HG2	9	0.34
(4,42)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HB2	6	0.33
(4,35)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HB3	8	0.33
(4,27)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:HA	9	0.33
(4,21)	1:7:A:LEU:HB3	1:8:A:TYR:H	6	0.33
(4,13)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD11	2	0.33
(4,13)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD12	2	0.33
(4,13)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD13	2	0.33
(4,13)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD11	9	0.33
(4,13)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD12	9	0.33
(4,13)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD13	9	0.33
(3,539)	1:2:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:H	10	0.33
(3,292)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG2	5	0.33
(3,292)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG2	5	0.33
(3,291)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB3	9	0.33
(3,291)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB3	9	0.33
(3,274)	1:19:A:SER:H	1:19:A:SER:HB2	5	0.33
(2,653)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HB2	6	0.33
(2,593)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HB3	8	0.33
(2,572)	1:2:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:H	10	0.33
(2,486)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:HA	9	0.33
(2,435)	1:7:A:LEU:HB3	1:8:A:TYR:H	6	0.33
(2,312)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD11	2	0.33
(2,312)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD12	2	0.33
(2,312)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD13	2	0.33
(2,312)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD11	9	0.33
(2,312)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD12	9	0.33
(2,312)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD13	9	0.33
(2,304)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG2	5	0.33
(2,304)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG2	5	0.33
(2,303)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB3	9	0.33
(2,303)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB3	9	0.33
(2,286)	1:19:A:SER:H	1:19:A:SER:HB2	5	0.33
(1,643)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB3	8	0.33
(1,637)	1:2:A:GLU:HB3	1:6:A:ARG:H	10	0.33

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,628)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	6	0.33
(1,628)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	6	0.33
(1,628)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	6	0.33
(1,621)	1:1:A:GLU:HB2	1:1:A:GLU:HG2	3	0.33
(1,621)	1:1:A:GLU:HB3	1:1:A:GLU:HG2	3	0.33
(1,621)	1:1:A:GLU:HB2	1:1:A:GLU:HG2	4	0.33
(1,621)	1:1:A:GLU:HB3	1:1:A:GLU:HG2	4	0.33
(1,603)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG3	1	0.33
(1,602)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG2	2	0.33
(1,592)	1:11:A:TRP:HE3	1:16:A:GLY:HA3	9	0.33
(1,537)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD21	6	0.33
(1,537)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD22	6	0.33
(1,537)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD23	6	0.33
(1,537)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD21	6	0.33
(1,537)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD22	6	0.33
(1,537)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD23	6	0.33
(1,490)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB2	5	0.33
(1,458)	1:19:A:SER:HB3	1:21:A:ARG:H	10	0.33
(1,444)	1:10:A:GLN:H	1:11:A:TRP:HB2	10	0.33
(1,438)	1:18:A:SER:HA	1:20:A:GLY:H	6	0.33
(1,357)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD21	2	0.33
(1,357)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD22	2	0.33
(1,357)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD23	2	0.33
(1,357)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD21	8	0.33
(1,357)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD22	8	0.33
(1,357)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD23	8	0.33
(1,290)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HB2	7	0.33
(1,290)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HB3	7	0.33
(1,272)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG3	2	0.33
(1,247)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HD2	3	0.33
(1,240)	1:14:A:GLU:H	1:14:A:GLU:HG3	1	0.33
(1,234)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HG2	3	0.33
(1,184)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	5	0.33
(1,123)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HB3	3	0.33
(1,123)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HB3	7	0.33
(1,123)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HB3	8	0.33
(1,114)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	1	0.33
(1,90)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HG3	8	0.33
(1,56)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HD2	10	0.33
(1,50)	1:6:A:ARG:HD3	1:6:A:ARG:HG3	2	0.33
(1,34)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HG2	7	0.33
(1,34)	1:21:A:ARG:HD3	1:21:A:ARG:HG2	7	0.33

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,35)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HB3	10	0.32
(4,32)	1:10:A:GLN:H	1:12:A:LEU:H	9	0.32
(4,21)	1:7:A:LEU:HB3	1:8:A:TYR:H	9	0.32
(4,19)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:H	8	0.32
(4,19)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:H	8	0.32
(3,609)	1:14:A:GLU:HG3	1:15:A:GLY:H	8	0.32
(3,568)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HB3	7	0.32
(3,539)	1:2:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:H	4	0.32
(3,347)	1:11:A:TRP:HE1	1:19:A:SER:HB2	8	0.32
(3,225)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HG3	9	0.32
(3,83)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HG2	9	0.32
(3,83)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HG2	10	0.32
(2,650)	1:14:A:GLU:HG3	1:15:A:GLY:H	8	0.32
(2,604)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HB3	7	0.32
(2,593)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HB3	10	0.32
(2,572)	1:2:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:H	4	0.32
(2,564)	1:10:A:GLN:H	1:12:A:LEU:H	9	0.32
(2,435)	1:7:A:LEU:HB3	1:8:A:TYR:H	9	0.32
(2,372)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:H	8	0.32
(2,372)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:H	8	0.32
(2,364)	1:11:A:TRP:HE1	1:19:A:SER:HB2	8	0.32
(2,235)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HG3	9	0.32
(2,83)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HG2	9	0.32
(2,83)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HG2	10	0.32
(1,627)	1:7:A:LEU:HD21	1:10:A:GLN:HG2	7	0.32
(1,627)	1:7:A:LEU:HD22	1:10:A:GLN:HG2	7	0.32
(1,627)	1:7:A:LEU:HD23	1:10:A:GLN:HG2	7	0.32
(1,625)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HG2	4	0.32
(1,625)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HG2	4	0.32
(1,625)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HG2	7	0.32
(1,625)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HG2	7	0.32
(1,602)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG2	5	0.32
(1,528)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB3	9	0.32
(1,528)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB3	9	0.32
(1,528)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB3	9	0.32
(1,528)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HB3	9	0.32
(1,528)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HB3	9	0.32
(1,528)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HB3	9	0.32
(1,526)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HD3	1	0.32
(1,526)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HD3	1	0.32
(1,526)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HD3	1	0.32
(1,520)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD11	2	0.32

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,520)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD12	2	0.32
(1,520)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD13	2	0.32
(1,379)	1:15:A:GLY:H	1:16:A:GLY:H	1	0.32
(1,357)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD21	6	0.32
(1,357)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD22	6	0.32
(1,357)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD23	6	0.32
(1,356)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD11	3	0.32
(1,356)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD12	3	0.32
(1,356)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD13	3	0.32
(1,348)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB2	6	0.32
(1,337)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD2	3	0.32
(1,337)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD3	3	0.32
(1,309)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB3	8	0.32
(1,309)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB3	8	0.32
(1,238)	1:14:A:GLU:HB2	1:14:A:GLU:HG2	5	0.32
(1,238)	1:14:A:GLU:HB3	1:14:A:GLU:HG2	5	0.32
(1,203)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HB3	2	0.32
(1,203)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HB3	4	0.32
(1,132)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD11	8	0.32
(1,132)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD12	8	0.32
(1,132)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD13	8	0.32
(1,123)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HB3	9	0.32
(1,114)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	2	0.32
(1,100)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD3	1	0.32
(1,100)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD3	2	0.32
(1,100)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD3	5	0.32
(1,90)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HG3	3	0.32
(1,90)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HG3	10	0.32
(1,53)	1:6:A:ARG:HD3	1:6:A:ARG:HG2	3	0.32
(4,45)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HA	3	0.31
(4,45)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HA	9	0.31
(4,35)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HB3	6	0.31
(4,32)	1:10:A:GLN:H	1:12:A:LEU:H	5	0.31
(4,22)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:H	5	0.31
(4,22)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:H	5	0.31
(4,21)	1:7:A:LEU:HB3	1:8:A:TYR:H	3	0.31
(4,21)	1:7:A:LEU:HB3	1:8:A:TYR:H	8	0.31
(4,19)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:H	7	0.31
(4,19)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:H	7	0.31
(4,13)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD11	5	0.31
(4,13)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD12	5	0.31
(4,13)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD13	5	0.31

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,541)	1:6:A:ARG:HB3	1:7:A:LEU:H	6	0.31
(3,523)	1:2:A:GLU:HB2	1:3:A:GLU:HA	6	0.31
(3,507)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	6	0.31
(3,507)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	6	0.31
(3,507)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	6	0.31
(3,507)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG21	6	0.31
(3,507)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG22	6	0.31
(3,507)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG23	6	0.31
(3,443)	1:23:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	9	0.31
(2,659)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HA	3	0.31
(2,659)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HA	9	0.31
(2,593)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HB3	6	0.31
(2,574)	1:6:A:ARG:HB3	1:7:A:LEU:H	6	0.31
(2,564)	1:10:A:GLN:H	1:12:A:LEU:H	5	0.31
(2,553)	1:2:A:GLU:HB2	1:3:A:GLU:HA	6	0.31
(2,535)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	6	0.31
(2,535)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	6	0.31
(2,535)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	6	0.31
(2,535)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG21	6	0.31
(2,535)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG22	6	0.31
(2,535)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG23	6	0.31
(2,469)	1:23:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	9	0.31
(2,446)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:H	5	0.31
(2,446)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:H	5	0.31
(2,435)	1:7:A:LEU:HB3	1:8:A:TYR:H	3	0.31
(2,435)	1:7:A:LEU:HB3	1:8:A:TYR:H	8	0.31
(2,372)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:H	7	0.31
(2,372)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:H	7	0.31
(2,312)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD11	5	0.31
(2,312)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD12	5	0.31
(2,312)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD13	5	0.31
(1,447)	1:5:A:VAL:HB	1:6:A:ARG:H	1	0.31
(1,438)	1:18:A:SER:HA	1:20:A:GLY:H	2	0.31
(1,384)	1:19:A:SER:H	1:20:A:GLY:H	6	0.31
(1,357)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD21	3	0.31
(1,357)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD22	3	0.31
(1,357)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD23	3	0.31
(1,337)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD2	8	0.31
(1,337)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD3	8	0.31
(1,290)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HB2	8	0.31
(1,290)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HB3	8	0.31
(1,290)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HB2	9	0.31

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,290)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HB3	9	0.31
(1,290)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HB2	10	0.31
(1,290)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HB3	10	0.31
(1,236)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HB2	5	0.31
(1,236)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HB3	5	0.31
(1,234)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HG2	1	0.31
(1,218)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HE2	1	0.31
(1,218)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HE2	1	0.31
(1,218)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HE2	3	0.31
(1,218)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HE2	3	0.31
(1,218)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HE2	8	0.31
(1,218)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HE2	8	0.31
(1,218)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HE2	10	0.31
(1,218)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HE2	10	0.31
(1,203)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HB3	1	0.31
(1,203)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HB3	3	0.31
(1,203)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HB3	5	0.31
(1,203)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HB3	6	0.31
(1,203)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HB3	7	0.31
(1,203)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HB3	8	0.31
(1,203)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HB3	9	0.31
(1,203)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HB3	10	0.31
(1,184)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	6	0.31
(1,184)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	9	0.31
(1,184)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	10	0.31
(1,152)	1:6:A:ARG:HD3	1:6:A:ARG:HE	8	0.31
(1,116)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HB2	4	0.31
(1,116)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HB3	4	0.31
(1,114)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	4	0.31
(1,114)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	5	0.31
(1,90)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HG3	1	0.31
(1,90)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HG3	2	0.31
(1,90)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HG3	4	0.31
(1,90)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HG3	5	0.31
(1,63)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HG3	6	0.31
(1,61)	1:6:A:ARG:HG2	1:6:A:ARG:HG3	3	0.31
(1,57)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HD3	2	0.31
(1,56)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HD2	1	0.31
(1,35)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HG3	6	0.31
(1,35)	1:21:A:ARG:HD3	1:21:A:ARG:HG3	6	0.31
(4,32)	1:10:A:GLN:H	1:12:A:LEU:H	1	0.3
(4,32)	1:10:A:GLN:H	1:12:A:LEU:H	2	0.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,32)	1:10:A:GLN:H	1:12:A:LEU:H	3	0.3
(4,32)	1:10:A:GLN:H	1:12:A:LEU:H	4	0.3
(4,32)	1:10:A:GLN:H	1:12:A:LEU:H	6	0.3
(4,32)	1:10:A:GLN:H	1:12:A:LEU:H	8	0.3
(4,32)	1:10:A:GLN:H	1:12:A:LEU:H	10	0.3
(4,7)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	3	0.3
(4,7)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	3	0.3
(4,7)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	9	0.3
(4,7)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	9	0.3
(3,596)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD11	5	0.3
(3,596)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD12	5	0.3
(3,596)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD13	5	0.3
(3,596)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD11	5	0.3
(3,596)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD12	5	0.3
(3,596)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD13	5	0.3
(3,596)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD11	5	0.3
(3,596)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD12	5	0.3
(3,596)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD13	5	0.3
(3,539)	1:2:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:H	8	0.3
(3,474)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HG2	8	0.3
(3,474)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HG3	8	0.3
(3,347)	1:11:A:TRP:HE1	1:19:A:SER:HB2	6	0.3
(3,288)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HA	5	0.3
(3,288)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HA	5	0.3
(3,83)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HG2	6	0.3
(3,83)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HG2	7	0.3
(2,635)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD11	5	0.3
(2,635)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD12	5	0.3
(2,635)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD13	5	0.3
(2,635)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD11	5	0.3
(2,635)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD12	5	0.3
(2,635)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD13	5	0.3
(2,635)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD11	5	0.3
(2,635)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD12	5	0.3
(2,635)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD13	5	0.3
(2,572)	1:2:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:H	8	0.3
(2,564)	1:10:A:GLN:H	1:12:A:LEU:H	1	0.3
(2,564)	1:10:A:GLN:H	1:12:A:LEU:H	2	0.3
(2,564)	1:10:A:GLN:H	1:12:A:LEU:H	3	0.3
(2,564)	1:10:A:GLN:H	1:12:A:LEU:H	4	0.3
(2,564)	1:10:A:GLN:H	1:12:A:LEU:H	6	0.3
(2,564)	1:10:A:GLN:H	1:12:A:LEU:H	8	0.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,564)	1:10:A:GLN:H	1:12:A:LEU:H	10	0.3
(2,501)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HG2	8	0.3
(2,501)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HG3	8	0.3
(2,364)	1:11:A:TRP:HE1	1:19:A:SER:HB2	6	0.3
(2,300)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HA	5	0.3
(2,300)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HA	5	0.3
(2,146)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	3	0.3
(2,146)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	3	0.3
(2,146)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	9	0.3
(2,146)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	9	0.3
(2,83)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HG2	6	0.3
(2,83)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HG2	7	0.3
(1,614)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HB2	4	0.3
(1,599)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HG	9	0.3
(1,592)	1:11:A:TRP:HE3	1:16:A:GLY:HA3	1	0.3
(1,590)	1:2:A:GLU:HB2	1:5:A:VAL:H	3	0.3
(1,496)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD2	4	0.3
(1,496)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	4	0.3
(1,474)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:H	4	0.3
(1,444)	1:10:A:GLN:H	1:11:A:TRP:HB2	8	0.3
(1,438)	1:18:A:SER:HA	1:20:A:GLY:H	10	0.3
(1,379)	1:15:A:GLY:H	1:16:A:GLY:H	4	0.3
(1,379)	1:15:A:GLY:H	1:16:A:GLY:H	7	0.3
(1,357)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD21	10	0.3
(1,357)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD22	10	0.3
(1,357)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD23	10	0.3
(1,356)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD11	8	0.3
(1,356)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD12	8	0.3
(1,356)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD13	8	0.3
(1,337)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD2	6	0.3
(1,337)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD3	6	0.3
(1,337)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD2	9	0.3
(1,337)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD3	9	0.3
(1,334)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HA	4	0.3
(1,317)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB2	5	0.3
(1,317)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB2	5	0.3
(1,302)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG2	5	0.3
(1,302)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG2	5	0.3
(1,302)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG2	7	0.3
(1,302)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG2	7	0.3
(1,290)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HB2	5	0.3
(1,290)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HB3	5	0.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,255)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HB	5	0.3
(1,254)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HB3	1	0.3
(1,254)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HB3	2	0.3
(1,254)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HB3	3	0.3
(1,254)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HB3	4	0.3
(1,254)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HB3	5	0.3
(1,254)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HB3	6	0.3
(1,254)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HB3	7	0.3
(1,254)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HB3	8	0.3
(1,254)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HB3	9	0.3
(1,254)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HB3	10	0.3
(1,206)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HB2	2	0.3
(1,206)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HB2	9	0.3
(1,206)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HB2	10	0.3
(1,184)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	3	0.3
(1,149)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HE	2	0.3
(1,132)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD11	3	0.3
(1,132)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD12	3	0.3
(1,132)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD13	3	0.3
(1,116)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HB2	7	0.3
(1,116)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HB3	7	0.3
(1,114)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	7	0.3
(1,90)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HG3	7	0.3
(1,77)	1:22:A:PRO:HD2	1:22:A:PRO:HG2	8	0.3
(1,61)	1:6:A:ARG:HG2	1:6:A:ARG:HG3	1	0.3
(1,61)	1:6:A:ARG:HG2	1:6:A:ARG:HG3	2	0.3
(1,61)	1:6:A:ARG:HG2	1:6:A:ARG:HG3	5	0.3
(1,61)	1:6:A:ARG:HG2	1:6:A:ARG:HG3	6	0.3
(1,61)	1:6:A:ARG:HG2	1:6:A:ARG:HG3	7	0.3
(1,61)	1:6:A:ARG:HG2	1:6:A:ARG:HG3	8	0.3
(1,61)	1:6:A:ARG:HG2	1:6:A:ARG:HG3	9	0.3
(1,61)	1:6:A:ARG:HG2	1:6:A:ARG:HG3	10	0.3
(1,53)	1:6:A:ARG:HD3	1:6:A:ARG:HG2	4	0.3
(4,45)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HA	2	0.29
(4,34)	1:5:A:VAL:HA	1:6:A:ARG:H	5	0.29
(4,32)	1:10:A:GLN:H	1:12:A:LEU:H	7	0.29
(4,30)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG11	4	0.29
(4,30)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG12	4	0.29
(4,30)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG13	4	0.29
(4,30)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG11	4	0.29
(4,30)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG12	4	0.29
(4,30)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG13	4	0.29

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,30)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG11	4	0.29
(4,30)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG12	4	0.29
(4,30)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG13	4	0.29
(4,30)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	4	0.29
(4,30)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	4	0.29
(4,30)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	4	0.29
(4,30)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	4	0.29
(4,30)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	4	0.29
(4,30)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	4	0.29
(4,30)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	4	0.29
(4,30)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	4	0.29
(4,30)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	4	0.29
(4,13)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD11	10	0.29
(4,13)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD12	10	0.29
(4,13)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD13	10	0.29
(4,2)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	7	0.29
(4,2)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	7	0.29
(4,2)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	7	0.29
(3,541)	1:6:A:ARG:HB3	1:7:A:LEU:H	4	0.29
(3,474)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HG2	4	0.29
(3,474)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HG3	4	0.29
(3,292)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG2	2	0.29
(3,292)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG2	2	0.29
(3,292)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG2	4	0.29
(3,292)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG2	4	0.29
(3,264)	1:2:A:GLU:HB2	1:2:A:GLU:HG3	4	0.29
(2,659)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HA	2	0.29
(2,582)	1:5:A:VAL:HA	1:6:A:ARG:H	5	0.29
(2,574)	1:6:A:ARG:HB3	1:7:A:LEU:H	4	0.29
(2,564)	1:10:A:GLN:H	1:12:A:LEU:H	7	0.29
(2,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG11	4	0.29
(2,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG12	4	0.29
(2,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG13	4	0.29
(2,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG11	4	0.29
(2,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG12	4	0.29
(2,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG13	4	0.29
(2,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG11	4	0.29
(2,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG12	4	0.29
(2,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG13	4	0.29
(2,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	4	0.29
(2,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	4	0.29
(2,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	4	0.29

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	4	0.29
(2,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	4	0.29
(2,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	4	0.29
(2,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	4	0.29
(2,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	4	0.29
(2,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	4	0.29
(2,501)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HG2	4	0.29
(2,501)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HG3	4	0.29
(2,312)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD11	10	0.29
(2,312)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD12	10	0.29
(2,312)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD13	10	0.29
(2,304)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG2	2	0.29
(2,304)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG2	2	0.29
(2,304)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG2	4	0.29
(2,304)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG2	4	0.29
(2,276)	1:2:A:GLU:HB2	1:2:A:GLU:HG3	4	0.29
(2,119)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	7	0.29
(2,119)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	7	0.29
(2,119)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	7	0.29
(1,655)	1:3:A:GLU:HA	1:6:A:ARG:HD3	10	0.29
(1,614)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HB2	2	0.29
(1,526)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HD3	3	0.29
(1,526)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HD3	3	0.29
(1,526)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HD3	3	0.29
(1,526)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HD3	9	0.29
(1,526)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HD3	9	0.29
(1,526)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HD3	9	0.29
(1,496)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD2	5	0.29
(1,496)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	5	0.29
(1,447)	1:5:A:VAL:HB	1:6:A:ARG:H	3	0.29
(1,447)	1:5:A:VAL:HB	1:6:A:ARG:H	7	0.29
(1,379)	1:15:A:GLY:H	1:16:A:GLY:H	2	0.29
(1,379)	1:15:A:GLY:H	1:16:A:GLY:H	8	0.29
(1,317)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB2	9	0.29
(1,317)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB2	9	0.29
(1,310)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	10	0.29
(1,310)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	10	0.29
(1,310)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	10	0.29
(1,310)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	10	0.29
(1,310)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	10	0.29
(1,310)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	10	0.29
(1,310)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HD1	10	0.29

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,310)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HD2	10	0.29
(1,310)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HD1	10	0.29
(1,310)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HD2	10	0.29
(1,310)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HD1	10	0.29
(1,310)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HD2	10	0.29
(1,309)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB3	5	0.29
(1,309)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB3	5	0.29
(1,290)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HB2	2	0.29
(1,290)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HB3	2	0.29
(1,255)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HB	8	0.29
(1,236)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HB2	9	0.29
(1,236)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HB3	9	0.29
(1,220)	1:13:A:LYS:HE2	1:13:A:LYS:HG3	9	0.29
(1,206)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HB2	1	0.29
(1,206)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HB2	4	0.29
(1,206)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HB2	7	0.29
(1,206)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HB2	8	0.29
(1,184)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	8	0.29
(1,114)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	9	0.29
(1,63)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HG3	9	0.29
(1,61)	1:6:A:ARG:HG2	1:6:A:ARG:HG3	4	0.29
(1,52)	1:6:A:ARG:HD2	1:6:A:ARG:HG2	2	0.29
(1,50)	1:6:A:ARG:HD3	1:6:A:ARG:HG3	7	0.29
(1,38)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HG2	3	0.29
(1,12)	1:20:A:GLY:H	1:20:A:GLY:HA2	1	0.29
(1,12)	1:20:A:GLY:H	1:20:A:GLY:HA2	6	0.29
(1,12)	1:20:A:GLY:H	1:20:A:GLY:HA2	7	0.29
(4,35)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HB3	9	0.28
(4,34)	1:5:A:VAL:HA	1:6:A:ARG:H	2	0.28
(4,22)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:H	4	0.28
(4,22)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:H	4	0.28
(4,7)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	1	0.28
(4,7)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	1	0.28
(4,7)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	6	0.28
(4,7)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	6	0.28
(4,7)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	7	0.28
(4,7)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	7	0.28
(4,7)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	8	0.28
(4,7)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	8	0.28
(4,7)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	10	0.28
(4,7)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	10	0.28
(3,474)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HG2	10	0.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,474)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HG3	10	0.28
(3,292)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG2	1	0.28
(3,292)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG2	1	0.28
(3,279)	1:10:A:GLN:HE21	1:14:A:GLU:HG2	2	0.28
(3,264)	1:2:A:GLU:HB2	1:2:A:GLU:HG3	2	0.28
(3,264)	1:2:A:GLU:HB2	1:2:A:GLU:HG3	3	0.28
(3,264)	1:2:A:GLU:HB2	1:2:A:GLU:HG3	5	0.28
(3,264)	1:2:A:GLU:HB2	1:2:A:GLU:HG3	9	0.28
(3,264)	1:2:A:GLU:HB2	1:2:A:GLU:HG3	10	0.28
(3,83)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HG2	4	0.28
(3,83)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HG2	5	0.28
(2,593)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HB3	9	0.28
(2,582)	1:5:A:VAL:HA	1:6:A:ARG:H	2	0.28
(2,501)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HG2	10	0.28
(2,501)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HG3	10	0.28
(2,446)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:H	4	0.28
(2,446)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:H	4	0.28
(2,304)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG2	1	0.28
(2,304)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG2	1	0.28
(2,291)	1:10:A:GLN:HE21	1:14:A:GLU:HG2	2	0.28
(2,276)	1:2:A:GLU:HB2	1:2:A:GLU:HG3	2	0.28
(2,276)	1:2:A:GLU:HB2	1:2:A:GLU:HG3	3	0.28
(2,276)	1:2:A:GLU:HB2	1:2:A:GLU:HG3	5	0.28
(2,276)	1:2:A:GLU:HB2	1:2:A:GLU:HG3	9	0.28
(2,276)	1:2:A:GLU:HB2	1:2:A:GLU:HG3	10	0.28
(2,146)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	1	0.28
(2,146)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	1	0.28
(2,146)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	6	0.28
(2,146)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	6	0.28
(2,146)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	7	0.28
(2,146)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	7	0.28
(2,146)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	8	0.28
(2,146)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	8	0.28
(2,146)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	10	0.28
(2,146)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	10	0.28
(2,83)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HG2	4	0.28
(2,83)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HG2	5	0.28
(1,643)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB3	9	0.28
(1,607)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HD3	3	0.28
(1,502)	1:11:A:TRP:HB3	1:24:A:PRO:HG3	10	0.28
(1,496)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD2	8	0.28
(1,496)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	8	0.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,493)	1:21:A:ARG:HB2	1:22:A:PRO:HD2	6	0.28
(1,493)	1:21:A:ARG:HB3	1:22:A:PRO:HD2	6	0.28
(1,493)	1:21:A:ARG:HB2	1:22:A:PRO:HD2	10	0.28
(1,493)	1:21:A:ARG:HB3	1:22:A:PRO:HD2	10	0.28
(1,447)	1:5:A:VAL:HB	1:6:A:ARG:H	9	0.28
(1,438)	1:18:A:SER:HA	1:20:A:GLY:H	3	0.28
(1,356)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD11	6	0.28
(1,356)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD12	6	0.28
(1,356)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD13	6	0.28
(1,356)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD11	7	0.28
(1,356)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD12	7	0.28
(1,356)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD13	7	0.28
(1,337)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD2	2	0.28
(1,337)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD3	2	0.28
(1,334)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HA	3	0.28
(1,330)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HG2	8	0.28
(1,294)	1:10:A:GLN:HE22	1:14:A:GLU:HG2	7	0.28
(1,238)	1:14:A:GLU:HB2	1:14:A:GLU:HG2	1	0.28
(1,238)	1:14:A:GLU:HB3	1:14:A:GLU:HG2	1	0.28
(1,236)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HB2	6	0.28
(1,236)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HB3	6	0.28
(1,206)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HB2	6	0.28
(1,115)	1:25:A:SER:HA	1:25:A:SER:HB2	6	0.28
(1,115)	1:25:A:SER:HA	1:25:A:SER:HB3	6	0.28
(1,100)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD3	4	0.28
(1,100)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD3	6	0.28
(1,95)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD2	9	0.28
(1,95)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD3	9	0.28
(1,92)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	7	0.28
(1,92)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD3	7	0.28
(1,81)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HB3	1	0.28
(1,81)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HB3	2	0.28
(1,81)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HB3	8	0.28
(1,81)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HB3	10	0.28
(1,77)	1:22:A:PRO:HD2	1:22:A:PRO:HG2	1	0.28
(1,53)	1:6:A:ARG:HD3	1:6:A:ARG:HG2	7	0.28
(1,12)	1:20:A:GLY:H	1:20:A:GLY:HA2	2	0.28
(1,12)	1:20:A:GLY:H	1:20:A:GLY:HA2	9	0.28
(4,45)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HA	4	0.27
(4,45)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HA	5	0.27
(4,34)	1:5:A:VAL:HA	1:6:A:ARG:H	1	0.27
(4,7)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	2	0.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,7)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	2	0.27
(4,7)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	4	0.27
(4,7)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	4	0.27
(3,474)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HG2	3	0.27
(3,474)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HG3	3	0.27
(3,264)	1:2:A:GLU:HB2	1:2:A:GLU:HG3	7	0.27
(3,264)	1:2:A:GLU:HB2	1:2:A:GLU:HG3	8	0.27
(3,83)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HG2	2	0.27
(2,659)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HA	4	0.27
(2,659)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HA	5	0.27
(2,582)	1:5:A:VAL:HA	1:6:A:ARG:H	1	0.27
(2,501)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HG2	3	0.27
(2,501)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HG3	3	0.27
(2,276)	1:2:A:GLU:HB2	1:2:A:GLU:HG3	7	0.27
(2,276)	1:2:A:GLU:HB2	1:2:A:GLU:HG3	8	0.27
(2,146)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	2	0.27
(2,146)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	2	0.27
(2,146)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	4	0.27
(2,146)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	4	0.27
(2,83)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HG2	2	0.27
(1,637)	1:2:A:GLU:HB3	1:6:A:ARG:H	1	0.27
(1,614)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HB2	1	0.27
(1,613)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HG3	4	0.27
(1,607)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HD3	2	0.27
(1,536)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	5	0.27
(1,536)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	5	0.27
(1,536)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	5	0.27
(1,528)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB3	8	0.27
(1,528)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB3	8	0.27
(1,528)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB3	8	0.27
(1,528)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HB3	8	0.27
(1,528)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HB3	8	0.27
(1,528)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HB3	8	0.27
(1,506)	1:21:A:ARG:HG2	1:21:A:ARG:HG3	7	0.27
(1,493)	1:21:A:ARG:HB2	1:22:A:PRO:HD2	2	0.27
(1,493)	1:21:A:ARG:HB3	1:22:A:PRO:HD2	2	0.27
(1,458)	1:19:A:SER:HB3	1:21:A:ARG:H	2	0.27
(1,458)	1:19:A:SER:HB3	1:21:A:ARG:H	8	0.27
(1,453)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:H	3	0.27
(1,453)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:H	3	0.27
(1,453)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:H	3	0.27
(1,453)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:H	3	0.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,453)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:H	3	0.27
(1,453)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:H	3	0.27
(1,396)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:H	9	0.27
(1,337)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD2	7	0.27
(1,337)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD3	7	0.27
(1,307)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HG	3	0.27
(1,307)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HG	3	0.27
(1,289)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HG2	8	0.27
(1,289)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HG3	8	0.27
(1,284)	1:19:A:SER:HB2	1:19:A:SER:HB3	1	0.27
(1,284)	1:19:A:SER:HB2	1:19:A:SER:HB3	5	0.27
(1,284)	1:19:A:SER:HB2	1:19:A:SER:HB3	7	0.27
(1,255)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HB	2	0.27
(1,255)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HB	7	0.27
(1,238)	1:14:A:GLU:HB2	1:14:A:GLU:HG2	3	0.27
(1,238)	1:14:A:GLU:HB3	1:14:A:GLU:HG2	3	0.27
(1,236)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HB2	1	0.27
(1,236)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HB3	1	0.27
(1,236)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HB2	3	0.27
(1,236)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HB3	3	0.27
(1,236)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HB2	10	0.27
(1,236)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HB3	10	0.27
(1,206)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HB2	3	0.27
(1,206)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HB2	5	0.27
(1,193)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD21	9	0.27
(1,193)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD22	9	0.27
(1,193)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD23	9	0.27
(1,131)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD21	1	0.27
(1,131)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD22	1	0.27
(1,131)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD23	1	0.27
(1,103)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HB3	7	0.27
(1,103)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HB3	9	0.27
(1,81)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HB3	3	0.27
(1,81)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HB3	4	0.27
(1,81)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HB3	5	0.27
(1,81)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HB3	6	0.27
(1,81)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HB3	7	0.27
(1,81)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HB3	9	0.27
(1,53)	1:6:A:ARG:HD3	1:6:A:ARG:HG2	8	0.27
(1,52)	1:6:A:ARG:HD2	1:6:A:ARG:HG2	7	0.27
(1,35)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HG3	1	0.27
(1,35)	1:21:A:ARG:HD3	1:21:A:ARG:HG3	1	0.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,29)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HB2	3	0.27
(1,29)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HB3	3	0.27
(1,29)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HB2	4	0.27
(1,29)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HB3	4	0.27
(1,29)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HB2	10	0.27
(1,29)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HB3	10	0.27
(1,12)	1:20:A:GLY:H	1:20:A:GLY:HA2	3	0.27
(1,12)	1:20:A:GLY:H	1:20:A:GLY:HA2	4	0.27
(1,12)	1:20:A:GLY:H	1:20:A:GLY:HA2	8	0.27
(1,12)	1:20:A:GLY:H	1:20:A:GLY:HA2	10	0.27
(4,39)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HG3	4	0.26
(4,39)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HG3	4	0.26
(4,39)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HG3	4	0.26
(4,39)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HG3	5	0.26
(4,39)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HG3	5	0.26
(4,39)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HG3	5	0.26
(4,33)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:H	3	0.26
(3,605)	1:11:A:TRP:HE3	1:23:A:PRO:HB2	6	0.26
(3,539)	1:2:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:H	5	0.26
(3,504)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA2	9	0.26
(3,504)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA2	9	0.26
(3,504)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA2	9	0.26
(3,474)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HG2	2	0.26
(3,474)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HG3	2	0.26
(3,264)	1:2:A:GLU:HB2	1:2:A:GLU:HG3	6	0.26
(3,85)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HG3	1	0.26
(2,646)	1:11:A:TRP:HE3	1:23:A:PRO:HB2	6	0.26
(2,630)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HG3	4	0.26
(2,630)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HG3	4	0.26
(2,630)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HG3	4	0.26
(2,630)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HG3	5	0.26
(2,630)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HG3	5	0.26
(2,630)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HG3	5	0.26
(2,572)	1:2:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:H	5	0.26
(2,570)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:H	3	0.26
(2,532)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA2	9	0.26
(2,532)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA2	9	0.26
(2,532)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA2	9	0.26
(2,501)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HG2	2	0.26
(2,501)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HG3	2	0.26
(2,276)	1:2:A:GLU:HB2	1:2:A:GLU:HG3	6	0.26
(2,85)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HG3	1	0.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,637)	1:2:A:GLU:HB3	1:6:A:ARG:H	9	0.26
(1,632)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HD2	6	0.26
(1,632)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HD2	6	0.26
(1,632)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HD2	6	0.26
(1,632)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HD3	6	0.26
(1,632)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HD3	6	0.26
(1,632)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HD3	6	0.26
(1,607)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HD3	5	0.26
(1,607)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HD3	8	0.26
(1,607)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HD3	10	0.26
(1,528)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB3	7	0.26
(1,528)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB3	7	0.26
(1,528)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB3	7	0.26
(1,528)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HB3	7	0.26
(1,528)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HB3	7	0.26
(1,528)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HB3	7	0.26
(1,526)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HD3	8	0.26
(1,526)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HD3	8	0.26
(1,526)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HD3	8	0.26
(1,506)	1:21:A:ARG:HG2	1:21:A:ARG:HG3	8	0.26
(1,502)	1:11:A:TRP:HB3	1:24:A:PRO:HG3	8	0.26
(1,491)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB3	7	0.26
(1,396)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:H	3	0.26
(1,396)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:H	6	0.26
(1,396)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:H	10	0.26
(1,390)	1:11:A:TRP:HE3	1:11:A:TRP:HH2	9	0.26
(1,390)	1:11:A:TRP:HE3	1:11:A:TRP:HH2	10	0.26
(1,320)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HD2	7	0.26
(1,320)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HD3	7	0.26
(1,309)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB3	2	0.26
(1,309)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB3	2	0.26
(1,294)	1:10:A:GLN:HE22	1:14:A:GLU:HG2	5	0.26
(1,290)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HB2	3	0.26
(1,290)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HB3	3	0.26
(1,284)	1:19:A:SER:HB2	1:19:A:SER:HB3	2	0.26
(1,284)	1:19:A:SER:HB2	1:19:A:SER:HB3	3	0.26
(1,284)	1:19:A:SER:HB2	1:19:A:SER:HB3	4	0.26
(1,284)	1:19:A:SER:HB2	1:19:A:SER:HB3	6	0.26
(1,284)	1:19:A:SER:HB2	1:19:A:SER:HB3	8	0.26
(1,284)	1:19:A:SER:HB2	1:19:A:SER:HB3	9	0.26
(1,284)	1:19:A:SER:HB2	1:19:A:SER:HB3	10	0.26
(1,255)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HB	1	0.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,255)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HB	9	0.26
(1,240)	1:14:A:GLU:H	1:14:A:GLU:HG3	2	0.26
(1,240)	1:14:A:GLU:H	1:14:A:GLU:HG3	3	0.26
(1,238)	1:14:A:GLU:HB2	1:14:A:GLU:HG2	2	0.26
(1,238)	1:14:A:GLU:HB3	1:14:A:GLU:HG2	2	0.26
(1,238)	1:14:A:GLU:HB2	1:14:A:GLU:HG2	4	0.26
(1,238)	1:14:A:GLU:HB3	1:14:A:GLU:HG2	4	0.26
(1,236)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HB2	2	0.26
(1,236)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HB3	2	0.26
(1,236)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HB2	4	0.26
(1,236)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HB3	4	0.26
(1,193)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD21	4	0.26
(1,193)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD22	4	0.26
(1,193)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD23	4	0.26
(1,152)	1:6:A:ARG:HD3	1:6:A:ARG:HE	5	0.26
(1,131)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD21	5	0.26
(1,131)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD22	5	0.26
(1,131)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD23	5	0.26
(1,114)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	10	0.26
(1,103)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HB3	3	0.26
(1,103)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HB3	4	0.26
(1,103)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HB3	6	0.26
(1,103)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HB3	10	0.26
(1,94)	1:23:A:PRO:HD2	1:23:A:PRO:HG3	6	0.26
(1,94)	1:23:A:PRO:HD3	1:23:A:PRO:HG3	6	0.26
(1,92)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	2	0.26
(1,92)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD3	2	0.26
(1,63)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HG3	8	0.26
(1,62)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HG3	7	0.26
(1,53)	1:6:A:ARG:HD3	1:6:A:ARG:HG2	1	0.26
(1,50)	1:6:A:ARG:HD3	1:6:A:ARG:HG3	4	0.26
(1,29)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HB2	1	0.26
(1,29)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HB3	1	0.26
(1,29)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HB2	2	0.26
(1,29)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HB3	2	0.26
(1,29)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HB2	5	0.26
(1,29)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HB3	5	0.26
(1,29)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HB2	9	0.26
(1,29)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HB3	9	0.26
(4,42)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HB2	9	0.25
(4,34)	1:5:A:VAL:HA	1:6:A:ARG:H	7	0.25
(4,33)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:H	8	0.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,22)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:H	3	0.25
(4,22)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:H	3	0.25
(4,22)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:H	10	0.25
(4,22)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:H	10	0.25
(4,7)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	5	0.25
(4,7)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	5	0.25
(3,592)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HG3	1	0.25
(3,592)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HG3	1	0.25
(3,592)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HG3	1	0.25
(3,474)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HG2	1	0.25
(3,474)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HG3	1	0.25
(3,397)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:H	7	0.25
(3,288)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HA	3	0.25
(3,288)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HA	3	0.25
(3,264)	1:2:A:GLU:HB2	1:2:A:GLU:HG3	1	0.25
(3,76)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD3	1	0.25
(2,653)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HB2	9	0.25
(2,631)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HG3	1	0.25
(2,631)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HG3	1	0.25
(2,631)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HG3	1	0.25
(2,582)	1:5:A:VAL:HA	1:6:A:ARG:H	7	0.25
(2,570)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:H	8	0.25
(2,501)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HG2	1	0.25
(2,501)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HG3	1	0.25
(2,446)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:H	3	0.25
(2,446)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:H	3	0.25
(2,446)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:H	10	0.25
(2,446)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:H	10	0.25
(2,417)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:H	7	0.25
(2,300)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HA	3	0.25
(2,300)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HA	3	0.25
(2,276)	1:2:A:GLU:HB2	1:2:A:GLU:HG3	1	0.25
(2,146)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	5	0.25
(2,146)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	5	0.25
(2,76)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD3	1	0.25
(1,641)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	10	0.25
(1,637)	1:2:A:GLU:HB3	1:6:A:ARG:H	4	0.25
(1,614)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HB2	5	0.25
(1,607)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HD3	1	0.25
(1,526)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HD3	10	0.25
(1,526)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HD3	10	0.25
(1,526)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HD3	10	0.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,520)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD11	7	0.25
(1,520)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD12	7	0.25
(1,520)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD13	7	0.25
(1,486)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:HA	1	0.25
(1,458)	1:19:A:SER:HB3	1:21:A:ARG:H	1	0.25
(1,458)	1:19:A:SER:HB3	1:21:A:ARG:H	4	0.25
(1,453)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:H	1	0.25
(1,453)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:H	1	0.25
(1,453)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:H	1	0.25
(1,453)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:H	1	0.25
(1,453)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:H	1	0.25
(1,453)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:H	1	0.25
(1,447)	1:5:A:VAL:HB	1:6:A:ARG:H	10	0.25
(1,396)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:H	8	0.25
(1,390)	1:11:A:TRP:HE3	1:11:A:TRP:HH2	3	0.25
(1,390)	1:11:A:TRP:HE3	1:11:A:TRP:HH2	6	0.25
(1,390)	1:11:A:TRP:HE3	1:11:A:TRP:HH2	7	0.25
(1,390)	1:11:A:TRP:HE3	1:11:A:TRP:HH2	8	0.25
(1,366)	1:11:A:TRP:HE1	1:22:A:PRO:HA	10	0.25
(1,344)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG2	7	0.25
(1,344)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG3	7	0.25
(1,334)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HA	10	0.25
(1,281)	1:18:A:SER:H	1:18:A:SER:HB2	2	0.25
(1,281)	1:18:A:SER:H	1:18:A:SER:HB3	2	0.25
(1,193)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD21	10	0.25
(1,193)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD22	10	0.25
(1,193)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD23	10	0.25
(1,131)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD21	2	0.25
(1,131)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD22	2	0.25
(1,131)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD23	2	0.25
(1,131)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD21	4	0.25
(1,131)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD22	4	0.25
(1,131)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD23	4	0.25
(1,131)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD21	7	0.25
(1,131)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD22	7	0.25
(1,131)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD23	7	0.25
(1,129)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD11	6	0.25
(1,129)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD12	6	0.25
(1,129)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD13	6	0.25
(1,129)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD11	10	0.25
(1,129)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD12	10	0.25
(1,129)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD13	10	0.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,116)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HB2	8	0.25
(1,116)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HB3	8	0.25
(1,114)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	6	0.25
(1,103)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HB3	1	0.25
(1,103)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HB3	2	0.25
(1,103)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HB3	5	0.25
(1,103)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HB3	8	0.25
(1,94)	1:23:A:PRO:HD2	1:23:A:PRO:HG3	1	0.25
(1,94)	1:23:A:PRO:HD3	1:23:A:PRO:HG3	1	0.25
(1,94)	1:23:A:PRO:HD2	1:23:A:PRO:HG3	2	0.25
(1,94)	1:23:A:PRO:HD3	1:23:A:PRO:HG3	2	0.25
(1,94)	1:23:A:PRO:HD2	1:23:A:PRO:HG3	3	0.25
(1,94)	1:23:A:PRO:HD3	1:23:A:PRO:HG3	3	0.25
(1,94)	1:23:A:PRO:HD2	1:23:A:PRO:HG3	4	0.25
(1,94)	1:23:A:PRO:HD3	1:23:A:PRO:HG3	4	0.25
(1,94)	1:23:A:PRO:HD2	1:23:A:PRO:HG3	5	0.25
(1,94)	1:23:A:PRO:HD3	1:23:A:PRO:HG3	5	0.25
(1,94)	1:23:A:PRO:HD2	1:23:A:PRO:HG3	7	0.25
(1,94)	1:23:A:PRO:HD3	1:23:A:PRO:HG3	7	0.25
(1,94)	1:23:A:PRO:HD2	1:23:A:PRO:HG3	8	0.25
(1,94)	1:23:A:PRO:HD3	1:23:A:PRO:HG3	8	0.25
(1,94)	1:23:A:PRO:HD2	1:23:A:PRO:HG3	9	0.25
(1,94)	1:23:A:PRO:HD3	1:23:A:PRO:HG3	9	0.25
(1,94)	1:23:A:PRO:HD2	1:23:A:PRO:HG3	10	0.25
(1,94)	1:23:A:PRO:HD3	1:23:A:PRO:HG3	10	0.25
(1,63)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HG3	5	0.25
(1,53)	1:6:A:ARG:HD3	1:6:A:ARG:HG2	5	0.25
(1,38)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HG2	5	0.25
(1,38)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HG2	10	0.25
(1,29)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HB2	6	0.25
(1,29)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HB3	6	0.25
(4,39)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HG3	2	0.24
(4,39)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HG3	2	0.24
(4,39)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HG3	2	0.24
(4,36)	1:11:A:TRP:HE3	1:23:A:PRO:HB3	9	0.24
(4,34)	1:5:A:VAL:HA	1:6:A:ARG:H	3	0.24
(4,34)	1:5:A:VAL:HA	1:6:A:ARG:H	6	0.24
(4,34)	1:5:A:VAL:HA	1:6:A:ARG:H	10	0.24
(4,26)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:H	4	0.24
(4,26)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:H	4	0.24
(4,26)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:H	4	0.24
(4,25)	1:9:A:ILE:HG12	1:10:A:GLN:H	1	0.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,25)	1:9:A:ILE:HG12	1:10:A:GLN:H	2	0.24
(4,25)	1:9:A:ILE:HG12	1:10:A:GLN:H	4	0.24
(4,25)	1:9:A:ILE:HG12	1:10:A:GLN:H	5	0.24
(4,25)	1:9:A:ILE:HG12	1:10:A:GLN:H	6	0.24
(4,25)	1:9:A:ILE:HG12	1:10:A:GLN:H	9	0.24
(4,25)	1:9:A:ILE:HG12	1:10:A:GLN:H	10	0.24
(4,22)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:H	2	0.24
(4,22)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:H	2	0.24
(4,22)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:H	8	0.24
(4,22)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:H	8	0.24
(4,14)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD21	7	0.24
(4,14)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD22	7	0.24
(4,14)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD23	7	0.24
(4,14)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD21	8	0.24
(4,14)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD22	8	0.24
(4,14)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD23	8	0.24
(4,13)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD11	6	0.24
(4,13)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD12	6	0.24
(4,13)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD13	6	0.24
(4,13)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD11	7	0.24
(4,13)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD12	7	0.24
(4,13)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD13	7	0.24
(4,5)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:H	1	0.24
(4,5)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:H	2	0.24
(3,617)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD2	7	0.24
(3,617)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	7	0.24
(3,609)	1:14:A:GLU:HG3	1:15:A:GLY:H	7	0.24
(3,592)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HG3	2	0.24
(3,592)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HG3	2	0.24
(3,592)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HG3	2	0.24
(3,592)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HG3	4	0.24
(3,592)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HG3	4	0.24
(3,592)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HG3	4	0.24
(3,541)	1:6:A:ARG:HB3	1:7:A:LEU:H	5	0.24
(3,474)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HG2	6	0.24
(3,474)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HG3	6	0.24
(3,474)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HG2	9	0.24
(3,474)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HG3	9	0.24
(3,397)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:H	5	0.24
(3,294)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HG	3	0.24
(3,294)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HG	3	0.24
(3,294)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HG	5	0.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,294)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HG	5	0.24
(2,662)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD2	7	0.24
(2,662)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	7	0.24
(2,650)	1:14:A:GLU:HG3	1:15:A:GLY:H	7	0.24
(2,631)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HG3	2	0.24
(2,631)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HG3	2	0.24
(2,631)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HG3	2	0.24
(2,631)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HG3	4	0.24
(2,631)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HG3	4	0.24
(2,631)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HG3	4	0.24
(2,630)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HG3	2	0.24
(2,630)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HG3	2	0.24
(2,630)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HG3	2	0.24
(2,594)	1:11:A:TRP:HE3	1:23:A:PRO:HB3	9	0.24
(2,582)	1:5:A:VAL:HA	1:6:A:ARG:H	3	0.24
(2,582)	1:5:A:VAL:HA	1:6:A:ARG:H	6	0.24
(2,582)	1:5:A:VAL:HA	1:6:A:ARG:H	10	0.24
(2,574)	1:6:A:ARG:HB3	1:7:A:LEU:H	5	0.24
(2,501)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HG2	6	0.24
(2,501)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HG3	6	0.24
(2,501)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HG2	9	0.24
(2,501)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HG3	9	0.24
(2,454)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:H	4	0.24
(2,454)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:H	4	0.24
(2,454)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:H	4	0.24
(2,452)	1:9:A:ILE:HG12	1:10:A:GLN:H	1	0.24
(2,452)	1:9:A:ILE:HG12	1:10:A:GLN:H	2	0.24
(2,452)	1:9:A:ILE:HG12	1:10:A:GLN:H	4	0.24
(2,452)	1:9:A:ILE:HG12	1:10:A:GLN:H	5	0.24
(2,452)	1:9:A:ILE:HG12	1:10:A:GLN:H	6	0.24
(2,452)	1:9:A:ILE:HG12	1:10:A:GLN:H	9	0.24
(2,452)	1:9:A:ILE:HG12	1:10:A:GLN:H	10	0.24
(2,446)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:H	2	0.24
(2,446)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:H	2	0.24
(2,446)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:H	8	0.24
(2,446)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:H	8	0.24
(2,417)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:H	5	0.24
(2,313)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD21	7	0.24
(2,313)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD22	7	0.24
(2,313)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD23	7	0.24
(2,313)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD21	8	0.24
(2,313)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD22	8	0.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,313)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD23	8	0.24
(2,312)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD11	6	0.24
(2,312)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD12	6	0.24
(2,312)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD13	6	0.24
(2,312)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD11	7	0.24
(2,312)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD12	7	0.24
(2,312)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD13	7	0.24
(2,306)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HG	3	0.24
(2,306)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HG	3	0.24
(2,306)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HG	5	0.24
(2,306)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HG	5	0.24
(2,137)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:H	1	0.24
(2,137)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:H	2	0.24
(1,637)	1:2:A:GLU:HB3	1:6:A:ARG:H	5	0.24
(1,634)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HG3	10	0.24
(1,634)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HG3	10	0.24
(1,634)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HG3	10	0.24
(1,632)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HD2	7	0.24
(1,632)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HD2	7	0.24
(1,632)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HD2	7	0.24
(1,632)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HD3	7	0.24
(1,632)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HD3	7	0.24
(1,632)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HD3	7	0.24
(1,625)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HG2	5	0.24
(1,625)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HG2	5	0.24
(1,613)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HG3	1	0.24
(1,537)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD21	9	0.24
(1,537)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD22	9	0.24
(1,537)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD23	9	0.24
(1,537)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD21	9	0.24
(1,537)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD22	9	0.24
(1,537)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD23	9	0.24
(1,535)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG11	1	0.24
(1,535)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG12	1	0.24
(1,535)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG13	1	0.24
(1,535)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	1	0.24
(1,535)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	1	0.24
(1,535)	1:1:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	1	0.24
(1,535)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG11	1	0.24
(1,535)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG12	1	0.24
(1,535)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG13	1	0.24
(1,535)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG21	1	0.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,535)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG22	1	0.24
(1,535)	1:1:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG23	1	0.24
(1,526)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HD3	4	0.24
(1,526)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HD3	4	0.24
(1,526)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HD3	4	0.24
(1,506)	1:21:A:ARG:HG2	1:21:A:ARG:HG3	2	0.24
(1,506)	1:21:A:ARG:HG2	1:21:A:ARG:HG3	4	0.24
(1,469)	1:23:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	5	0.24
(1,468)	1:24:A:PRO:HG2	1:25:A:SER:H	6	0.24
(1,458)	1:19:A:SER:HB3	1:21:A:ARG:H	3	0.24
(1,453)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:H	2	0.24
(1,453)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:H	2	0.24
(1,453)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:H	2	0.24
(1,453)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:H	2	0.24
(1,453)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:H	2	0.24
(1,453)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:H	2	0.24
(1,453)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:H	7	0.24
(1,453)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:H	7	0.24
(1,453)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:H	7	0.24
(1,453)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:H	7	0.24
(1,453)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:H	7	0.24
(1,453)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:H	7	0.24
(1,390)	1:11:A:TRP:HE3	1:11:A:TRP:HH2	1	0.24
(1,390)	1:11:A:TRP:HE3	1:11:A:TRP:HH2	4	0.24
(1,356)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD11	5	0.24
(1,356)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD12	5	0.24
(1,356)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD13	5	0.24
(1,348)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB2	5	0.24
(1,337)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD2	4	0.24
(1,337)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD3	4	0.24
(1,310)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	3	0.24
(1,310)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	3	0.24
(1,310)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	3	0.24
(1,310)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	3	0.24
(1,310)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	3	0.24
(1,310)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	3	0.24
(1,310)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HD1	3	0.24
(1,310)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HD2	3	0.24
(1,310)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HD1	3	0.24
(1,310)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HD2	3	0.24
(1,310)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HD1	3	0.24
(1,310)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HD2	3	0.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,309)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB3	3	0.24
(1,309)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB3	3	0.24
(1,309)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB3	10	0.24
(1,309)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB3	10	0.24
(1,289)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HG2	5	0.24
(1,289)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HG3	5	0.24
(1,289)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HG2	10	0.24
(1,289)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HG3	10	0.24
(1,255)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HB	3	0.24
(1,255)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HB	6	0.24
(1,255)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HB	10	0.24
(1,238)	1:14:A:GLU:HB2	1:14:A:GLU:HG2	7	0.24
(1,238)	1:14:A:GLU:HB3	1:14:A:GLU:HG2	7	0.24
(1,199)	1:12:A:LEU:HD11	1:12:A:LEU:HG	6	0.24
(1,199)	1:12:A:LEU:HD12	1:12:A:LEU:HG	6	0.24
(1,199)	1:12:A:LEU:HD13	1:12:A:LEU:HG	6	0.24
(1,199)	1:12:A:LEU:HD11	1:12:A:LEU:HG	8	0.24
(1,199)	1:12:A:LEU:HD12	1:12:A:LEU:HG	8	0.24
(1,199)	1:12:A:LEU:HD13	1:12:A:LEU:HG	8	0.24
(1,199)	1:12:A:LEU:HD11	1:12:A:LEU:HG	9	0.24
(1,199)	1:12:A:LEU:HD12	1:12:A:LEU:HG	9	0.24
(1,199)	1:12:A:LEU:HD13	1:12:A:LEU:HG	9	0.24
(1,199)	1:12:A:LEU:HD11	1:12:A:LEU:HG	10	0.24
(1,199)	1:12:A:LEU:HD12	1:12:A:LEU:HG	10	0.24
(1,199)	1:12:A:LEU:HD13	1:12:A:LEU:HG	10	0.24
(1,193)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD21	1	0.24
(1,193)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD22	1	0.24
(1,193)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD23	1	0.24
(1,193)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD21	2	0.24
(1,193)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD22	2	0.24
(1,193)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD23	2	0.24
(1,152)	1:6:A:ARG:HD3	1:6:A:ARG:HE	1	0.24
(1,92)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	4	0.24
(1,92)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD3	4	0.24
(1,80)	1:22:A:PRO:HD3	1:22:A:PRO:HG3	5	0.24
(1,80)	1:22:A:PRO:HD3	1:22:A:PRO:HG3	9	0.24
(1,62)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HG3	4	0.24
(1,52)	1:6:A:ARG:HD2	1:6:A:ARG:HG2	4	0.24
(1,38)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HG2	2	0.24
(1,29)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HB2	8	0.24
(1,29)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HB3	8	0.24
(1,26)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HD3	1	0.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,34)	1:5:A:VAL:HA	1:6:A:ARG:H	4	0.23
(4,34)	1:5:A:VAL:HA	1:6:A:ARG:H	8	0.23
(4,34)	1:5:A:VAL:HA	1:6:A:ARG:H	9	0.23
(4,29)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HB2	6	0.23
(4,29)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HB2	6	0.23
(4,29)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HB2	6	0.23
(4,29)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HB3	6	0.23
(4,29)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HB3	6	0.23
(4,29)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HB3	6	0.23
(4,29)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HB2	10	0.23
(4,29)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HB2	10	0.23
(4,29)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HB2	10	0.23
(4,29)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HB3	10	0.23
(4,29)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HB3	10	0.23
(4,29)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HB3	10	0.23
(4,26)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:H	5	0.23
(4,26)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:H	5	0.23
(4,26)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:H	5	0.23
(4,25)	1:9:A:ILE:HG12	1:10:A:GLN:H	7	0.23
(4,22)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:H	1	0.23
(4,22)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:H	1	0.23
(4,14)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD21	3	0.23
(4,14)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD22	3	0.23
(4,14)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD23	3	0.23
(4,14)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD21	6	0.23
(4,14)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD22	6	0.23
(4,14)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD23	6	0.23
(4,5)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:H	4	0.23
(4,5)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:H	5	0.23
(3,592)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HG3	5	0.23
(3,592)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HG3	5	0.23
(3,592)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HG3	5	0.23
(3,541)	1:6:A:ARG:HB3	1:7:A:LEU:H	1	0.23
(3,504)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA2	7	0.23
(3,504)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA2	7	0.23
(3,504)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA2	7	0.23
(3,441)	1:24:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	3	0.23
(3,397)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:H	3	0.23
(3,397)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:H	6	0.23
(2,631)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HG3	5	0.23
(2,631)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HG3	5	0.23
(2,631)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HG3	5	0.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,582)	1:5:A:VAL:HA	1:6:A:ARG:H	4	0.23
(2,582)	1:5:A:VAL:HA	1:6:A:ARG:H	8	0.23
(2,582)	1:5:A:VAL:HA	1:6:A:ARG:H	9	0.23
(2,574)	1:6:A:ARG:HB3	1:7:A:LEU:H	1	0.23
(2,542)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HB2	6	0.23
(2,542)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HB2	6	0.23
(2,542)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HB2	6	0.23
(2,542)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HB3	6	0.23
(2,542)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HB3	6	0.23
(2,542)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HB3	6	0.23
(2,542)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HB2	10	0.23
(2,542)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HB2	10	0.23
(2,542)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HB2	10	0.23
(2,542)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HB3	10	0.23
(2,542)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HB3	10	0.23
(2,542)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HB3	10	0.23
(2,532)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA2	7	0.23
(2,532)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA2	7	0.23
(2,532)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA2	7	0.23
(2,467)	1:24:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	3	0.23
(2,454)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:H	5	0.23
(2,454)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:H	5	0.23
(2,454)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:H	5	0.23
(2,452)	1:9:A:ILE:HG12	1:10:A:GLN:H	7	0.23
(2,446)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:H	1	0.23
(2,446)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:H	1	0.23
(2,417)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:H	3	0.23
(2,417)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:H	6	0.23
(2,313)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD21	3	0.23
(2,313)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD22	3	0.23
(2,313)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD23	3	0.23
(2,313)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD21	6	0.23
(2,313)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD22	6	0.23
(2,313)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD23	6	0.23
(2,137)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:H	4	0.23
(2,137)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:H	5	0.23
(1,634)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HG3	6	0.23
(1,634)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HG3	6	0.23
(1,634)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HG3	6	0.23
(1,607)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HD3	4	0.23
(1,607)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HD3	6	0.23
(1,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG11	1	0.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG12	1	0.23
(1,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG13	1	0.23
(1,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG11	1	0.23
(1,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG12	1	0.23
(1,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG13	1	0.23
(1,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG11	1	0.23
(1,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG12	1	0.23
(1,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG13	1	0.23
(1,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	1	0.23
(1,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	1	0.23
(1,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	1	0.23
(1,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	1	0.23
(1,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	1	0.23
(1,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	1	0.23
(1,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	1	0.23
(1,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	1	0.23
(1,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	1	0.23
(1,506)	1:21:A:ARG:HG2	1:21:A:ARG:HG3	1	0.23
(1,506)	1:21:A:ARG:HG2	1:21:A:ARG:HG3	3	0.23
(1,506)	1:21:A:ARG:HG2	1:21:A:ARG:HG3	5	0.23
(1,506)	1:21:A:ARG:HG2	1:21:A:ARG:HG3	6	0.23
(1,506)	1:21:A:ARG:HG2	1:21:A:ARG:HG3	9	0.23
(1,506)	1:21:A:ARG:HG2	1:21:A:ARG:HG3	10	0.23
(1,486)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:HA	7	0.23
(1,390)	1:11:A:TRP:HE3	1:11:A:TRP:HH2	2	0.23
(1,356)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD11	10	0.23
(1,356)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD12	10	0.23
(1,356)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD13	10	0.23
(1,337)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD2	1	0.23
(1,337)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD3	1	0.23
(1,337)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD2	5	0.23
(1,337)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD3	5	0.23
(1,334)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HA	2	0.23
(1,334)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HA	5	0.23
(1,334)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HA	8	0.23
(1,302)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG2	1	0.23
(1,302)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG2	1	0.23
(1,302)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG2	4	0.23
(1,302)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG2	4	0.23
(1,236)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HB2	7	0.23
(1,236)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HB3	7	0.23
(1,199)	1:12:A:LEU:HD11	1:12:A:LEU:HG	1	0.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,199)	1:12:A:LEU:HD12	1:12:A:LEU:HG	1	0.23
(1,199)	1:12:A:LEU:HD13	1:12:A:LEU:HG	1	0.23
(1,199)	1:12:A:LEU:HD11	1:12:A:LEU:HG	2	0.23
(1,199)	1:12:A:LEU:HD12	1:12:A:LEU:HG	2	0.23
(1,199)	1:12:A:LEU:HD13	1:12:A:LEU:HG	2	0.23
(1,199)	1:12:A:LEU:HD11	1:12:A:LEU:HG	3	0.23
(1,199)	1:12:A:LEU:HD12	1:12:A:LEU:HG	3	0.23
(1,199)	1:12:A:LEU:HD13	1:12:A:LEU:HG	3	0.23
(1,199)	1:12:A:LEU:HD11	1:12:A:LEU:HG	4	0.23
(1,199)	1:12:A:LEU:HD12	1:12:A:LEU:HG	4	0.23
(1,199)	1:12:A:LEU:HD13	1:12:A:LEU:HG	4	0.23
(1,199)	1:12:A:LEU:HD11	1:12:A:LEU:HG	5	0.23
(1,199)	1:12:A:LEU:HD12	1:12:A:LEU:HG	5	0.23
(1,199)	1:12:A:LEU:HD13	1:12:A:LEU:HG	5	0.23
(1,199)	1:12:A:LEU:HD11	1:12:A:LEU:HG	7	0.23
(1,199)	1:12:A:LEU:HD12	1:12:A:LEU:HG	7	0.23
(1,199)	1:12:A:LEU:HD13	1:12:A:LEU:HG	7	0.23
(1,193)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD21	5	0.23
(1,193)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD22	5	0.23
(1,193)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD23	5	0.23
(1,116)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HB2	10	0.23
(1,116)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HB3	10	0.23
(1,114)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	8	0.23
(1,98)	1:23:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD3	9	0.23
(1,95)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD2	6	0.23
(1,95)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD3	6	0.23
(1,92)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	1	0.23
(1,92)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD3	1	0.23
(1,80)	1:22:A:PRO:HD3	1:22:A:PRO:HG3	2	0.23
(1,80)	1:22:A:PRO:HD3	1:22:A:PRO:HG3	4	0.23
(1,80)	1:22:A:PRO:HD3	1:22:A:PRO:HG3	6	0.23
(1,80)	1:22:A:PRO:HD3	1:22:A:PRO:HG3	10	0.23
(1,62)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HG3	3	0.23
(1,53)	1:6:A:ARG:HD3	1:6:A:ARG:HG2	9	0.23
(1,53)	1:6:A:ARG:HD3	1:6:A:ARG:HG2	10	0.23
(1,50)	1:6:A:ARG:HD3	1:6:A:ARG:HG3	3	0.23
(1,48)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG2	9	0.23
(1,29)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HB2	7	0.23
(1,29)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HB3	7	0.23
(1,26)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HD3	2	0.23
(1,26)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HD3	3	0.23
(1,26)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HD3	4	0.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,26)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HD3	5	0.23
(1,26)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HD3	7	0.23
(1,26)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HD3	10	0.23
(4,39)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HG3	1	0.22
(4,39)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HG3	1	0.22
(4,39)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HG3	1	0.22
(4,33)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:H	9	0.22
(4,29)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HB2	8	0.22
(4,29)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HB2	8	0.22
(4,29)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HB2	8	0.22
(4,29)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HB3	8	0.22
(4,29)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HB3	8	0.22
(4,29)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HB3	8	0.22
(4,26)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:H	1	0.22
(4,26)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:H	1	0.22
(4,26)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:H	1	0.22
(4,26)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:H	2	0.22
(4,26)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:H	2	0.22
(4,26)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:H	2	0.22
(4,25)	1:9:A:ILE:HG12	1:10:A:GLN:H	3	0.22
(4,22)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:H	7	0.22
(4,22)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:H	7	0.22
(4,13)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD11	3	0.22
(4,13)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD12	3	0.22
(4,13)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD13	3	0.22
(4,13)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD11	8	0.22
(4,13)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD12	8	0.22
(4,13)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD13	8	0.22
(4,5)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:H	3	0.22
(4,5)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:H	9	0.22
(4,5)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:H	10	0.22
(3,605)	1:11:A:TRP:HE3	1:23:A:PRO:HB2	10	0.22
(3,539)	1:2:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:H	3	0.22
(3,539)	1:2:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:H	9	0.22
(3,504)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA2	8	0.22
(3,504)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA2	8	0.22
(3,504)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA2	8	0.22
(3,485)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	6	0.22
(3,485)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	6	0.22
(3,485)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	6	0.22
(3,474)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HG2	7	0.22
(3,474)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HG3	7	0.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,441)	1:24:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	8	0.22
(3,397)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:H	1	0.22
(3,397)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:H	8	0.22
(3,288)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HA	2	0.22
(3,288)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HA	2	0.22
(3,141)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HG2	4	0.22
(3,130)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD21	4	0.22
(3,130)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD22	4	0.22
(3,130)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD23	4	0.22
(2,646)	1:11:A:TRP:HE3	1:23:A:PRO:HB2	10	0.22
(2,630)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HG3	1	0.22
(2,630)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HG3	1	0.22
(2,630)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HG3	1	0.22
(2,572)	1:2:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:H	3	0.22
(2,572)	1:2:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:H	9	0.22
(2,570)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:H	9	0.22
(2,542)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HB2	8	0.22
(2,542)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HB2	8	0.22
(2,542)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HB2	8	0.22
(2,542)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HB3	8	0.22
(2,542)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HB3	8	0.22
(2,542)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HB3	8	0.22
(2,532)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA2	8	0.22
(2,532)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA2	8	0.22
(2,532)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA2	8	0.22
(2,512)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	6	0.22
(2,512)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	6	0.22
(2,512)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	6	0.22
(2,501)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HG2	7	0.22
(2,501)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HG3	7	0.22
(2,467)	1:24:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	8	0.22
(2,454)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:H	1	0.22
(2,454)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:H	1	0.22
(2,454)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:H	1	0.22
(2,454)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:H	2	0.22
(2,454)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:H	2	0.22
(2,454)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:H	2	0.22
(2,452)	1:9:A:ILE:HG12	1:10:A:GLN:H	3	0.22
(2,446)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:H	7	0.22
(2,446)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:H	7	0.22
(2,417)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:H	1	0.22
(2,417)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:H	8	0.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,312)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD11	3	0.22
(2,312)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD12	3	0.22
(2,312)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD13	3	0.22
(2,312)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD11	8	0.22
(2,312)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD12	8	0.22
(2,312)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD13	8	0.22
(2,300)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HA	2	0.22
(2,300)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HA	2	0.22
(2,148)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HG2	4	0.22
(2,137)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:H	3	0.22
(2,137)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:H	9	0.22
(2,137)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:H	10	0.22
(2,133)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD21	4	0.22
(2,133)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD22	4	0.22
(2,133)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD23	4	0.22
(1,638)	1:9:A:ILE:HA	1:11:A:TRP:HE3	1	0.22
(1,634)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HG3	7	0.22
(1,634)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HG3	7	0.22
(1,634)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HG3	7	0.22
(1,633)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HG3	10	0.22
(1,633)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HG3	10	0.22
(1,633)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HG3	10	0.22
(1,633)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HG3	10	0.22
(1,633)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HG3	10	0.22
(1,633)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HG3	10	0.22
(1,486)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:HA	5	0.22
(1,464)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:H	9	0.22
(1,453)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:H	9	0.22
(1,453)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:H	9	0.22
(1,453)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:H	9	0.22
(1,453)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:H	9	0.22
(1,453)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:H	9	0.22
(1,453)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:H	9	0.22
(1,428)	1:18:A:SER:HA	1:19:A:SER:H	4	0.22
(1,396)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:H	2	0.22
(1,390)	1:11:A:TRP:HE3	1:11:A:TRP:HH2	5	0.22
(1,356)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD11	4	0.22
(1,356)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD12	4	0.22
(1,356)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD13	4	0.22
(1,348)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB2	9	0.22
(1,334)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HA	6	0.22
(1,309)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB3	7	0.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,309)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB3	7	0.22
(1,307)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HG	5	0.22
(1,307)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HG	5	0.22
(1,302)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG2	2	0.22
(1,302)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG2	2	0.22
(1,293)	1:10:A:GLN:HE21	1:14:A:GLU:HG3	6	0.22
(1,290)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HB2	4	0.22
(1,290)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HB3	4	0.22
(1,289)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HG2	2	0.22
(1,289)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HG3	2	0.22
(1,240)	1:14:A:GLU:H	1:14:A:GLU:HG3	4	0.22
(1,238)	1:14:A:GLU:HB2	1:14:A:GLU:HG2	8	0.22
(1,238)	1:14:A:GLU:HB3	1:14:A:GLU:HG2	8	0.22
(1,233)	1:14:A:GLU:H	1:14:A:GLU:HG2	8	0.22
(1,196)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HG	6	0.22
(1,196)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HG	7	0.22
(1,196)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HG	8	0.22
(1,193)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD21	6	0.22
(1,193)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD22	6	0.22
(1,193)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD23	6	0.22
(1,193)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD21	8	0.22
(1,193)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD22	8	0.22
(1,193)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD23	8	0.22
(1,114)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	3	0.22
(1,92)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	5	0.22
(1,92)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD3	5	0.22
(1,80)	1:22:A:PRO:HD3	1:22:A:PRO:HG3	3	0.22
(1,80)	1:22:A:PRO:HD3	1:22:A:PRO:HG3	7	0.22
(1,26)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HD3	6	0.22
(1,26)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HD3	8	0.22
(1,26)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HD3	9	0.22
(1,7)	1:16:A:GLY:H	1:16:A:GLY:HA2	10	0.22
(4,29)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HB2	3	0.21
(4,29)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HB2	3	0.21
(4,29)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HB2	3	0.21
(4,29)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HB3	3	0.21
(4,29)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HB3	3	0.21
(4,29)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HB3	3	0.21
(4,5)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:H	6	0.21
(4,5)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:H	8	0.21
(3,587)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HG2	8	0.21
(3,587)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HG2	8	0.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,474)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HG2	5	0.21
(3,474)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HG3	5	0.21
(3,446)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:H	8	0.21
(3,441)	1:24:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	6	0.21
(3,407)	1:12:A:LEU:HB2	1:16:A:GLY:H	2	0.21
(3,407)	1:12:A:LEU:HB2	1:16:A:GLY:H	9	0.21
(3,397)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:H	2	0.21
(3,397)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:H	4	0.21
(3,368)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HZ3	3	0.21
(3,368)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HZ3	3	0.21
(3,368)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HZ3	5	0.21
(3,368)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HZ3	5	0.21
(3,288)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HA	1	0.21
(3,288)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HA	1	0.21
(3,288)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HA	4	0.21
(3,288)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HA	4	0.21
(3,288)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HA	9	0.21
(3,288)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HA	9	0.21
(3,83)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HG2	8	0.21
(2,625)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HG2	8	0.21
(2,625)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HG2	8	0.21
(2,542)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HB2	3	0.21
(2,542)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HB2	3	0.21
(2,542)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HB2	3	0.21
(2,542)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HB3	3	0.21
(2,542)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HB3	3	0.21
(2,542)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HB3	3	0.21
(2,501)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HG2	5	0.21
(2,501)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HG3	5	0.21
(2,472)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:H	8	0.21
(2,467)	1:24:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	6	0.21
(2,427)	1:12:A:LEU:HB2	1:16:A:GLY:H	2	0.21
(2,427)	1:12:A:LEU:HB2	1:16:A:GLY:H	9	0.21
(2,417)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:H	2	0.21
(2,417)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:H	4	0.21
(2,387)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HZ3	3	0.21
(2,387)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HZ3	3	0.21
(2,387)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HZ3	5	0.21
(2,387)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HZ3	5	0.21
(2,300)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HA	1	0.21
(2,300)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HA	1	0.21
(2,300)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HA	4	0.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,300)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HA	4	0.21
(2,300)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HA	9	0.21
(2,300)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HA	9	0.21
(2,137)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:H	6	0.21
(2,137)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:H	8	0.21
(2,83)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HG2	8	0.21
(1,635)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD11	3	0.21
(1,635)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD12	3	0.21
(1,635)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD13	3	0.21
(1,635)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD11	3	0.21
(1,635)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD12	3	0.21
(1,635)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD13	3	0.21
(1,635)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD11	3	0.21
(1,635)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD12	3	0.21
(1,635)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD13	3	0.21
(1,635)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HD11	3	0.21
(1,635)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HD12	3	0.21
(1,635)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HD13	3	0.21
(1,635)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HD11	3	0.21
(1,635)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HD12	3	0.21
(1,635)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HD13	3	0.21
(1,635)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HD11	3	0.21
(1,635)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HD12	3	0.21
(1,635)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HD13	3	0.21
(1,635)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD11	10	0.21
(1,635)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD12	10	0.21
(1,635)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD13	10	0.21
(1,635)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD11	10	0.21
(1,635)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD12	10	0.21
(1,635)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD13	10	0.21
(1,635)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD11	10	0.21
(1,635)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD12	10	0.21
(1,635)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD13	10	0.21
(1,635)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HD11	10	0.21
(1,635)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HD12	10	0.21
(1,635)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HD13	10	0.21
(1,635)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HD11	10	0.21
(1,635)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HD12	10	0.21
(1,635)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HD13	10	0.21
(1,635)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HD11	10	0.21
(1,635)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HD12	10	0.21
(1,635)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HD13	10	0.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,634)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HG3	4	0.21
(1,634)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HG3	4	0.21
(1,634)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HG3	4	0.21
(1,634)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HG3	9	0.21
(1,634)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HG3	9	0.21
(1,634)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HG3	9	0.21
(1,589)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:H	5	0.21
(1,537)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD21	10	0.21
(1,537)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD22	10	0.21
(1,537)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD23	10	0.21
(1,537)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD21	10	0.21
(1,537)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD22	10	0.21
(1,537)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD23	10	0.21
(1,520)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD11	6	0.21
(1,520)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD12	6	0.21
(1,520)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD13	6	0.21
(1,504)	1:24:A:PRO:HG2	1:24:A:PRO:HG3	3	0.21
(1,502)	1:11:A:TRP:HB3	1:24:A:PRO:HG3	3	0.21
(1,458)	1:19:A:SER:HB3	1:21:A:ARG:H	6	0.21
(1,447)	1:5:A:VAL:HB	1:6:A:ARG:H	6	0.21
(1,438)	1:18:A:SER:HA	1:20:A:GLY:H	1	0.21
(1,399)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:H	7	0.21
(1,348)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB2	2	0.21
(1,344)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG2	1	0.21
(1,344)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG3	1	0.21
(1,334)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HA	9	0.21
(1,303)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB3	4	0.21
(1,303)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB3	4	0.21
(1,289)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HG2	9	0.21
(1,289)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HG3	9	0.21
(1,236)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HB2	8	0.21
(1,236)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HB3	8	0.21
(1,196)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HG	3	0.21
(1,193)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD21	3	0.21
(1,193)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD22	3	0.21
(1,193)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD23	3	0.21
(1,153)	1:6:A:ARG:HD2	1:6:A:ARG:HE	1	0.21
(1,116)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HB2	5	0.21
(1,116)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HB3	5	0.21
(1,95)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD2	8	0.21
(1,95)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD3	8	0.21
(1,95)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD2	10	0.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,95)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD3	10	0.21
(1,92)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	10	0.21
(1,92)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD3	10	0.21
(1,82)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HG3	2	0.21
(1,62)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HG3	8	0.21
(1,54)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HD3	2	0.21
(1,39)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HG3	5	0.21
(1,35)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HG3	5	0.21
(1,35)	1:21:A:ARG:HD3	1:21:A:ARG:HG3	5	0.21
(1,7)	1:16:A:GLY:H	1:16:A:GLY:HA2	1	0.21
(1,7)	1:16:A:GLY:H	1:16:A:GLY:HA2	2	0.21
(1,7)	1:16:A:GLY:H	1:16:A:GLY:HA2	3	0.21
(1,7)	1:16:A:GLY:H	1:16:A:GLY:HA2	4	0.21
(1,7)	1:16:A:GLY:H	1:16:A:GLY:HA2	5	0.21
(1,7)	1:16:A:GLY:H	1:16:A:GLY:HA2	6	0.21
(1,7)	1:16:A:GLY:H	1:16:A:GLY:HA2	7	0.21
(1,7)	1:16:A:GLY:H	1:16:A:GLY:HA2	8	0.21
(1,7)	1:16:A:GLY:H	1:16:A:GLY:HA2	9	0.21
(4,25)	1:9:A:ILE:HG12	1:10:A:GLN:H	8	0.2
(4,22)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:H	6	0.2
(4,22)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:H	6	0.2
(4,14)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD21	5	0.2
(4,14)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD22	5	0.2
(4,14)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD23	5	0.2
(4,10)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG21	4	0.2
(4,10)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG22	4	0.2
(4,10)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG23	4	0.2
(4,10)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG21	5	0.2
(4,10)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG22	5	0.2
(4,10)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG23	5	0.2
(3,617)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD2	9	0.2
(3,617)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	9	0.2
(3,522)	1:10:A:GLN:HE22	1:14:A:GLU:HB2	9	0.2
(3,522)	1:10:A:GLN:HE22	1:14:A:GLU:HB3	9	0.2
(3,420)	1:8:A:TYR:HA	1:10:A:GLN:H	3	0.2
(3,420)	1:8:A:TYR:HA	1:10:A:GLN:H	8	0.2
(3,420)	1:8:A:TYR:HA	1:10:A:GLN:H	10	0.2
(3,407)	1:12:A:LEU:HB2	1:16:A:GLY:H	3	0.2
(3,407)	1:12:A:LEU:HB2	1:16:A:GLY:H	4	0.2
(3,407)	1:12:A:LEU:HB2	1:16:A:GLY:H	7	0.2
(3,407)	1:12:A:LEU:HB2	1:16:A:GLY:H	8	0.2
(3,279)	1:10:A:GLN:HE21	1:14:A:GLU:HG2	4	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,229)	1:14:A:GLU:H	1:14:A:GLU:HG3	6	0.2
(3,229)	1:14:A:GLU:H	1:14:A:GLU:HG3	10	0.2
(3,141)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HG2	7	0.2
(3,130)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD21	5	0.2
(3,130)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD22	5	0.2
(3,130)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD23	5	0.2
(2,662)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD2	9	0.2
(2,662)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	9	0.2
(2,552)	1:10:A:GLN:HE22	1:14:A:GLU:HB2	9	0.2
(2,552)	1:10:A:GLN:HE22	1:14:A:GLU:HB3	9	0.2
(2,452)	1:9:A:ILE:HG12	1:10:A:GLN:H	8	0.2
(2,446)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:H	6	0.2
(2,446)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:H	6	0.2
(2,441)	1:8:A:TYR:HA	1:10:A:GLN:H	3	0.2
(2,441)	1:8:A:TYR:HA	1:10:A:GLN:H	8	0.2
(2,441)	1:8:A:TYR:HA	1:10:A:GLN:H	10	0.2
(2,427)	1:12:A:LEU:HB2	1:16:A:GLY:H	3	0.2
(2,427)	1:12:A:LEU:HB2	1:16:A:GLY:H	4	0.2
(2,427)	1:12:A:LEU:HB2	1:16:A:GLY:H	7	0.2
(2,427)	1:12:A:LEU:HB2	1:16:A:GLY:H	8	0.2
(2,313)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD21	5	0.2
(2,313)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD22	5	0.2
(2,313)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD23	5	0.2
(2,291)	1:10:A:GLN:HE21	1:14:A:GLU:HG2	4	0.2
(2,240)	1:14:A:GLU:H	1:14:A:GLU:HG3	6	0.2
(2,240)	1:14:A:GLU:H	1:14:A:GLU:HG3	10	0.2
(2,173)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG21	4	0.2
(2,173)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG22	4	0.2
(2,173)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG23	4	0.2
(2,173)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG21	5	0.2
(2,173)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG22	5	0.2
(2,173)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG23	5	0.2
(2,148)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HG2	7	0.2
(2,133)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD21	5	0.2
(2,133)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD22	5	0.2
(2,133)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD23	5	0.2
(1,641)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	9	0.2
(1,634)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HG3	3	0.2
(1,634)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HG3	3	0.2
(1,634)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HG3	3	0.2
(1,634)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HG3	8	0.2
(1,634)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HG3	8	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,634)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HG3	8	0.2
(1,623)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HG2	4	0.2
(1,613)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HG3	5	0.2
(1,504)	1:24:A:PRO:HG2	1:24:A:PRO:HG3	6	0.2
(1,504)	1:24:A:PRO:HG2	1:24:A:PRO:HG3	7	0.2
(1,504)	1:24:A:PRO:HG2	1:24:A:PRO:HG3	8	0.2
(1,504)	1:24:A:PRO:HG2	1:24:A:PRO:HG3	10	0.2
(1,396)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:H	4	0.2
(1,366)	1:11:A:TRP:HE1	1:22:A:PRO:HA	8	0.2
(1,356)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD11	2	0.2
(1,356)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD12	2	0.2
(1,356)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD13	2	0.2
(1,348)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB2	1	0.2
(1,348)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB2	4	0.2
(1,348)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB2	8	0.2
(1,249)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG2	2	0.2
(1,249)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG3	2	0.2
(1,249)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG2	3	0.2
(1,249)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG3	3	0.2
(1,249)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG2	4	0.2
(1,249)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG3	4	0.2
(1,249)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG2	6	0.2
(1,249)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG3	6	0.2
(1,249)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG2	8	0.2
(1,249)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG3	8	0.2
(1,249)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG2	10	0.2
(1,249)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG3	10	0.2
(1,234)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HG2	8	0.2
(1,193)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD21	7	0.2
(1,193)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD22	7	0.2
(1,193)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD23	7	0.2
(1,82)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HG3	4	0.2
(1,62)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HG3	5	0.2
(1,60)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HB3	6	0.2
(1,60)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HB3	9	0.2
(1,52)	1:6:A:ARG:HD2	1:6:A:ARG:HG2	3	0.2
(1,44)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HD2	9	0.2
(1,35)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HG3	4	0.2
(1,35)	1:21:A:ARG:HD3	1:21:A:ARG:HG3	4	0.2
(4,33)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:H	7	0.19
(4,33)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:H	10	0.19
(4,26)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:H	3	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,26)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:H	3	0.19
(4,26)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:H	3	0.19
(4,26)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:H	6	0.19
(4,26)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:H	6	0.19
(4,26)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:H	6	0.19
(4,26)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:H	7	0.19
(4,26)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:H	7	0.19
(4,26)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:H	7	0.19
(4,26)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:H	8	0.19
(4,26)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:H	8	0.19
(4,26)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:H	8	0.19
(4,14)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD21	10	0.19
(4,14)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD22	10	0.19
(4,14)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD23	10	0.19
(4,10)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG21	1	0.19
(4,10)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG22	1	0.19
(4,10)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG23	1	0.19
(4,10)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG21	2	0.19
(4,10)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG22	2	0.19
(4,10)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG23	2	0.19
(4,10)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG21	3	0.19
(4,10)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG22	3	0.19
(4,10)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG23	3	0.19
(4,10)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG21	6	0.19
(4,10)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG22	6	0.19
(4,10)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG23	6	0.19
(4,10)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG21	9	0.19
(4,10)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG22	9	0.19
(4,10)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG23	9	0.19
(3,597)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HG12	5	0.19
(3,597)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HG12	5	0.19
(3,522)	1:10:A:GLN:HE22	1:14:A:GLU:HB2	3	0.19
(3,522)	1:10:A:GLN:HE22	1:14:A:GLU:HB3	3	0.19
(3,522)	1:10:A:GLN:HE22	1:14:A:GLU:HB2	6	0.19
(3,522)	1:10:A:GLN:HE22	1:14:A:GLU:HB3	6	0.19
(3,420)	1:8:A:TYR:HA	1:10:A:GLN:H	9	0.19
(3,407)	1:12:A:LEU:HB2	1:16:A:GLY:H	1	0.19
(3,407)	1:12:A:LEU:HB2	1:16:A:GLY:H	5	0.19
(3,397)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:H	10	0.19
(3,288)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HA	7	0.19
(3,288)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HA	7	0.19
(3,229)	1:14:A:GLU:H	1:14:A:GLU:HG3	9	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,130)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD21	1	0.19
(3,130)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD22	1	0.19
(3,130)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD23	1	0.19
(3,130)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD21	2	0.19
(3,130)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD22	2	0.19
(3,130)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD23	2	0.19
(3,85)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HG3	8	0.19
(2,636)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HG12	5	0.19
(2,636)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HG12	5	0.19
(2,570)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:H	7	0.19
(2,570)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:H	10	0.19
(2,552)	1:10:A:GLN:HE22	1:14:A:GLU:HB2	3	0.19
(2,552)	1:10:A:GLN:HE22	1:14:A:GLU:HB3	3	0.19
(2,552)	1:10:A:GLN:HE22	1:14:A:GLU:HB2	6	0.19
(2,552)	1:10:A:GLN:HE22	1:14:A:GLU:HB3	6	0.19
(2,454)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:H	3	0.19
(2,454)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:H	3	0.19
(2,454)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:H	3	0.19
(2,454)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:H	6	0.19
(2,454)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:H	6	0.19
(2,454)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:H	6	0.19
(2,454)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:H	7	0.19
(2,454)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:H	7	0.19
(2,454)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:H	7	0.19
(2,454)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:H	8	0.19
(2,454)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:H	8	0.19
(2,454)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:H	8	0.19
(2,441)	1:8:A:TYR:HA	1:10:A:GLN:H	9	0.19
(2,427)	1:12:A:LEU:HB2	1:16:A:GLY:H	1	0.19
(2,427)	1:12:A:LEU:HB2	1:16:A:GLY:H	5	0.19
(2,417)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:H	10	0.19
(2,313)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD21	10	0.19
(2,313)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD22	10	0.19
(2,313)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD23	10	0.19
(2,300)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HA	7	0.19
(2,300)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HA	7	0.19
(2,240)	1:14:A:GLU:H	1:14:A:GLU:HG3	9	0.19
(2,173)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG21	1	0.19
(2,173)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG22	1	0.19
(2,173)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG23	1	0.19
(2,173)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG21	2	0.19
(2,173)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG22	2	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,173)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG23	2	0.19
(2,173)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG21	3	0.19
(2,173)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG22	3	0.19
(2,173)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG23	3	0.19
(2,173)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG21	6	0.19
(2,173)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG22	6	0.19
(2,173)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG23	6	0.19
(2,173)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG21	9	0.19
(2,173)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG22	9	0.19
(2,173)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG23	9	0.19
(2,133)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD21	1	0.19
(2,133)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD22	1	0.19
(2,133)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD23	1	0.19
(2,133)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD21	2	0.19
(2,133)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD22	2	0.19
(2,133)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD23	2	0.19
(2,85)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HG3	8	0.19
(1,638)	1:9:A:ILE:HA	1:11:A:TRP:HE3	2	0.19
(1,626)	1:2:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	1	0.19
(1,626)	1:2:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	1	0.19
(1,626)	1:2:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	1	0.19
(1,623)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HG2	1	0.19
(1,623)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HG2	2	0.19
(1,623)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HG2	5	0.19
(1,623)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HG2	6	0.19
(1,623)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HG2	7	0.19
(1,613)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HG3	2	0.19
(1,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG11	2	0.19
(1,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG12	2	0.19
(1,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG13	2	0.19
(1,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG11	2	0.19
(1,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG12	2	0.19
(1,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG13	2	0.19
(1,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG11	2	0.19
(1,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG12	2	0.19
(1,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG13	2	0.19
(1,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	2	0.19
(1,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	2	0.19
(1,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	2	0.19
(1,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	2	0.19
(1,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	2	0.19
(1,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	2	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	2	0.19
(1,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	2	0.19
(1,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	2	0.19
(1,504)	1:24:A:PRO:HG2	1:24:A:PRO:HG3	9	0.19
(1,491)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB3	6	0.19
(1,486)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:HA	3	0.19
(1,458)	1:19:A:SER:HB3	1:21:A:ARG:H	7	0.19
(1,453)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:H	10	0.19
(1,453)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:H	10	0.19
(1,453)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:H	10	0.19
(1,453)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:H	10	0.19
(1,453)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:H	10	0.19
(1,453)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:H	10	0.19
(1,438)	1:18:A:SER:HA	1:20:A:GLY:H	8	0.19
(1,430)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:H	4	0.19
(1,366)	1:11:A:TRP:HE1	1:22:A:PRO:HA	4	0.19
(1,348)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB2	3	0.19
(1,333)	1:11:A:TRP:HZ2	1:22:A:PRO:HA	6	0.19
(1,303)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB3	2	0.19
(1,303)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB3	2	0.19
(1,281)	1:18:A:SER:H	1:18:A:SER:HB2	4	0.19
(1,281)	1:18:A:SER:H	1:18:A:SER:HB3	4	0.19
(1,250)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG2	1	0.19
(1,250)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG3	1	0.19
(1,250)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG2	2	0.19
(1,250)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG3	2	0.19
(1,250)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG2	3	0.19
(1,250)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG3	3	0.19
(1,250)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG2	4	0.19
(1,250)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG3	4	0.19
(1,250)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG2	5	0.19
(1,250)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG3	5	0.19
(1,250)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG2	6	0.19
(1,250)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG3	6	0.19
(1,250)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG2	7	0.19
(1,250)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG3	7	0.19
(1,250)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG2	8	0.19
(1,250)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG3	8	0.19
(1,250)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG2	9	0.19
(1,250)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG3	9	0.19
(1,250)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG2	10	0.19
(1,250)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG3	10	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,249)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG2	1	0.19
(1,249)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG3	1	0.19
(1,249)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG2	5	0.19
(1,249)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG3	5	0.19
(1,249)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG2	7	0.19
(1,249)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG3	7	0.19
(1,249)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG2	9	0.19
(1,249)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG3	9	0.19
(1,246)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HD3	1	0.19
(1,246)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HD3	3	0.19
(1,246)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HD3	5	0.19
(1,246)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HD3	6	0.19
(1,246)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HD3	7	0.19
(1,246)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HD3	9	0.19
(1,196)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HG	5	0.19
(1,196)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HG	10	0.19
(1,177)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG2	3	0.19
(1,177)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG2	10	0.19
(1,157)	1:9:A:ILE:H	1:10:A:GLN:H	8	0.19
(1,148)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HG2	6	0.19
(1,129)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD11	3	0.19
(1,129)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD12	3	0.19
(1,129)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD13	3	0.19
(1,124)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HB3	6	0.19
(1,124)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HB3	8	0.19
(1,124)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HB3	9	0.19
(1,124)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HB3	10	0.19
(1,118)	1:6:A:ARG:H	1:7:A:LEU:H	4	0.19
(1,115)	1:25:A:SER:HA	1:25:A:SER:HB2	9	0.19
(1,115)	1:25:A:SER:HA	1:25:A:SER:HB3	9	0.19
(1,95)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD2	3	0.19
(1,95)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD3	3	0.19
(1,92)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	3	0.19
(1,92)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD3	3	0.19
(1,82)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HG3	5	0.19
(1,82)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HG3	6	0.19
(1,80)	1:22:A:PRO:HD3	1:22:A:PRO:HG3	8	0.19
(1,72)	1:22:A:PRO:HD2	1:22:A:PRO:HD3	2	0.19
(1,72)	1:22:A:PRO:HD2	1:22:A:PRO:HD3	3	0.19
(1,72)	1:22:A:PRO:HD2	1:22:A:PRO:HD3	4	0.19
(1,72)	1:22:A:PRO:HD2	1:22:A:PRO:HD3	5	0.19
(1,72)	1:22:A:PRO:HD2	1:22:A:PRO:HD3	6	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,72)	1:22:A:PRO:HD2	1:22:A:PRO:HD3	7	0.19
(1,72)	1:22:A:PRO:HD2	1:22:A:PRO:HD3	9	0.19
(1,72)	1:22:A:PRO:HD2	1:22:A:PRO:HD3	10	0.19
(1,62)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HG3	2	0.19
(1,60)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HB3	1	0.19
(1,60)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HB3	2	0.19
(1,60)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HB3	7	0.19
(1,60)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HB3	8	0.19
(1,60)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HB3	10	0.19
(1,35)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HG3	9	0.19
(1,35)	1:21:A:ARG:HD3	1:21:A:ARG:HG3	9	0.19
(4,33)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:H	6	0.18
(4,29)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HB2	9	0.18
(4,29)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HB2	9	0.18
(4,29)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HB2	9	0.18
(4,29)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HB3	9	0.18
(4,29)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HB3	9	0.18
(4,29)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HB3	9	0.18
(4,14)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD21	4	0.18
(4,14)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD22	4	0.18
(4,14)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD23	4	0.18
(4,10)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG21	7	0.18
(4,10)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG22	7	0.18
(4,10)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG23	7	0.18
(4,10)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG21	8	0.18
(4,10)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG22	8	0.18
(4,10)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG23	8	0.18
(4,10)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG21	10	0.18
(4,10)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG22	10	0.18
(4,10)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG23	10	0.18
(3,596)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD11	1	0.18
(3,596)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD12	1	0.18
(3,596)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD13	1	0.18
(3,596)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD11	1	0.18
(3,596)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD12	1	0.18
(3,596)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD13	1	0.18
(3,596)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD11	1	0.18
(3,596)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD12	1	0.18
(3,596)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD13	1	0.18
(3,522)	1:10:A:GLN:HE22	1:14:A:GLU:HB2	1	0.18
(3,522)	1:10:A:GLN:HE22	1:14:A:GLU:HB3	1	0.18
(3,522)	1:10:A:GLN:HE22	1:14:A:GLU:HB2	2	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,522)	1:10:A:GLN:HE22	1:14:A:GLU:HB3	2	0.18
(3,522)	1:10:A:GLN:HE22	1:14:A:GLU:HB2	10	0.18
(3,522)	1:10:A:GLN:HE22	1:14:A:GLU:HB3	10	0.18
(3,504)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA2	1	0.18
(3,504)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA2	1	0.18
(3,504)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA2	1	0.18
(3,504)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA2	6	0.18
(3,504)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA2	6	0.18
(3,504)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA2	6	0.18
(3,500)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB3	4	0.18
(3,500)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB3	4	0.18
(3,500)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB3	4	0.18
(3,446)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:H	7	0.18
(3,441)	1:24:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	10	0.18
(3,420)	1:8:A:TYR:HA	1:10:A:GLN:H	6	0.18
(3,420)	1:8:A:TYR:HA	1:10:A:GLN:H	7	0.18
(3,407)	1:12:A:LEU:HB2	1:16:A:GLY:H	6	0.18
(3,407)	1:12:A:LEU:HB2	1:16:A:GLY:H	10	0.18
(3,397)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:H	9	0.18
(3,314)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB2	8	0.18
(3,314)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB3	8	0.18
(3,288)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HA	8	0.18
(3,288)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HA	8	0.18
(2,635)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD11	1	0.18
(2,635)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD12	1	0.18
(2,635)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD13	1	0.18
(2,635)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD11	1	0.18
(2,635)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD12	1	0.18
(2,635)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD13	1	0.18
(2,635)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD11	1	0.18
(2,635)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD12	1	0.18
(2,635)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD13	1	0.18
(2,570)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:H	6	0.18
(2,552)	1:10:A:GLN:HE22	1:14:A:GLU:HB2	1	0.18
(2,552)	1:10:A:GLN:HE22	1:14:A:GLU:HB3	1	0.18
(2,552)	1:10:A:GLN:HE22	1:14:A:GLU:HB2	2	0.18
(2,552)	1:10:A:GLN:HE22	1:14:A:GLU:HB3	2	0.18
(2,552)	1:10:A:GLN:HE22	1:14:A:GLU:HB2	10	0.18
(2,552)	1:10:A:GLN:HE22	1:14:A:GLU:HB3	10	0.18
(2,542)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HB2	9	0.18
(2,542)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HB2	9	0.18
(2,542)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HB2	9	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,542)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HB3	9	0.18
(2,542)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HB3	9	0.18
(2,542)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HB3	9	0.18
(2,532)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA2	1	0.18
(2,532)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA2	1	0.18
(2,532)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA2	1	0.18
(2,532)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA2	6	0.18
(2,532)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA2	6	0.18
(2,532)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA2	6	0.18
(2,528)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB3	4	0.18
(2,528)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB3	4	0.18
(2,528)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB3	4	0.18
(2,472)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:H	7	0.18
(2,467)	1:24:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	10	0.18
(2,441)	1:8:A:TYR:HA	1:10:A:GLN:H	6	0.18
(2,441)	1:8:A:TYR:HA	1:10:A:GLN:H	7	0.18
(2,427)	1:12:A:LEU:HB2	1:16:A:GLY:H	6	0.18
(2,427)	1:12:A:LEU:HB2	1:16:A:GLY:H	10	0.18
(2,417)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:H	9	0.18
(2,329)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB2	8	0.18
(2,329)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB3	8	0.18
(2,313)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD21	4	0.18
(2,313)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD22	4	0.18
(2,313)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD23	4	0.18
(2,300)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HA	8	0.18
(2,300)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HA	8	0.18
(2,173)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG21	7	0.18
(2,173)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG22	7	0.18
(2,173)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG23	7	0.18
(2,173)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG21	8	0.18
(2,173)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG22	8	0.18
(2,173)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG23	8	0.18
(2,173)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG21	10	0.18
(2,173)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG22	10	0.18
(2,173)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG23	10	0.18
(1,641)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	2	0.18
(1,641)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	3	0.18
(1,641)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	7	0.18
(1,638)	1:9:A:ILE:HA	1:11:A:TRP:HE3	5	0.18
(1,637)	1:2:A:GLU:HB3	1:6:A:ARG:H	3	0.18
(1,621)	1:1:A:GLU:HB2	1:1:A:GLU:HG2	7	0.18
(1,621)	1:1:A:GLU:HB3	1:1:A:GLU:HG2	7	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,599)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HG	10	0.18
(1,589)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:H	4	0.18
(1,493)	1:21:A:ARG:HB2	1:22:A:PRO:HD2	7	0.18
(1,493)	1:21:A:ARG:HB3	1:22:A:PRO:HD2	7	0.18
(1,464)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:H	6	0.18
(1,461)	1:17:A:PRO:HD2	1:18:A:SER:H	7	0.18
(1,425)	1:16:A:GLY:H	1:19:A:SER:HB2	8	0.18
(1,399)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:H	5	0.18
(1,396)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:H	1	0.18
(1,366)	1:11:A:TRP:HE1	1:22:A:PRO:HA	3	0.18
(1,356)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD11	1	0.18
(1,356)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD12	1	0.18
(1,356)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD13	1	0.18
(1,348)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB2	10	0.18
(1,334)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HA	1	0.18
(1,333)	1:11:A:TRP:HZ2	1:22:A:PRO:HA	8	0.18
(1,246)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HD3	2	0.18
(1,246)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HD3	4	0.18
(1,246)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HD3	8	0.18
(1,246)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HD3	10	0.18
(1,200)	1:12:A:LEU:HD21	1:12:A:LEU:HG	3	0.18
(1,200)	1:12:A:LEU:HD22	1:12:A:LEU:HG	3	0.18
(1,200)	1:12:A:LEU:HD23	1:12:A:LEU:HG	3	0.18
(1,200)	1:12:A:LEU:HD21	1:12:A:LEU:HG	6	0.18
(1,200)	1:12:A:LEU:HD22	1:12:A:LEU:HG	6	0.18
(1,200)	1:12:A:LEU:HD23	1:12:A:LEU:HG	6	0.18
(1,200)	1:12:A:LEU:HD21	1:12:A:LEU:HG	7	0.18
(1,200)	1:12:A:LEU:HD22	1:12:A:LEU:HG	7	0.18
(1,200)	1:12:A:LEU:HD23	1:12:A:LEU:HG	7	0.18
(1,200)	1:12:A:LEU:HD21	1:12:A:LEU:HG	8	0.18
(1,200)	1:12:A:LEU:HD22	1:12:A:LEU:HG	8	0.18
(1,200)	1:12:A:LEU:HD23	1:12:A:LEU:HG	8	0.18
(1,177)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG2	2	0.18
(1,160)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG12	7	0.18
(1,160)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG12	8	0.18
(1,160)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG12	9	0.18
(1,160)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG12	10	0.18
(1,153)	1:6:A:ARG:HD2	1:6:A:ARG:HE	5	0.18
(1,129)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD11	8	0.18
(1,129)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD12	8	0.18
(1,129)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD13	8	0.18
(1,129)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD11	9	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,129)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD12	9	0.18
(1,129)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD13	9	0.18
(1,125)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HG	6	0.18
(1,124)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HB3	3	0.18
(1,82)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HG3	10	0.18
(1,72)	1:22:A:PRO:HD2	1:22:A:PRO:HD3	1	0.18
(1,72)	1:22:A:PRO:HD2	1:22:A:PRO:HD3	8	0.18
(1,60)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HB3	3	0.18
(1,60)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HB3	4	0.18
(1,60)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HB3	5	0.18
(1,35)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HG3	7	0.18
(1,35)	1:21:A:ARG:HD3	1:21:A:ARG:HG3	7	0.18
(1,34)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HG2	10	0.18
(1,34)	1:21:A:ARG:HD3	1:21:A:ARG:HG2	10	0.18
(1,33)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD2	1	0.18
(1,33)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD3	1	0.18
(1,33)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HD2	1	0.18
(1,33)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HD3	1	0.18
(1,28)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HB2	7	0.18
(4,22)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:H	9	0.17
(4,22)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:H	9	0.17
(3,597)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HG12	3	0.17
(3,597)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HG12	3	0.17
(3,597)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HG12	9	0.17
(3,597)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HG12	9	0.17
(3,530)	1:11:A:TRP:HE3	1:24:A:PRO:HD3	4	0.17
(3,522)	1:10:A:GLN:HE22	1:14:A:GLU:HB2	4	0.17
(3,522)	1:10:A:GLN:HE22	1:14:A:GLU:HB3	4	0.17
(3,522)	1:10:A:GLN:HE22	1:14:A:GLU:HB2	7	0.17
(3,522)	1:10:A:GLN:HE22	1:14:A:GLU:HB3	7	0.17
(3,487)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB1	4	0.17
(3,487)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB2	4	0.17
(3,487)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB3	4	0.17
(3,486)	1:2:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB1	6	0.17
(3,486)	1:2:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB2	6	0.17
(3,486)	1:2:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB3	6	0.17
(3,484)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HB2	9	0.17
(3,288)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HA	6	0.17
(3,288)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HA	6	0.17
(3,143)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HB3	3	0.17
(3,129)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD11	4	0.17
(3,129)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD12	4	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,129)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD13	4	0.17
(2,636)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HG12	3	0.17
(2,636)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HG12	3	0.17
(2,636)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HG12	9	0.17
(2,636)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HG12	9	0.17
(2,561)	1:11:A:TRP:HE3	1:24:A:PRO:HD3	4	0.17
(2,552)	1:10:A:GLN:HE22	1:14:A:GLU:HB2	4	0.17
(2,552)	1:10:A:GLN:HE22	1:14:A:GLU:HB3	4	0.17
(2,552)	1:10:A:GLN:HE22	1:14:A:GLU:HB2	7	0.17
(2,552)	1:10:A:GLN:HE22	1:14:A:GLU:HB3	7	0.17
(2,515)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB1	4	0.17
(2,515)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB2	4	0.17
(2,515)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB3	4	0.17
(2,513)	1:2:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB1	6	0.17
(2,513)	1:2:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB2	6	0.17
(2,513)	1:2:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB3	6	0.17
(2,511)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HB2	9	0.17
(2,446)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:H	9	0.17
(2,446)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:H	9	0.17
(2,300)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HA	6	0.17
(2,300)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HA	6	0.17
(2,150)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HB3	3	0.17
(2,132)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD11	4	0.17
(2,132)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD12	4	0.17
(2,132)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD13	4	0.17
(1,641)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	4	0.17
(1,641)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	8	0.17
(1,638)	1:9:A:ILE:HA	1:11:A:TRP:HE3	4	0.17
(1,635)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD11	6	0.17
(1,635)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD12	6	0.17
(1,635)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD13	6	0.17
(1,635)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD11	6	0.17
(1,635)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD12	6	0.17
(1,635)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD13	6	0.17
(1,635)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD11	6	0.17
(1,635)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD12	6	0.17
(1,635)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD13	6	0.17
(1,635)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HD11	6	0.17
(1,635)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HD12	6	0.17
(1,635)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HD13	6	0.17
(1,635)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HD11	6	0.17
(1,635)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HD12	6	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,635)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HD13	6	0.17
(1,635)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HD11	6	0.17
(1,635)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HD12	6	0.17
(1,635)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HD13	6	0.17
(1,634)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HG3	2	0.17
(1,634)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HG3	2	0.17
(1,634)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HG3	2	0.17
(1,634)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HG3	5	0.17
(1,634)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HG3	5	0.17
(1,634)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HG3	5	0.17
(1,623)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HG2	3	0.17
(1,623)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HG2	8	0.17
(1,623)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HG2	10	0.17
(1,599)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HG	6	0.17
(1,579)	1:10:A:GLN:HB3	1:11:A:TRP:H	10	0.17
(1,504)	1:24:A:PRO:HG2	1:24:A:PRO:HG3	1	0.17
(1,504)	1:24:A:PRO:HG2	1:24:A:PRO:HG3	2	0.17
(1,504)	1:24:A:PRO:HG2	1:24:A:PRO:HG3	4	0.17
(1,504)	1:24:A:PRO:HG2	1:24:A:PRO:HG3	5	0.17
(1,493)	1:21:A:ARG:HB2	1:22:A:PRO:HD2	8	0.17
(1,493)	1:21:A:ARG:HB3	1:22:A:PRO:HD2	8	0.17
(1,491)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB3	10	0.17
(1,463)	1:24:A:PRO:HD2	1:25:A:SER:H	7	0.17
(1,425)	1:16:A:GLY:H	1:19:A:SER:HB2	6	0.17
(1,399)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:H	1	0.17
(1,344)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG2	9	0.17
(1,344)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG3	9	0.17
(1,319)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HD1	7	0.17
(1,274)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HB3	7	0.17
(1,274)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HB3	8	0.17
(1,274)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HB3	9	0.17
(1,200)	1:12:A:LEU:HD21	1:12:A:LEU:HG	1	0.17
(1,200)	1:12:A:LEU:HD22	1:12:A:LEU:HG	1	0.17
(1,200)	1:12:A:LEU:HD23	1:12:A:LEU:HG	1	0.17
(1,200)	1:12:A:LEU:HD21	1:12:A:LEU:HG	2	0.17
(1,200)	1:12:A:LEU:HD22	1:12:A:LEU:HG	2	0.17
(1,200)	1:12:A:LEU:HD23	1:12:A:LEU:HG	2	0.17
(1,200)	1:12:A:LEU:HD21	1:12:A:LEU:HG	4	0.17
(1,200)	1:12:A:LEU:HD22	1:12:A:LEU:HG	4	0.17
(1,200)	1:12:A:LEU:HD23	1:12:A:LEU:HG	4	0.17
(1,200)	1:12:A:LEU:HD21	1:12:A:LEU:HG	5	0.17
(1,200)	1:12:A:LEU:HD22	1:12:A:LEU:HG	5	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,200)	1:12:A:LEU:HD23	1:12:A:LEU:HG	5	0.17
(1,200)	1:12:A:LEU:HD21	1:12:A:LEU:HG	10	0.17
(1,200)	1:12:A:LEU:HD22	1:12:A:LEU:HG	10	0.17
(1,200)	1:12:A:LEU:HD23	1:12:A:LEU:HG	10	0.17
(1,196)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HG	1	0.17
(1,196)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HG	2	0.17
(1,196)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HG	4	0.17
(1,177)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG2	8	0.17
(1,160)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG12	1	0.17
(1,160)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG12	2	0.17
(1,160)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG12	3	0.17
(1,157)	1:9:A:ILE:H	1:10:A:GLN:H	3	0.17
(1,125)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HG	10	0.17
(1,124)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HB3	7	0.17
(1,122)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HG	4	0.17
(1,122)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HG	5	0.17
(1,116)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HB2	3	0.17
(1,116)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HB3	3	0.17
(1,115)	1:25:A:SER:HA	1:25:A:SER:HB2	3	0.17
(1,115)	1:25:A:SER:HA	1:25:A:SER:HB3	3	0.17
(1,113)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HG3	9	0.17
(1,92)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	8	0.17
(1,92)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD3	8	0.17
(1,82)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HG3	7	0.17
(1,82)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HG3	8	0.17
(1,82)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HG3	9	0.17
(1,75)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD2	1	0.17
(1,62)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HG3	1	0.17
(1,58)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HG2	6	0.17
(1,49)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG3	10	0.17
(1,43)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HE	1	0.17
(1,43)	1:21:A:ARG:HD3	1:21:A:ARG:HE	1	0.17
(1,33)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD2	6	0.17
(1,33)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD3	6	0.17
(1,33)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HD2	6	0.17
(1,33)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HD3	6	0.17
(1,28)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HB2	4	0.17
(4,36)	1:11:A:TRP:HE3	1:23:A:PRO:HB3	10	0.16
(4,26)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:H	10	0.16
(4,26)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:H	10	0.16
(4,26)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:H	10	0.16
(4,14)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD21	1	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,14)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD22	1	0.16
(4,14)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD23	1	0.16
(4,14)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD21	2	0.16
(4,14)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD22	2	0.16
(4,14)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD23	2	0.16
(4,11)	1:14:A:GLU:HB3	1:14:A:GLU:HG3	5	0.16
(3,605)	1:11:A:TRP:HE3	1:23:A:PRO:HB2	3	0.16
(3,605)	1:11:A:TRP:HE3	1:23:A:PRO:HB2	8	0.16
(3,532)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	3	0.16
(3,532)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	3	0.16
(3,532)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	3	0.16
(3,532)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	3	0.16
(3,532)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	3	0.16
(3,532)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	3	0.16
(3,530)	1:11:A:TRP:HE3	1:24:A:PRO:HD3	1	0.16
(3,530)	1:11:A:TRP:HE3	1:24:A:PRO:HD3	2	0.16
(3,487)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB1	1	0.16
(3,487)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB2	1	0.16
(3,487)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB3	1	0.16
(3,446)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:H	4	0.16
(3,420)	1:8:A:TYR:HA	1:10:A:GLN:H	2	0.16
(3,420)	1:8:A:TYR:HA	1:10:A:GLN:H	4	0.16
(3,288)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HA	10	0.16
(3,288)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HA	10	0.16
(3,279)	1:10:A:GLN:HE21	1:14:A:GLU:HG2	1	0.16
(3,225)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HG3	3	0.16
(3,225)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HG3	4	0.16
(2,646)	1:11:A:TRP:HE3	1:23:A:PRO:HB2	3	0.16
(2,646)	1:11:A:TRP:HE3	1:23:A:PRO:HB2	8	0.16
(2,594)	1:11:A:TRP:HE3	1:23:A:PRO:HB3	10	0.16
(2,563)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	3	0.16
(2,563)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	3	0.16
(2,563)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	3	0.16
(2,563)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	3	0.16
(2,563)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	3	0.16
(2,563)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	3	0.16
(2,561)	1:11:A:TRP:HE3	1:24:A:PRO:HD3	1	0.16
(2,561)	1:11:A:TRP:HE3	1:24:A:PRO:HD3	2	0.16
(2,515)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB1	1	0.16
(2,515)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB2	1	0.16
(2,515)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB3	1	0.16
(2,472)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:H	4	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,454)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:H	10	0.16
(2,454)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:H	10	0.16
(2,454)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:H	10	0.16
(2,441)	1:8:A:TYR:HA	1:10:A:GLN:H	2	0.16
(2,441)	1:8:A:TYR:HA	1:10:A:GLN:H	4	0.16
(2,313)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD21	1	0.16
(2,313)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD22	1	0.16
(2,313)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD23	1	0.16
(2,313)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD21	2	0.16
(2,313)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD22	2	0.16
(2,313)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD23	2	0.16
(2,300)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HA	10	0.16
(2,300)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HA	10	0.16
(2,291)	1:10:A:GLN:HE21	1:14:A:GLU:HG2	1	0.16
(2,239)	1:14:A:GLU:HB3	1:14:A:GLU:HG3	5	0.16
(2,235)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HG3	3	0.16
(2,235)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HG3	4	0.16
(1,634)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HG3	1	0.16
(1,634)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HG3	1	0.16
(1,634)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HG3	1	0.16
(1,626)	1:2:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	8	0.16
(1,626)	1:2:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	8	0.16
(1,626)	1:2:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	8	0.16
(1,621)	1:1:A:GLU:HB2	1:1:A:GLU:HG2	10	0.16
(1,621)	1:1:A:GLU:HB3	1:1:A:GLU:HG2	10	0.16
(1,579)	1:10:A:GLN:HB3	1:11:A:TRP:H	9	0.16
(1,528)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB3	3	0.16
(1,528)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB3	3	0.16
(1,528)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB3	3	0.16
(1,528)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HB3	3	0.16
(1,528)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HB3	3	0.16
(1,528)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HB3	3	0.16
(1,528)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB3	6	0.16
(1,528)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB3	6	0.16
(1,528)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB3	6	0.16
(1,528)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HB3	6	0.16
(1,528)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HB3	6	0.16
(1,528)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HB3	6	0.16
(1,496)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD2	9	0.16
(1,496)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	9	0.16
(1,464)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:H	10	0.16
(1,458)	1:19:A:SER:HB3	1:21:A:ARG:H	9	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,438)	1:18:A:SER:HA	1:20:A:GLY:H	7	0.16
(1,425)	1:16:A:GLY:H	1:19:A:SER:HB2	1	0.16
(1,334)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HA	7	0.16
(1,317)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB2	8	0.16
(1,317)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB2	8	0.16
(1,303)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB3	1	0.16
(1,303)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB3	1	0.16
(1,289)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HG2	1	0.16
(1,289)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HG3	1	0.16
(1,289)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HG2	4	0.16
(1,289)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HG3	4	0.16
(1,274)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HB3	1	0.16
(1,274)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HB3	3	0.16
(1,274)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HB3	5	0.16
(1,274)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HB3	10	0.16
(1,200)	1:12:A:LEU:HD21	1:12:A:LEU:HG	9	0.16
(1,200)	1:12:A:LEU:HD22	1:12:A:LEU:HG	9	0.16
(1,200)	1:12:A:LEU:HD23	1:12:A:LEU:HG	9	0.16
(1,177)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG2	6	0.16
(1,177)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG2	9	0.16
(1,160)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG12	4	0.16
(1,160)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG12	6	0.16
(1,157)	1:9:A:ILE:H	1:10:A:GLN:H	7	0.16
(1,154)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:H	10	0.16
(1,95)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD2	2	0.16
(1,95)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD3	2	0.16
(1,82)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HG3	3	0.16
(1,58)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HG2	9	0.16
(1,28)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HB2	1	0.16
(1,28)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HB2	2	0.16
(1,28)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HB2	5	0.16
(1,12)	1:20:A:GLY:H	1:20:A:GLY:HA2	5	0.16
(4,28)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HB2	4	0.15
(4,28)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HB2	4	0.15
(4,28)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HB2	4	0.15
(4,26)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:H	9	0.15
(4,26)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:H	9	0.15
(4,26)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:H	9	0.15
(3,596)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD11	2	0.15
(3,596)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD12	2	0.15
(3,596)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD13	2	0.15
(3,596)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD11	2	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,596)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD12	2	0.15
(3,596)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD13	2	0.15
(3,596)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD11	2	0.15
(3,596)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD12	2	0.15
(3,596)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD13	2	0.15
(3,530)	1:11:A:TRP:HE3	1:24:A:PRO:HD3	5	0.15
(3,530)	1:11:A:TRP:HE3	1:24:A:PRO:HD3	7	0.15
(3,504)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA2	3	0.15
(3,504)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA2	3	0.15
(3,504)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA2	3	0.15
(3,488)	1:12:A:LEU:HB3	1:13:A:LYS:HG3	9	0.15
(3,420)	1:8:A:TYR:HA	1:10:A:GLN:H	1	0.15
(3,420)	1:8:A:TYR:HA	1:10:A:GLN:H	5	0.15
(3,389)	1:6:A:ARG:HG2	1:7:A:LEU:H	1	0.15
(3,294)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HG	4	0.15
(3,294)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HG	4	0.15
(3,229)	1:14:A:GLU:H	1:14:A:GLU:HG3	5	0.15
(3,129)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD11	1	0.15
(3,129)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD12	1	0.15
(3,129)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD13	1	0.15
(3,129)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD11	2	0.15
(3,129)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD12	2	0.15
(3,129)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD13	2	0.15
(2,635)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD11	2	0.15
(2,635)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD12	2	0.15
(2,635)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD13	2	0.15
(2,635)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD11	2	0.15
(2,635)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD12	2	0.15
(2,635)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD13	2	0.15
(2,635)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD11	2	0.15
(2,635)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD12	2	0.15
(2,635)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD13	2	0.15
(2,561)	1:11:A:TRP:HE3	1:24:A:PRO:HD3	5	0.15
(2,561)	1:11:A:TRP:HE3	1:24:A:PRO:HD3	7	0.15
(2,532)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA2	3	0.15
(2,532)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA2	3	0.15
(2,532)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA2	3	0.15
(2,516)	1:12:A:LEU:HB3	1:13:A:LYS:HG3	9	0.15
(2,514)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HB2	4	0.15
(2,514)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HB2	4	0.15
(2,514)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HB2	4	0.15
(2,454)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:H	9	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,454)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:H	9	0.15
(2,454)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:H	9	0.15
(2,441)	1:8:A:TYR:HA	1:10:A:GLN:H	1	0.15
(2,441)	1:8:A:TYR:HA	1:10:A:GLN:H	5	0.15
(2,409)	1:6:A:ARG:HG2	1:7:A:LEU:H	1	0.15
(2,306)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HG	4	0.15
(2,306)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HG	4	0.15
(2,240)	1:14:A:GLU:H	1:14:A:GLU:HG3	5	0.15
(2,132)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD11	1	0.15
(2,132)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD12	1	0.15
(2,132)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD13	1	0.15
(2,132)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD11	2	0.15
(2,132)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD12	2	0.15
(2,132)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD13	2	0.15
(1,643)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB3	6	0.15
(1,641)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	1	0.15
(1,641)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	5	0.15
(1,633)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HG3	1	0.15
(1,633)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HG3	1	0.15
(1,633)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HG3	1	0.15
(1,633)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HG3	1	0.15
(1,633)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HG3	1	0.15
(1,633)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HG3	1	0.15
(1,621)	1:1:A:GLU:HB2	1:1:A:GLU:HG2	6	0.15
(1,621)	1:1:A:GLU:HB3	1:1:A:GLU:HG2	6	0.15
(1,599)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HG	8	0.15
(1,590)	1:2:A:GLU:HB2	1:5:A:VAL:H	6	0.15
(1,537)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD21	7	0.15
(1,537)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD22	7	0.15
(1,537)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD23	7	0.15
(1,537)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD21	7	0.15
(1,537)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD22	7	0.15
(1,537)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD23	7	0.15
(1,537)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD21	8	0.15
(1,537)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD22	8	0.15
(1,537)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD23	8	0.15
(1,537)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD21	8	0.15
(1,537)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD22	8	0.15
(1,537)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD23	8	0.15
(1,528)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB3	10	0.15
(1,528)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB3	10	0.15
(1,528)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB3	10	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,528)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HB3	10	0.15
(1,528)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HB3	10	0.15
(1,528)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HB3	10	0.15
(1,496)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD2	7	0.15
(1,496)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	7	0.15
(1,491)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB3	9	0.15
(1,463)	1:24:A:PRO:HD2	1:25:A:SER:H	6	0.15
(1,453)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:H	8	0.15
(1,453)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:H	8	0.15
(1,453)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:H	8	0.15
(1,453)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:H	8	0.15
(1,453)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:H	8	0.15
(1,453)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:H	8	0.15
(1,438)	1:18:A:SER:HA	1:20:A:GLY:H	9	0.15
(1,428)	1:18:A:SER:HA	1:19:A:SER:H	10	0.15
(1,356)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD11	9	0.15
(1,356)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD12	9	0.15
(1,356)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD13	9	0.15
(1,333)	1:11:A:TRP:HZ2	1:22:A:PRO:HA	10	0.15
(1,319)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HD1	8	0.15
(1,319)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HD1	9	0.15
(1,274)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HB3	4	0.15
(1,267)	1:3:A:GLU:HB2	1:3:A:GLU:HB3	6	0.15
(1,257)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG11	4	0.15
(1,257)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG12	4	0.15
(1,257)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG13	4	0.15
(1,257)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG21	4	0.15
(1,257)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG22	4	0.15
(1,257)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG23	4	0.15
(1,218)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HE2	2	0.15
(1,218)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HE2	2	0.15
(1,196)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HG	9	0.15
(1,177)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG2	5	0.15
(1,154)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:H	3	0.15
(1,154)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:H	8	0.15
(1,125)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HG	3	0.15
(1,125)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HG	8	0.15
(1,124)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HB3	1	0.15
(1,124)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HB3	2	0.15
(1,98)	1:23:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD3	1	0.15
(1,98)	1:23:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD3	2	0.15
(1,98)	1:23:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD3	4	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,80)	1:22:A:PRO:HD3	1:22:A:PRO:HG3	1	0.15
(1,62)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HG3	10	0.15
(1,49)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG3	3	0.15
(1,43)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HE	8	0.15
(1,43)	1:21:A:ARG:HD3	1:21:A:ARG:HE	8	0.15
(1,34)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HG2	3	0.15
(1,34)	1:21:A:ARG:HD3	1:21:A:ARG:HG2	3	0.15
(4,11)	1:14:A:GLU:HB3	1:14:A:GLU:HG3	10	0.14
(4,5)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:H	7	0.14
(3,541)	1:6:A:ARG:HB3	1:7:A:LEU:H	8	0.14
(3,522)	1:10:A:GLN:HE22	1:14:A:GLU:HB2	5	0.14
(3,522)	1:10:A:GLN:HE22	1:14:A:GLU:HB3	5	0.14
(3,522)	1:10:A:GLN:HE22	1:14:A:GLU:HB2	8	0.14
(3,522)	1:10:A:GLN:HE22	1:14:A:GLU:HB3	8	0.14
(3,500)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB3	8	0.14
(3,500)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB3	8	0.14
(3,500)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB3	8	0.14
(3,488)	1:12:A:LEU:HB3	1:13:A:LYS:HG3	2	0.14
(3,487)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB1	2	0.14
(3,487)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB2	2	0.14
(3,487)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB3	2	0.14
(3,487)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB1	5	0.14
(3,487)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB2	5	0.14
(3,487)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB3	5	0.14
(3,486)	1:2:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB1	7	0.14
(3,486)	1:2:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB2	7	0.14
(3,486)	1:2:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB3	7	0.14
(3,430)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:H	7	0.14
(3,430)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:H	7	0.14
(3,430)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:H	7	0.14
(3,385)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:HB3	1	0.14
(3,294)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HG	1	0.14
(3,294)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HG	1	0.14
(3,294)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HG	10	0.14
(3,294)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HG	10	0.14
(3,129)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD11	5	0.14
(3,129)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD12	5	0.14
(3,129)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD13	5	0.14
(2,574)	1:6:A:ARG:HB3	1:7:A:LEU:H	8	0.14
(2,552)	1:10:A:GLN:HE22	1:14:A:GLU:HB2	5	0.14
(2,552)	1:10:A:GLN:HE22	1:14:A:GLU:HB3	5	0.14
(2,552)	1:10:A:GLN:HE22	1:14:A:GLU:HB2	8	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,552)	1:10:A:GLN:HE22	1:14:A:GLU:HB3	8	0.14
(2,528)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB3	8	0.14
(2,528)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB3	8	0.14
(2,528)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB3	8	0.14
(2,516)	1:12:A:LEU:HB3	1:13:A:LYS:HG3	2	0.14
(2,515)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB1	2	0.14
(2,515)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB2	2	0.14
(2,515)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB3	2	0.14
(2,515)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB1	5	0.14
(2,515)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB2	5	0.14
(2,515)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB3	5	0.14
(2,513)	1:2:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB1	7	0.14
(2,513)	1:2:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB2	7	0.14
(2,513)	1:2:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB3	7	0.14
(2,456)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:H	7	0.14
(2,456)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:H	7	0.14
(2,456)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:H	7	0.14
(2,405)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:HB3	1	0.14
(2,306)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HG	1	0.14
(2,306)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HG	1	0.14
(2,306)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HG	10	0.14
(2,306)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HG	10	0.14
(2,239)	1:14:A:GLU:HB3	1:14:A:GLU:HG3	10	0.14
(2,137)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:H	7	0.14
(2,132)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD11	5	0.14
(2,132)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD12	5	0.14
(2,132)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD13	5	0.14
(1,641)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	6	0.14
(1,566)	1:19:A:SER:H	1:21:A:ARG:H	10	0.14
(1,468)	1:24:A:PRO:HG2	1:25:A:SER:H	4	0.14
(1,341)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	5	0.14
(1,341)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	8	0.14
(1,341)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	9	0.14
(1,319)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HD1	2	0.14
(1,319)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HD1	3	0.14
(1,319)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HD1	4	0.14
(1,319)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HD1	5	0.14
(1,319)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HD1	6	0.14
(1,319)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HD1	10	0.14
(1,293)	1:10:A:GLN:HE21	1:14:A:GLU:HG3	10	0.14
(1,280)	1:18:A:SER:HA	1:18:A:SER:HB2	10	0.14
(1,280)	1:18:A:SER:HA	1:18:A:SER:HB3	10	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,277)	1:2:A:GLU:HB3	1:2:A:GLU:HG2	1	0.14
(1,277)	1:2:A:GLU:HB3	1:2:A:GLU:HG2	6	0.14
(1,274)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HB3	2	0.14
(1,274)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HB3	6	0.14
(1,267)	1:3:A:GLU:HB2	1:3:A:GLU:HB3	3	0.14
(1,267)	1:3:A:GLU:HB2	1:3:A:GLU:HB3	5	0.14
(1,267)	1:3:A:GLU:HB2	1:3:A:GLU:HB3	7	0.14
(1,267)	1:3:A:GLU:HB2	1:3:A:GLU:HB3	8	0.14
(1,267)	1:3:A:GLU:HB2	1:3:A:GLU:HB3	9	0.14
(1,267)	1:3:A:GLU:HB2	1:3:A:GLU:HB3	10	0.14
(1,257)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG11	5	0.14
(1,257)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG12	5	0.14
(1,257)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG13	5	0.14
(1,257)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG21	5	0.14
(1,257)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG22	5	0.14
(1,257)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG23	5	0.14
(1,257)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG11	6	0.14
(1,257)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG12	6	0.14
(1,257)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG13	6	0.14
(1,257)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG21	6	0.14
(1,257)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG22	6	0.14
(1,257)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG23	6	0.14
(1,218)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HE2	5	0.14
(1,218)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HE2	5	0.14
(1,218)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HE2	9	0.14
(1,218)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HE2	9	0.14
(1,177)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG2	4	0.14
(1,177)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG2	7	0.14
(1,157)	1:9:A:ILE:H	1:10:A:GLN:H	1	0.14
(1,157)	1:9:A:ILE:H	1:10:A:GLN:H	2	0.14
(1,157)	1:9:A:ILE:H	1:10:A:GLN:H	4	0.14
(1,157)	1:9:A:ILE:H	1:10:A:GLN:H	5	0.14
(1,157)	1:9:A:ILE:H	1:10:A:GLN:H	10	0.14
(1,154)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:H	9	0.14
(1,153)	1:6:A:ARG:HD2	1:6:A:ARG:HE	8	0.14
(1,126)	1:7:A:LEU:HD11	1:7:A:LEU:HG	1	0.14
(1,126)	1:7:A:LEU:HD12	1:7:A:LEU:HG	1	0.14
(1,126)	1:7:A:LEU:HD13	1:7:A:LEU:HG	1	0.14
(1,126)	1:7:A:LEU:HD11	1:7:A:LEU:HG	2	0.14
(1,126)	1:7:A:LEU:HD12	1:7:A:LEU:HG	2	0.14
(1,126)	1:7:A:LEU:HD13	1:7:A:LEU:HG	2	0.14
(1,126)	1:7:A:LEU:HD11	1:7:A:LEU:HG	3	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,126)	1:7:A:LEU:HD12	1:7:A:LEU:HG	3	0.14
(1,126)	1:7:A:LEU:HD13	1:7:A:LEU:HG	3	0.14
(1,126)	1:7:A:LEU:HD11	1:7:A:LEU:HG	4	0.14
(1,126)	1:7:A:LEU:HD12	1:7:A:LEU:HG	4	0.14
(1,126)	1:7:A:LEU:HD13	1:7:A:LEU:HG	4	0.14
(1,126)	1:7:A:LEU:HD11	1:7:A:LEU:HG	5	0.14
(1,126)	1:7:A:LEU:HD12	1:7:A:LEU:HG	5	0.14
(1,126)	1:7:A:LEU:HD13	1:7:A:LEU:HG	5	0.14
(1,126)	1:7:A:LEU:HD11	1:7:A:LEU:HG	6	0.14
(1,126)	1:7:A:LEU:HD12	1:7:A:LEU:HG	6	0.14
(1,126)	1:7:A:LEU:HD13	1:7:A:LEU:HG	6	0.14
(1,126)	1:7:A:LEU:HD11	1:7:A:LEU:HG	8	0.14
(1,126)	1:7:A:LEU:HD12	1:7:A:LEU:HG	8	0.14
(1,126)	1:7:A:LEU:HD13	1:7:A:LEU:HG	8	0.14
(1,126)	1:7:A:LEU:HD11	1:7:A:LEU:HG	9	0.14
(1,126)	1:7:A:LEU:HD12	1:7:A:LEU:HG	9	0.14
(1,126)	1:7:A:LEU:HD13	1:7:A:LEU:HG	9	0.14
(1,124)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HB3	4	0.14
(1,124)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HB3	5	0.14
(1,122)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HG	1	0.14
(1,115)	1:25:A:SER:HA	1:25:A:SER:HB2	5	0.14
(1,115)	1:25:A:SER:HA	1:25:A:SER:HB3	5	0.14
(1,100)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD3	3	0.14
(1,100)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD3	9	0.14
(1,100)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD3	10	0.14
(1,98)	1:23:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD3	7	0.14
(1,98)	1:23:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD3	8	0.14
(1,95)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD2	1	0.14
(1,95)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD3	1	0.14
(1,95)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD2	4	0.14
(1,95)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD3	4	0.14
(1,95)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD2	5	0.14
(1,95)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD3	5	0.14
(1,95)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD2	7	0.14
(1,95)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD3	7	0.14
(1,92)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	9	0.14
(1,92)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD3	9	0.14
(1,82)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HG3	1	0.14
(1,71)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HB3	2	0.14
(1,54)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HD3	5	0.14
(1,43)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HE	2	0.14
(1,43)	1:21:A:ARG:HD3	1:21:A:ARG:HE	2	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,43)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HE	7	0.14
(1,43)	1:21:A:ARG:HD3	1:21:A:ARG:HE	7	0.14
(4,14)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD21	9	0.13
(4,14)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD22	9	0.13
(4,14)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD23	9	0.13
(4,11)	1:14:A:GLU:HB3	1:14:A:GLU:HG3	6	0.13
(3,603)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:HE3	7	0.13
(3,488)	1:12:A:LEU:HB3	1:13:A:LYS:HG3	1	0.13
(3,486)	1:2:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB1	10	0.13
(3,486)	1:2:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB2	10	0.13
(3,486)	1:2:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB3	10	0.13
(3,430)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:H	1	0.13
(3,430)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:H	1	0.13
(3,430)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:H	1	0.13
(3,430)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:H	2	0.13
(3,430)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:H	2	0.13
(3,430)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:H	2	0.13
(3,430)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:H	3	0.13
(3,430)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:H	3	0.13
(3,430)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:H	3	0.13
(3,430)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:H	4	0.13
(3,430)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:H	4	0.13
(3,430)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:H	4	0.13
(3,430)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:H	10	0.13
(3,430)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:H	10	0.13
(3,430)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:H	10	0.13
(3,389)	1:6:A:ARG:HG2	1:7:A:LEU:H	4	0.13
(3,389)	1:6:A:ARG:HG2	1:7:A:LEU:H	10	0.13
(3,385)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:HB3	2	0.13
(3,314)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB2	5	0.13
(3,314)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB3	5	0.13
(3,294)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HG	2	0.13
(3,294)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HG	2	0.13
(3,294)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HG	6	0.13
(3,294)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HG	6	0.13
(3,294)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HG	7	0.13
(3,294)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HG	7	0.13
(3,292)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG2	7	0.13
(3,292)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG2	7	0.13
(3,225)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HG3	1	0.13
(3,225)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HG3	2	0.13
(2,644)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:HE3	7	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,516)	1:12:A:LEU:HB3	1:13:A:LYS:HG3	1	0.13
(2,513)	1:2:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB1	10	0.13
(2,513)	1:2:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB2	10	0.13
(2,513)	1:2:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB3	10	0.13
(2,456)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:H	1	0.13
(2,456)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:H	1	0.13
(2,456)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:H	1	0.13
(2,456)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:H	2	0.13
(2,456)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:H	2	0.13
(2,456)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:H	2	0.13
(2,456)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:H	3	0.13
(2,456)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:H	3	0.13
(2,456)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:H	3	0.13
(2,456)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:H	4	0.13
(2,456)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:H	4	0.13
(2,456)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:H	4	0.13
(2,456)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:H	10	0.13
(2,456)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:H	10	0.13
(2,456)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:H	10	0.13
(2,409)	1:6:A:ARG:HG2	1:7:A:LEU:H	4	0.13
(2,409)	1:6:A:ARG:HG2	1:7:A:LEU:H	10	0.13
(2,405)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:HB3	2	0.13
(2,329)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB2	5	0.13
(2,329)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB3	5	0.13
(2,313)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD21	9	0.13
(2,313)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD22	9	0.13
(2,313)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD23	9	0.13
(2,306)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HG	2	0.13
(2,306)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HG	2	0.13
(2,306)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HG	6	0.13
(2,306)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HG	6	0.13
(2,306)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HG	7	0.13
(2,306)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HG	7	0.13
(2,304)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG2	7	0.13
(2,304)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG2	7	0.13
(2,239)	1:14:A:GLU:HB3	1:14:A:GLU:HG3	6	0.13
(2,235)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HG3	1	0.13
(2,235)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HG3	2	0.13
(1,625)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HG2	1	0.13
(1,625)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HG2	1	0.13
(1,621)	1:1:A:GLU:HB2	1:1:A:GLU:HG2	5	0.13
(1,621)	1:1:A:GLU:HB3	1:1:A:GLU:HG2	5	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,621)	1:1:A:GLU:HB2	1:1:A:GLU:HG2	9	0.13
(1,621)	1:1:A:GLU:HB3	1:1:A:GLU:HG2	9	0.13
(1,615)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HA	6	0.13
(1,615)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HA	10	0.13
(1,599)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HG	3	0.13
(1,596)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HG13	10	0.13
(1,596)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HG13	10	0.13
(1,566)	1:19:A:SER:H	1:21:A:ARG:H	4	0.13
(1,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG11	5	0.13
(1,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG12	5	0.13
(1,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG13	5	0.13
(1,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG11	5	0.13
(1,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG12	5	0.13
(1,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG13	5	0.13
(1,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG11	5	0.13
(1,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG12	5	0.13
(1,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG13	5	0.13
(1,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	5	0.13
(1,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	5	0.13
(1,547)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	5	0.13
(1,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	5	0.13
(1,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	5	0.13
(1,547)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	5	0.13
(1,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	5	0.13
(1,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	5	0.13
(1,547)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	5	0.13
(1,505)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG3	8	0.13
(1,505)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HG3	8	0.13
(1,425)	1:16:A:GLY:H	1:19:A:SER:HB2	4	0.13
(1,399)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:H	2	0.13
(1,396)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:H	7	0.13
(1,385)	1:20:A:GLY:H	1:21:A:ARG:H	5	0.13
(1,366)	1:11:A:TRP:HE1	1:22:A:PRO:HA	5	0.13
(1,341)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	2	0.13
(1,341)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	6	0.13
(1,319)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HD1	1	0.13
(1,303)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB3	7	0.13
(1,303)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB3	7	0.13
(1,291)	1:10:A:GLN:HE21	1:14:A:GLU:HG2	9	0.13
(1,280)	1:18:A:SER:HA	1:18:A:SER:HB2	5	0.13
(1,280)	1:18:A:SER:HA	1:18:A:SER:HB3	5	0.13
(1,277)	1:2:A:GLU:HB3	1:2:A:GLU:HG2	8	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,267)	1:3:A:GLU:HB2	1:3:A:GLU:HB3	1	0.13
(1,267)	1:3:A:GLU:HB2	1:3:A:GLU:HB3	2	0.13
(1,267)	1:3:A:GLU:HB2	1:3:A:GLU:HB3	4	0.13
(1,257)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG11	1	0.13
(1,257)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG12	1	0.13
(1,257)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG13	1	0.13
(1,257)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG21	1	0.13
(1,257)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG22	1	0.13
(1,257)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG23	1	0.13
(1,257)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG11	2	0.13
(1,257)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG12	2	0.13
(1,257)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG13	2	0.13
(1,257)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG21	2	0.13
(1,257)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG22	2	0.13
(1,257)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG23	2	0.13
(1,257)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG11	3	0.13
(1,257)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG12	3	0.13
(1,257)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG13	3	0.13
(1,257)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG21	3	0.13
(1,257)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG22	3	0.13
(1,257)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG23	3	0.13
(1,257)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG11	7	0.13
(1,257)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG12	7	0.13
(1,257)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG13	7	0.13
(1,257)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG21	7	0.13
(1,257)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG22	7	0.13
(1,257)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG23	7	0.13
(1,257)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG11	8	0.13
(1,257)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG12	8	0.13
(1,257)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG13	8	0.13
(1,257)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG21	8	0.13
(1,257)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG22	8	0.13
(1,257)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG23	8	0.13
(1,257)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG11	9	0.13
(1,257)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG12	9	0.13
(1,257)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG13	9	0.13
(1,257)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG21	9	0.13
(1,257)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG22	9	0.13
(1,257)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG23	9	0.13
(1,257)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG11	10	0.13
(1,257)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG12	10	0.13
(1,257)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG13	10	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,257)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG21	10	0.13
(1,257)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG22	10	0.13
(1,257)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG23	10	0.13
(1,218)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HE2	4	0.13
(1,218)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HE2	4	0.13
(1,218)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HE2	7	0.13
(1,218)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HE2	7	0.13
(1,160)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG12	5	0.13
(1,157)	1:9:A:ILE:H	1:10:A:GLN:H	6	0.13
(1,154)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:H	6	0.13
(1,154)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:H	7	0.13
(1,126)	1:7:A:LEU:HD11	1:7:A:LEU:HG	10	0.13
(1,126)	1:7:A:LEU:HD12	1:7:A:LEU:HG	10	0.13
(1,126)	1:7:A:LEU:HD13	1:7:A:LEU:HG	10	0.13
(1,125)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HG	9	0.13
(1,122)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HG	2	0.13
(1,115)	1:25:A:SER:HA	1:25:A:SER:HB2	10	0.13
(1,115)	1:25:A:SER:HA	1:25:A:SER:HB3	10	0.13
(1,98)	1:23:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD3	10	0.13
(1,71)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HB3	1	0.13
(1,71)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HB3	4	0.13
(1,71)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HB3	5	0.13
(1,62)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HG3	9	0.13
(1,43)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HE	3	0.13
(1,43)	1:21:A:ARG:HD3	1:21:A:ARG:HE	3	0.13
(1,43)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HE	4	0.13
(1,43)	1:21:A:ARG:HD3	1:21:A:ARG:HE	4	0.13
(1,43)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HE	5	0.13
(1,43)	1:21:A:ARG:HD3	1:21:A:ARG:HE	5	0.13
(1,43)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HE	6	0.13
(1,43)	1:21:A:ARG:HD3	1:21:A:ARG:HE	6	0.13
(1,43)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HE	9	0.13
(1,43)	1:21:A:ARG:HD3	1:21:A:ARG:HE	9	0.13
(1,34)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HG2	2	0.13
(1,34)	1:21:A:ARG:HD3	1:21:A:ARG:HG2	2	0.13
(1,28)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HB2	3	0.13
(1,28)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HB2	10	0.13
(3,617)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD2	2	0.12
(3,617)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	2	0.12
(3,551)	1:19:A:SER:HA	1:20:A:GLY:H	5	0.12
(3,532)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	8	0.12
(3,532)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	8	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,532)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	8	0.12
(3,532)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	8	0.12
(3,532)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	8	0.12
(3,532)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	8	0.12
(3,504)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA2	2	0.12
(3,504)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA2	2	0.12
(3,504)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA2	2	0.12
(3,504)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA2	10	0.12
(3,504)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA2	10	0.12
(3,504)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA2	10	0.12
(3,500)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB3	3	0.12
(3,500)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB3	3	0.12
(3,500)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB3	3	0.12
(3,488)	1:12:A:LEU:HB3	1:13:A:LYS:HG3	4	0.12
(3,486)	1:2:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB1	2	0.12
(3,486)	1:2:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB2	2	0.12
(3,486)	1:2:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB3	2	0.12
(3,457)	1:10:A:GLN:HA	1:13:A:LYS:HD2	9	0.12
(3,457)	1:10:A:GLN:HA	1:13:A:LYS:HD3	9	0.12
(3,430)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:H	8	0.12
(3,430)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:H	8	0.12
(3,430)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:H	8	0.12
(3,430)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:H	9	0.12
(3,430)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:H	9	0.12
(3,430)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:H	9	0.12
(3,389)	1:6:A:ARG:HG2	1:7:A:LEU:H	7	0.12
(3,294)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HG	8	0.12
(3,294)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HG	8	0.12
(3,277)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HG2	6	0.12
(3,277)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HG3	6	0.12
(2,662)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD2	2	0.12
(2,662)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	2	0.12
(2,585)	1:19:A:SER:HA	1:20:A:GLY:H	5	0.12
(2,563)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	8	0.12
(2,563)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	8	0.12
(2,563)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	8	0.12
(2,563)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	8	0.12
(2,563)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	8	0.12
(2,563)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	8	0.12
(2,532)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA2	2	0.12
(2,532)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA2	2	0.12
(2,532)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA2	2	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,532)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA2	10	0.12
(2,532)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA2	10	0.12
(2,532)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA2	10	0.12
(2,528)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB3	3	0.12
(2,528)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB3	3	0.12
(2,528)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB3	3	0.12
(2,516)	1:12:A:LEU:HB3	1:13:A:LYS:HG3	4	0.12
(2,513)	1:2:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB1	2	0.12
(2,513)	1:2:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB2	2	0.12
(2,513)	1:2:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB3	2	0.12
(2,483)	1:10:A:GLN:HA	1:13:A:LYS:HD2	9	0.12
(2,483)	1:10:A:GLN:HA	1:13:A:LYS:HD3	9	0.12
(2,456)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:H	8	0.12
(2,456)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:H	8	0.12
(2,456)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:H	8	0.12
(2,456)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:H	9	0.12
(2,456)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:H	9	0.12
(2,456)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:H	9	0.12
(2,409)	1:6:A:ARG:HG2	1:7:A:LEU:H	7	0.12
(2,306)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HG	8	0.12
(2,306)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HG	8	0.12
(2,289)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HG2	6	0.12
(2,289)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HG3	6	0.12
(1,621)	1:1:A:GLU:HB2	1:1:A:GLU:HG2	1	0.12
(1,621)	1:1:A:GLU:HB3	1:1:A:GLU:HG2	1	0.12
(1,615)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HA	5	0.12
(1,579)	1:10:A:GLN:HB3	1:11:A:TRP:H	3	0.12
(1,544)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG13	5	0.12
(1,544)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG13	5	0.12
(1,544)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG13	5	0.12
(1,520)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD11	9	0.12
(1,520)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD12	9	0.12
(1,520)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD13	9	0.12
(1,496)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD2	2	0.12
(1,496)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	2	0.12
(1,475)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:H	4	0.12
(1,475)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:H	4	0.12
(1,475)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:H	4	0.12
(1,469)	1:23:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	2	0.12
(1,461)	1:17:A:PRO:HD2	1:18:A:SER:H	1	0.12
(1,428)	1:18:A:SER:HA	1:19:A:SER:H	3	0.12
(1,364)	1:11:A:TRP:HE1	1:19:A:SER:HB2	7	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,344)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG2	2	0.12
(1,344)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG3	2	0.12
(1,341)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	4	0.12
(1,341)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	7	0.12
(1,341)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	10	0.12
(1,333)	1:11:A:TRP:HZ2	1:22:A:PRO:HA	4	0.12
(1,293)	1:10:A:GLN:HE21	1:14:A:GLU:HG3	9	0.12
(1,281)	1:18:A:SER:H	1:18:A:SER:HB2	3	0.12
(1,281)	1:18:A:SER:H	1:18:A:SER:HB3	3	0.12
(1,281)	1:18:A:SER:H	1:18:A:SER:HB2	6	0.12
(1,281)	1:18:A:SER:H	1:18:A:SER:HB3	6	0.12
(1,218)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HE2	6	0.12
(1,218)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HE2	6	0.12
(1,205)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HG	2	0.12
(1,205)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HG	10	0.12
(1,163)	1:9:A:ILE:HG12	1:9:A:ILE:HG13	1	0.12
(1,163)	1:9:A:ILE:HG12	1:9:A:ILE:HG13	2	0.12
(1,163)	1:9:A:ILE:HG12	1:9:A:ILE:HG13	3	0.12
(1,163)	1:9:A:ILE:HG12	1:9:A:ILE:HG13	4	0.12
(1,163)	1:9:A:ILE:HG12	1:9:A:ILE:HG13	5	0.12
(1,163)	1:9:A:ILE:HG12	1:9:A:ILE:HG13	6	0.12
(1,163)	1:9:A:ILE:HG12	1:9:A:ILE:HG13	7	0.12
(1,163)	1:9:A:ILE:HG12	1:9:A:ILE:HG13	8	0.12
(1,163)	1:9:A:ILE:HG12	1:9:A:ILE:HG13	9	0.12
(1,163)	1:9:A:ILE:HG12	1:9:A:ILE:HG13	10	0.12
(1,140)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HB3	1	0.12
(1,140)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HB3	2	0.12
(1,140)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HB3	3	0.12
(1,140)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HB3	4	0.12
(1,140)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HB3	5	0.12
(1,140)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HB3	6	0.12
(1,140)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HB3	7	0.12
(1,140)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HB3	10	0.12
(1,118)	1:6:A:ARG:H	1:7:A:LEU:H	1	0.12
(1,118)	1:6:A:ARG:H	1:7:A:LEU:H	5	0.12
(1,98)	1:23:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD3	5	0.12
(1,71)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HB3	6	0.12
(1,71)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HB3	8	0.12
(1,44)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HD2	8	0.12
(1,28)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HB2	8	0.12
(4,36)	1:11:A:TRP:HE3	1:23:A:PRO:HB3	3	0.11
(4,11)	1:14:A:GLU:HB3	1:14:A:GLU:HG3	9	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,603)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:HE3	9	0.11
(3,543)	1:6:A:ARG:H	1:7:A:LEU:HG	5	0.11
(3,532)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	5	0.11
(3,532)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	5	0.11
(3,532)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	5	0.11
(3,532)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	5	0.11
(3,532)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	5	0.11
(3,532)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	5	0.11
(3,532)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	6	0.11
(3,532)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	6	0.11
(3,532)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	6	0.11
(3,532)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	6	0.11
(3,532)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	6	0.11
(3,532)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	6	0.11
(3,532)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	10	0.11
(3,532)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	10	0.11
(3,532)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	10	0.11
(3,532)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	10	0.11
(3,532)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	10	0.11
(3,532)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	10	0.11
(3,530)	1:11:A:TRP:HE3	1:24:A:PRO:HD3	3	0.11
(3,504)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA2	5	0.11
(3,504)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA2	5	0.11
(3,504)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA2	5	0.11
(3,488)	1:12:A:LEU:HB3	1:13:A:LYS:HG3	10	0.11
(3,454)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HA	1	0.11
(3,454)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HA	6	0.11
(3,446)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:H	6	0.11
(3,430)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:H	5	0.11
(3,430)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:H	5	0.11
(3,430)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:H	5	0.11
(3,430)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:H	6	0.11
(3,430)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:H	6	0.11
(3,430)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:H	6	0.11
(3,419)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:H	9	0.11
(3,402)	1:11:A:TRP:HA	1:16:A:GLY:H	7	0.11
(3,390)	1:6:A:ARG:HG3	1:7:A:LEU:H	3	0.11
(3,385)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:HB3	4	0.11
(3,385)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:HB3	5	0.11
(3,378)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:H	6	0.11
(3,286)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE1	6	0.11
(3,286)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE2	6	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,223)	1:14:A:GLU:H	1:14:A:GLU:HG2	3	0.11
(3,223)	1:14:A:GLU:H	1:14:A:GLU:HG2	4	0.11
(3,131)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB3	1	0.11
(3,131)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB3	2	0.11
(3,131)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB3	5	0.11
(3,102)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HB2	1	0.11
(3,102)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HB2	2	0.11
(3,85)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HG3	2	0.11
(3,85)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HG3	4	0.11
(3,85)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HG3	5	0.11
(3,85)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HG3	7	0.11
(3,83)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HG2	1	0.11
(3,32)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD2	10	0.11
(3,32)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD3	10	0.11
(2,644)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:HE3	9	0.11
(2,594)	1:11:A:TRP:HE3	1:23:A:PRO:HB3	3	0.11
(2,576)	1:6:A:ARG:H	1:7:A:LEU:HG	5	0.11
(2,563)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	5	0.11
(2,563)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	5	0.11
(2,563)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	5	0.11
(2,563)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	5	0.11
(2,563)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	5	0.11
(2,563)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	5	0.11
(2,563)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	6	0.11
(2,563)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	6	0.11
(2,563)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	6	0.11
(2,563)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	6	0.11
(2,563)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	6	0.11
(2,563)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	6	0.11
(2,563)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	10	0.11
(2,563)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	10	0.11
(2,563)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	10	0.11
(2,563)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	10	0.11
(2,563)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	10	0.11
(2,563)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	10	0.11
(2,561)	1:11:A:TRP:HE3	1:24:A:PRO:HD3	3	0.11
(2,532)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA2	5	0.11
(2,532)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA2	5	0.11
(2,532)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA2	5	0.11
(2,516)	1:12:A:LEU:HB3	1:13:A:LYS:HG3	10	0.11
(2,480)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HA	1	0.11
(2,480)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HA	6	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,472)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:H	6	0.11
(2,456)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:H	5	0.11
(2,456)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:H	5	0.11
(2,456)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:H	5	0.11
(2,456)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:H	6	0.11
(2,456)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:H	6	0.11
(2,456)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:H	6	0.11
(2,440)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:H	9	0.11
(2,422)	1:11:A:TRP:HA	1:16:A:GLY:H	7	0.11
(2,410)	1:6:A:ARG:HG3	1:7:A:LEU:H	3	0.11
(2,405)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:HB3	4	0.11
(2,405)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:HB3	5	0.11
(2,398)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:H	6	0.11
(2,298)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE1	6	0.11
(2,298)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE2	6	0.11
(2,239)	1:14:A:GLU:HB3	1:14:A:GLU:HG3	9	0.11
(2,233)	1:14:A:GLU:H	1:14:A:GLU:HG2	3	0.11
(2,233)	1:14:A:GLU:H	1:14:A:GLU:HG2	4	0.11
(2,134)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB3	1	0.11
(2,134)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB3	2	0.11
(2,134)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB3	5	0.11
(2,102)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HB2	1	0.11
(2,102)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HB2	2	0.11
(2,85)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HG3	2	0.11
(2,85)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HG3	4	0.11
(2,85)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HG3	5	0.11
(2,85)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HG3	7	0.11
(2,83)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HG2	1	0.11
(2,32)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD2	10	0.11
(2,32)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD3	10	0.11
(1,637)	1:2:A:GLU:HB3	1:6:A:ARG:H	6	0.11
(1,635)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD11	8	0.11
(1,635)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD12	8	0.11
(1,635)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD13	8	0.11
(1,635)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD11	8	0.11
(1,635)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD12	8	0.11
(1,635)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD13	8	0.11
(1,635)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD11	8	0.11
(1,635)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD12	8	0.11
(1,635)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD13	8	0.11
(1,635)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HD11	8	0.11
(1,635)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HD12	8	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,635)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HD13	8	0.11
(1,635)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HD11	8	0.11
(1,635)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HD12	8	0.11
(1,635)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HD13	8	0.11
(1,635)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HD11	8	0.11
(1,635)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HD12	8	0.11
(1,635)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HD13	8	0.11
(1,628)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	7	0.11
(1,628)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	7	0.11
(1,628)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	7	0.11
(1,615)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HA	1	0.11
(1,615)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HA	2	0.11
(1,615)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HA	4	0.11
(1,615)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HA	7	0.11
(1,596)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HG13	6	0.11
(1,596)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HG13	6	0.11
(1,579)	1:10:A:GLN:HB3	1:11:A:TRP:H	2	0.11
(1,579)	1:10:A:GLN:HB3	1:11:A:TRP:H	6	0.11
(1,518)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HA	10	0.11
(1,518)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HA	10	0.11
(1,518)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HA	10	0.11
(1,518)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HA	10	0.11
(1,518)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HA	10	0.11
(1,518)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HA	10	0.11
(1,428)	1:18:A:SER:HA	1:19:A:SER:H	8	0.11
(1,399)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:H	10	0.11
(1,366)	1:11:A:TRP:HE1	1:22:A:PRO:HA	7	0.11
(1,344)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG2	5	0.11
(1,344)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG3	5	0.11
(1,341)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	1	0.11
(1,341)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	3	0.11
(1,333)	1:11:A:TRP:HZ2	1:22:A:PRO:HA	3	0.11
(1,303)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB3	5	0.11
(1,303)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB3	5	0.11
(1,303)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB3	6	0.11
(1,303)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB3	6	0.11
(1,277)	1:2:A:GLU:HB3	1:2:A:GLU:HG2	7	0.11
(1,223)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HG3	1	0.11
(1,223)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HG3	1	0.11
(1,205)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HG	1	0.11
(1,205)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HG	4	0.11
(1,205)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HG	9	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,153)	1:6:A:ARG:HD2	1:6:A:ARG:HE	10	0.11
(1,140)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HB3	8	0.11
(1,128)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD21	6	0.11
(1,128)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD22	6	0.11
(1,128)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD23	6	0.11
(1,126)	1:7:A:LEU:HD11	1:7:A:LEU:HG	7	0.11
(1,126)	1:7:A:LEU:HD12	1:7:A:LEU:HG	7	0.11
(1,126)	1:7:A:LEU:HD13	1:7:A:LEU:HG	7	0.11
(1,115)	1:25:A:SER:HA	1:25:A:SER:HB2	7	0.11
(1,115)	1:25:A:SER:HA	1:25:A:SER:HB3	7	0.11
(1,113)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HG3	3	0.11
(1,113)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HG3	6	0.11
(1,113)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HG3	10	0.11
(1,71)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HB3	7	0.11
(1,71)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HB3	9	0.11
(1,41)	1:21:A:ARG:HE	1:21:A:ARG:HG2	10	0.11
(1,34)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HG2	1	0.11
(1,34)	1:21:A:ARG:HD3	1:21:A:ARG:HG2	1	0.11
(3,597)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HG12	1	0.1
(3,597)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HG12	1	0.1
(3,568)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HB3	3	0.1
(3,543)	1:6:A:ARG:H	1:7:A:LEU:HG	1	0.1
(3,532)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	9	0.1
(3,532)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	9	0.1
(3,532)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	9	0.1
(3,532)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	9	0.1
(3,532)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	9	0.1
(3,532)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	9	0.1
(3,504)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA2	4	0.1
(3,504)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA2	4	0.1
(3,504)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA2	4	0.1
(3,486)	1:2:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB1	3	0.1
(3,486)	1:2:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB2	3	0.1
(3,486)	1:2:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB3	3	0.1
(3,385)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:HB3	9	0.1
(3,378)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:H	5	0.1
(3,378)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:H	9	0.1
(3,279)	1:10:A:GLN:HE21	1:14:A:GLU:HG2	3	0.1
(3,119)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HG	7	0.1
(3,102)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HB2	5	0.1
(3,37)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HB2	4	0.1
(3,37)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HB3	4	0.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,636)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HG12	1	0.1
(2,636)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HG12	1	0.1
(2,604)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HB3	3	0.1
(2,576)	1:6:A:ARG:H	1:7:A:LEU:HG	1	0.1
(2,563)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	9	0.1
(2,563)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	9	0.1
(2,563)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	9	0.1
(2,563)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	9	0.1
(2,563)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	9	0.1
(2,563)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	9	0.1
(2,532)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA2	4	0.1
(2,532)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA2	4	0.1
(2,532)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA2	4	0.1
(2,513)	1:2:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB1	3	0.1
(2,513)	1:2:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB2	3	0.1
(2,513)	1:2:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB3	3	0.1
(2,405)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:HB3	9	0.1
(2,398)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:H	5	0.1
(2,398)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:H	9	0.1
(2,291)	1:10:A:GLN:HE21	1:14:A:GLU:HG2	3	0.1
(2,122)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HG	7	0.1
(2,102)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HB2	5	0.1
(2,37)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HB2	4	0.1
(2,37)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HB3	4	0.1
(1,625)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HG2	2	0.1
(1,625)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HG2	2	0.1
(1,615)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HA	3	0.1
(1,498)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HD2	2	0.1
(1,348)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB2	7	0.1
(1,333)	1:11:A:TRP:HZ2	1:22:A:PRO:HA	5	0.1
(1,232)	1:13:A:LYS:H	1:14:A:GLU:H	7	0.1
(1,223)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HG3	3	0.1
(1,223)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HG3	3	0.1
(1,205)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HG	6	0.1
(1,177)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG2	1	0.1
(1,157)	1:9:A:ILE:H	1:10:A:GLN:H	9	0.1
(1,128)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD21	10	0.1
(1,128)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD22	10	0.1
(1,128)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD23	10	0.1
(1,115)	1:25:A:SER:HA	1:25:A:SER:HB2	8	0.1
(1,115)	1:25:A:SER:HA	1:25:A:SER:HB3	8	0.1
(1,113)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HG3	8	0.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,71)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HB3	10	0.1
(1,62)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HG3	6	0.1
(1,44)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HD2	5	0.1

10 Dihedral-angle violation analysis

No dihedral-angle restraints found