



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 8, 2026 – 09:19 AM UTC

PDB ID : 5KQJ / pdb_00005kqj
BMRB ID : 30133
Title : Solution Structure of Antibiotic-Resistance Factor ANT(2'')-Ia Reveals Substrate-Regulated Conformation Dynamics
Authors : Bacot-Davis, V.R.; Berghuis, A.M.
Deposited on : 2016-07-06

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

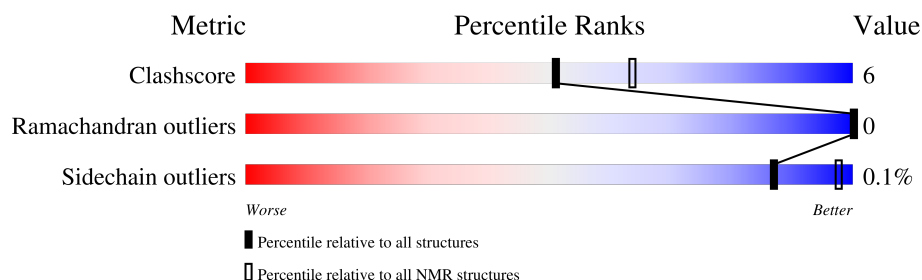
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment is 81%.

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	185	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 15 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: *lowest energy*.

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:9-A:128 (120)	1.01	6
2	A:145-A:180 (36)	0.34	7

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

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

The models can be grouped into 2 clusters. No single-model clusters were found.

Cluster number	Models
1	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10
2	11, 12, 13, 14, 15

3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 2857 atoms, of which 1379 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called 2''-aminoglycoside nucleotidyltransferase.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	185	Total	C	H	N	O	S	0
			2857	937	1379	257	277	7	

There are 8 discrepancies between the modelled and reference sequences:

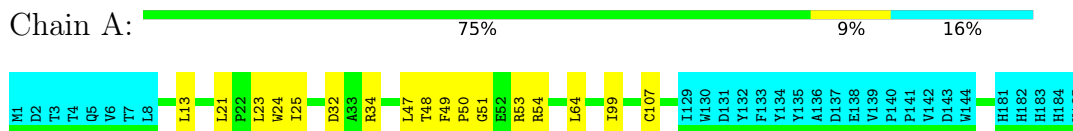
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	178	LEU	-	expression tag	UNP P0AE05
A	179	GLU	-	expression tag	UNP P0AE05
A	180	HIS	-	expression tag	UNP P0AE05
A	181	HIS	-	expression tag	UNP P0AE05
A	182	HIS	-	expression tag	UNP P0AE05
A	183	HIS	-	expression tag	UNP P0AE05
A	184	HIS	-	expression tag	UNP P0AE05
A	185	HIS	-	expression tag	UNP P0AE05

4 Residue-property plots

4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

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

- Molecule 1: 2'-aminoglycoside nucleotidyltransferase

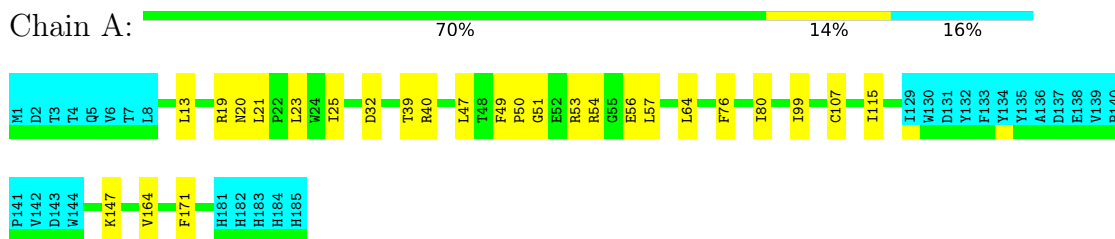


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

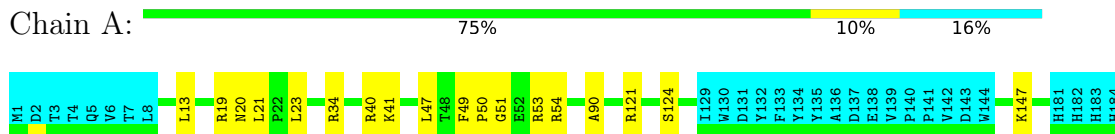
4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: 2'-aminoglycoside nucleotidyltransferase



4.2.2 Score per residue for model 2

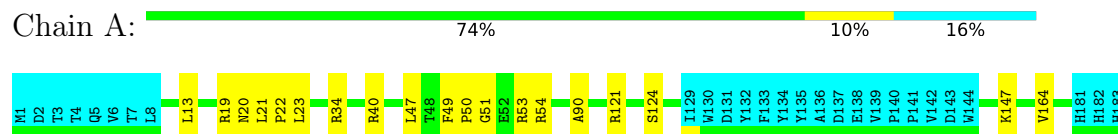
- Molecule 1: 2'-aminoglycoside nucleotidyltransferase



H185

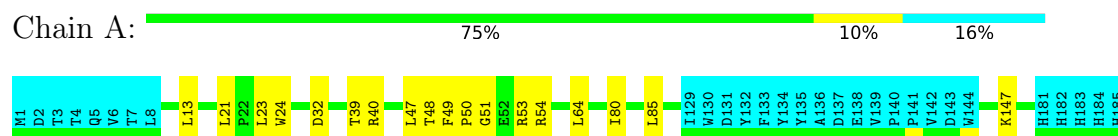
4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: 2''-aminoglycoside nucleotidyltransferase

H184
H185

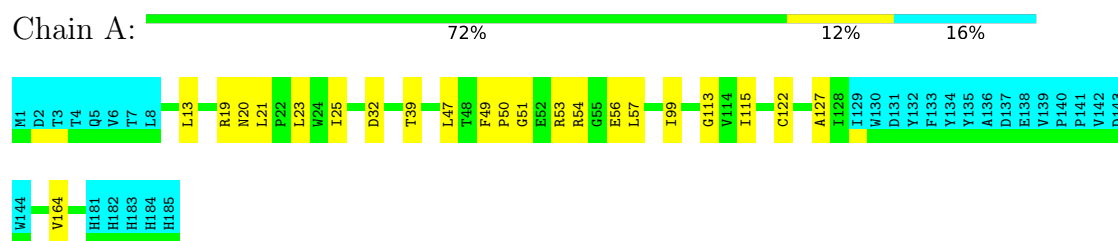
4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: 2''-aminoglycoside nucleotidyltransferase



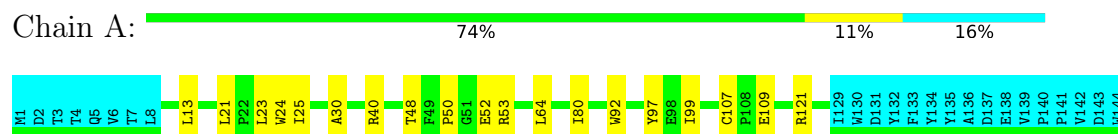
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: 2''-aminoglycoside nucleotidyltransferase



4.2.6 Score per residue for model 6 (medoid)

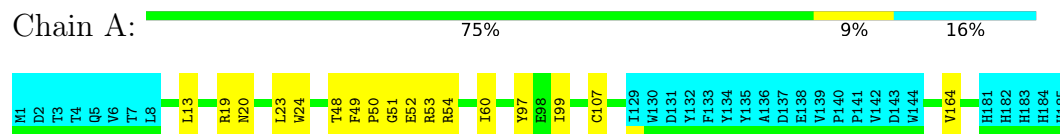
- Molecule 1: 2''-aminoglycoside nucleotidyltransferase





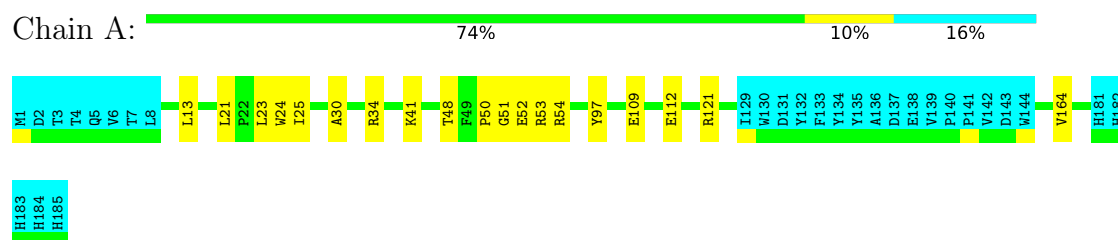
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: 2'-aminoglycoside nucleotidyltransferase



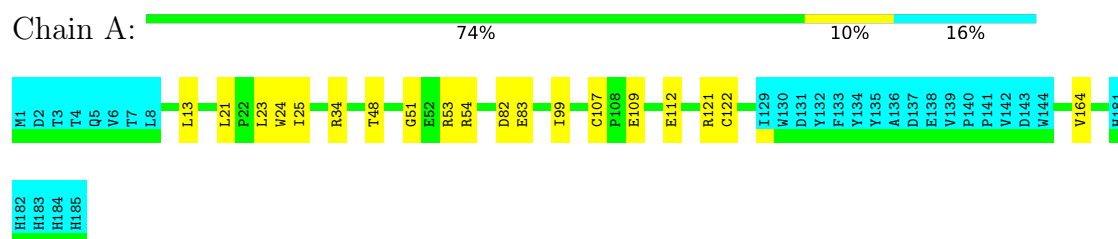
4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: 2'-aminoglycoside nucleotidyltransferase



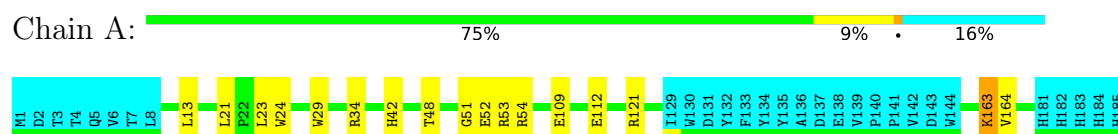
4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: 2'-aminoglycoside nucleotidyltransferase



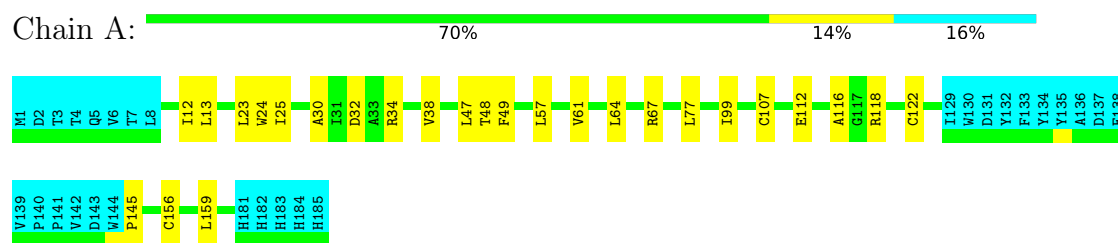
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: 2'-aminoglycoside nucleotidyltransferase



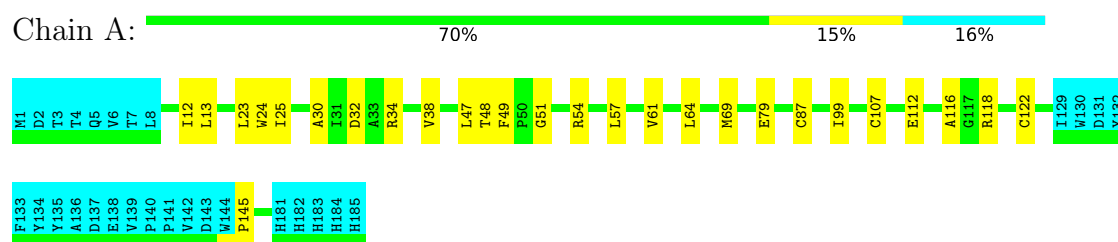
4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: 2''-aminoglycoside nucleotidyltransferase



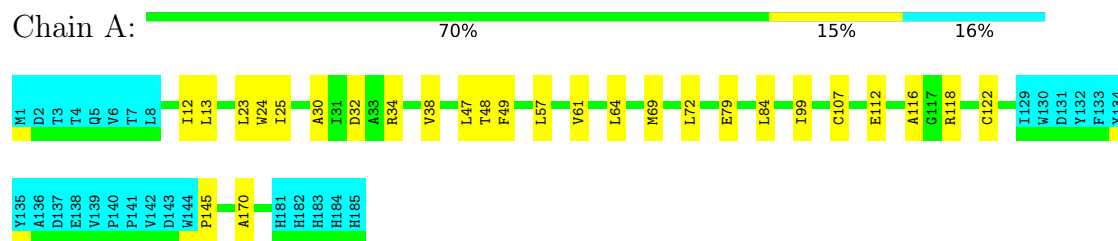
4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: 2''-aminoglycoside nucleotidyltransferase



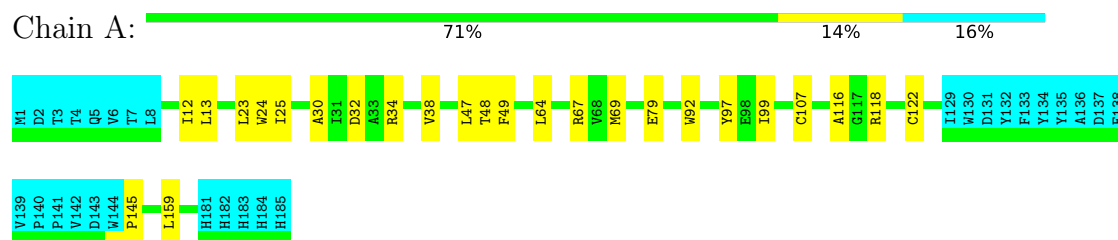
4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: 2''-aminoglycoside nucleotidyltransferase



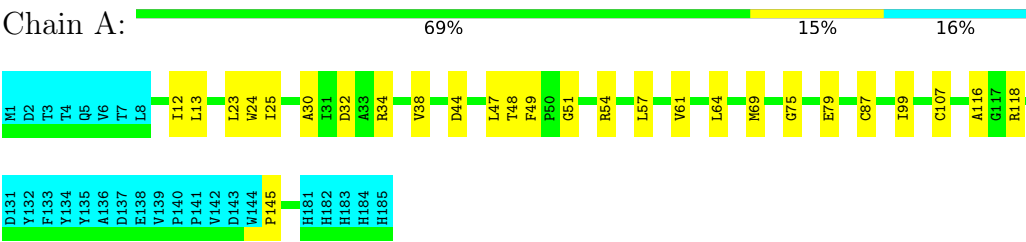
4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: 2''-aminoglycoside nucleotidyltransferase



4.2.15 Score per residue for model 15

● Molecule 1: 2''-aminoglycoside nucleotidyltransferase



5 Refinement protocol and experimental data overview

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

Of the 15 calculated structures, 15 were deposited, based on the following criterion: *back calculated data agree with experimental NOESY spectrum*.

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

Software name	Classification	Version
X-PLOR NIH	refinement	

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

Chemical shift file(s)	working_cs.cif
Number of chemical shift lists	1
Total number of shifts	2015
Number of shifts mapped to atoms	2015
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Assignment completeness (well-defined parts)	81%

6 Model quality [i](#)

6.1 Standard geometry [i](#)

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

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

6.2 Too-close contacts [i](#)

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	1217	1170	1179	13±2
All	All	18255	17550	17685	198

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 6.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:99:ILE:HG13	1:A:107:CYS:SG	0.92	2.04	14	9
1:A:23:LEU:H	1:A:121:ARG:HH21	0.79	1.20	2	2
1:A:99:ILE:CG1	1:A:107:CYS:SG	0.71	2.78	15	5
1:A:21:LEU:HD13	1:A:53:ARG:HD3	0.71	1.62	5	1
1:A:13:LEU:HD23	1:A:23:LEU:HD13	0.70	1.64	7	5
1:A:32:ASP:HB3	1:A:38:VAL:HA	0.69	1.64	13	5
1:A:67:ARG:HG2	1:A:159:LEU:HD23	0.68	1.64	11	2
1:A:24:TRP:HB2	1:A:48:THR:HB	0.67	1.66	12	11
1:A:21:LEU:HD13	1:A:53:ARG:HG3	0.66	1.66	4	8
1:A:53:ARG:HE	1:A:56:GLU:HG3	0.66	1.49	1	1
1:A:12:ILE:HD13	1:A:64:LEU:HD23	0.66	1.67	12	5
1:A:23:LEU:HD13	1:A:49:PHE:CZ	0.63	2.28	12	10
1:A:40:ARG:HE	1:A:147:LYS:HG2	0.62	1.55	2	3
1:A:13:LEU:HD23	1:A:23:LEU:HD23	0.62	1.71	5	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:34:ARG:HD2	1:A:122:CYS:SG	0.60	2.35	12	3
1:A:23:LEU:HD11	1:A:47:LEU:HD22	0.59	1.73	12	5
1:A:57:LEU:HD21	1:A:87:CYS:SG	0.59	2.38	15	2
1:A:51:GLY:O	1:A:54:ARG:HG3	0.58	1.99	4	11
1:A:19:ARG:O	1:A:20:ASN:HB2	0.57	2.00	7	5
1:A:21:LEU:HD11	1:A:50:PRO:HD2	0.57	1.75	6	6
1:A:25:ILE:HG22	1:A:30:ALA:HB2	0.57	1.76	11	5
1:A:13:LEU:HD12	1:A:116:ALA:HB3	0.56	1.76	15	5
1:A:61:VAL:HA	1:A:64:LEU:HD12	0.54	1.78	15	4
1:A:23:LEU:HB3	1:A:118:ARG:HH12	0.53	1.64	14	2
1:A:112:GLU:OE1	1:A:122:CYS:HB2	0.52	2.04	12	2
1:A:23:LEU:HD11	1:A:47:LEU:HB3	0.50	1.83	1	5
1:A:109:GLU:HA	1:A:121:ARG:NH2	0.50	2.21	6	2
1:A:57:LEU:HD13	1:A:76:PHE:HE2	0.50	1.66	1	1
1:A:69:MET:SD	1:A:79:GLU:HB2	0.50	2.47	15	4
1:A:50:PRO:HA	1:A:90:ALA:O	0.50	2.07	2	2
1:A:25:ILE:HD13	1:A:115:ILE:HD12	0.49	1.83	5	2
1:A:19:ARG:O	1:A:20:ASN:CB	0.48	2.61	7	2
1:A:64:LEU:HD13	1:A:80:ILE:HD13	0.48	1.85	1	3
1:A:34:ARG:HD3	1:A:122:CYS:SG	0.48	2.48	14	2
1:A:113:GLY:HA3	1:A:122:CYS:SG	0.48	2.49	5	1
1:A:82:ASP:OD1	1:A:83:GLU:HG3	0.47	2.08	9	1
1:A:23:LEU:HD13	1:A:49:PHE:CE2	0.46	2.45	2	1
1:A:40:ARG:HD3	1:A:147:LYS:HG2	0.46	1.88	4	1
1:A:32:ASP:OD1	1:A:39:THR:N	0.45	2.49	5	3
1:A:52:GLU:HG3	1:A:53:ARG:HG2	0.45	1.88	7	4
1:A:13:LEU:HB3	1:A:118:ARG:HD2	0.45	1.88	12	4
1:A:50:PRO:HB3	1:A:97:TYR:CE2	0.45	2.47	6	3
1:A:23:LEU:HD23	1:A:23:LEU:C	0.45	2.38	9	5
1:A:156:CYS:HA	1:A:159:LEU:HD12	0.44	1.90	11	1
1:A:40:ARG:HD2	1:A:147:LYS:HG2	0.43	1.88	6	1
1:A:47:LEU:HB3	1:A:49:PHE:CE1	0.43	2.48	12	3
1:A:25:ILE:O	1:A:30:ALA:HB2	0.42	2.14	6	2
1:A:53:ARG:CZ	1:A:56:GLU:HG3	0.42	2.45	5	1
1:A:49:PHE:CG	1:A:57:LEU:HD21	0.42	2.50	5	1
1:A:34:ARG:HD3	1:A:112:GLU:HG2	0.42	1.90	8	3
1:A:109:GLU:O	1:A:121:ARG:HD3	0.42	2.14	8	2
1:A:112:GLU:HB2	1:A:122:CYS:SG	0.42	2.54	13	1
1:A:54:ARG:HH12	1:A:75:GLY:HA2	0.42	1.74	15	1
1:A:92:TRP:HB2	1:A:97:TYR:CE2	0.42	2.50	6	1
1:A:47:LEU:HD12	1:A:85:LEU:HD11	0.41	1.92	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:34:ARG:NH2	1:A:124:SER:HA	0.41	2.30	2	2
1:A:99:ILE:HD12	1:A:127:ALA:HB1	0.41	1.92	5	1
1:A:49:PHE:CE1	1:A:57:LEU:HD13	0.41	2.51	13	2
1:A:19:ARG:HG3	1:A:60:ILE:HD11	0.40	1.91	7	1
1:A:23:LEU:HG	1:A:49:PHE:CE2	0.40	2.51	7	1
1:A:163:LYS:HA	1:A:163:LYS:HE3	0.40	1.93	10	1
1:A:25:ILE:HB	1:A:122:CYS:SG	0.40	2.57	9	1
1:A:29:TRP:CZ2	1:A:42:HIS:HB2	0.40	2.51	10	1
1:A:92:TRP:CE3	1:A:97:TYR:HB2	0.40	2.50	14	1
1:A:21:LEU:HD12	1:A:22:PRO:HD2	0.40	1.92	3	1

6.3 Torsion angles [i](#)

6.3.1 Protein backbone [i](#)

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	156/185 (84%)	154±1 (99±1%)	2±1 (1±1%)	0±0 (0±0%)	100	100
All	All	2340/2775 (84%)	2310 (99%)	30 (1%)	0 (0%)	100	100

There are no Ramachandran outliers.

6.3.2 Protein sidechains [i](#)

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles	
1	A	120/148 (81%)	120±0 (100±0%)	0±0 (0±0%)	87	98
All	All	1800/2220 (81%)	1798 (100%)	2 (0%)	87	98

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	163	LYS	1
1	A	44	ASP	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 [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

The completeness of assignment taking into account all chemical shift lists is 81% for the well-defined parts and 79% for the entire structure.

7.1 Chemical shift list 1

File name: working_cs.cif

Chemical shift list name: *ANT2_June2016_BMRB31_final.str*

7.1.1 Bookkeeping

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

Total number of shifts	2015
Number of shifts mapped to atoms	2015
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Number of shift outliers (ShiftChecker)	54

7.1.2 Chemical shift referencing

The following table shows the suggested chemical shift referencing corrections.

Nucleus	# values	Correction $\pm$ precision, ppm	Suggested action
$^{13}\text{C}_\alpha$	176	-0.32 ± 0.17	None needed (< 0.5 ppm)
$^{13}\text{C}_\beta$	162	-0.21 ± 0.09	None needed (< 0.5 ppm)
$^{13}\text{C}'$	164	-0.15 ± 0.17	None needed (< 0.5 ppm)
^{15}N	165	0.02 ± 0.30	None needed (< 0.5 ppm)

7.1.3 Completeness of resonance assignments

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the well-defined regions of the structure. The overall completeness is 81%, i.e. 1687 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 2095. 0 out of 22 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	^1H	^{13}C	^{15}N
Backbone	731/780 (94%)	300/319 (94%)	290/312 (93%)	141/149 (95%)
Sidechain	912/1164 (78%)	626/758 (83%)	285/360 (79%)	1/46 (2%)

Continued on next page...

Continued from previous page...

	Total	¹H	¹³C	¹⁵N
Aromatic	44/151 (29%)	0/77 (0%)	44/68 (65%)	0/6 (0%)
Overall	1687/2095 (81%)	926/1154 (80%)	619/740 (84%)	142/201 (71%)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 79%, i.e. 1980 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 2500. 0 out of 26 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	¹H	¹³C	¹⁵N
Backbone	854/921 (93%)	349/375 (93%)	340/370 (92%)	165/176 (94%)
Sidechain	1053/1336 (79%)	720/871 (83%)	331/418 (79%)	2/47 (4%)
Aromatic	73/243 (30%)	0/126 (0%)	73/108 (68%)	0/9 (0%)
Overall	1980/2500 (79%)	1069/1372 (78%)	744/896 (83%)	167/232 (72%)

7.1.4 Statistically unusual chemical shifts ⓘ

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	11	LYS	HB3	5.68	0.46 – 3.04	15.2
1	A	119	PRO	CD	36.27	45.11 – 55.58	-13.4
1	A	82	ASP	H	14.79	5.52 – 11.08	11.7
1	A	38	VAL	H	0.71	4.98 – 11.56	-11.5
1	A	159	LEU	H	1.71	5.09 – 11.34	-10.4
1	A	34	ARG	CD	34.02	38.57 – 47.75	-9.9
1	A	40	ARG	H	2.34	5.25 – 11.22	-9.9
1	A	146	THR	H	2.71	5.19 – 11.27	-9.1
1	A	167	LEU	CG	36.28	21.37 – 32.19	8.8
1	A	123	ASN	H	3.12	5.28 – 11.36	-8.6
1	A	84	LEU	CD1	12.15	16.71 – 32.55	-7.9
1	A	84	LEU	CD2	11.77	15.73 – 32.47	-7.4
1	A	141	PRO	CG	19.24	21.69 – 32.72	-7.2
1	A	178	LEU	HD11	2.65	-0.61 – 2.12	6.9
1	A	178	LEU	HD12	2.65	-0.61 – 2.12	6.9
1	A	178	LEU	HD13	2.65	-0.61 – 2.12	6.9
1	A	41	LYS	CG	17.22	19.35 – 30.45	-6.9
1	A	150	GLU	CG	28.01	30.20 – 42.01	-6.9
1	A	12	ILE	CD1	24.60	5.18 – 21.60	6.8
1	A	178	LEU	HD21	2.60	-0.65 – 2.13	6.7
1	A	178	LEU	HD22	2.60	-0.65 – 2.13	6.7
1	A	178	LEU	HD23	2.60	-0.65 – 2.13	6.7

Continued on next page...

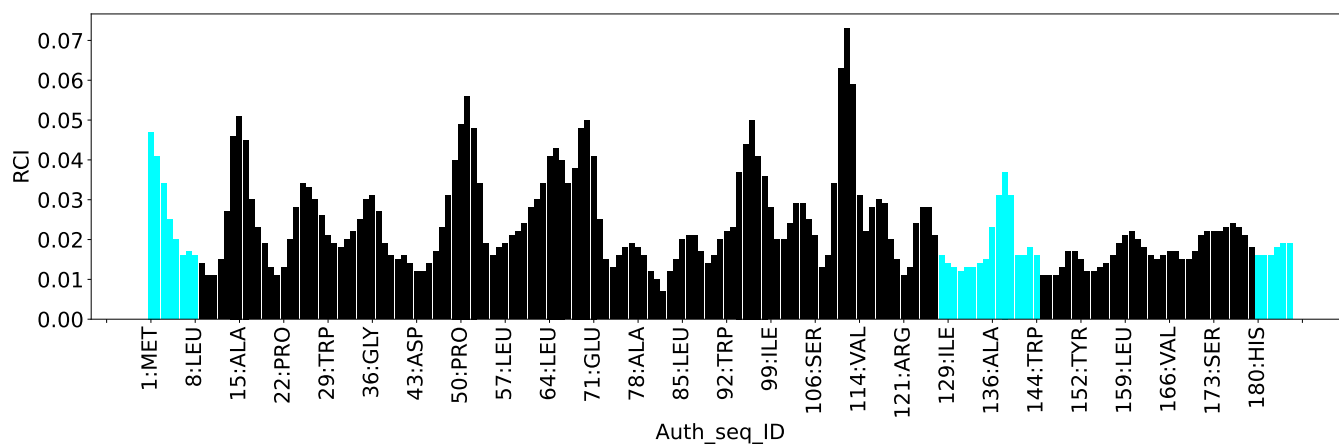
Continued from previous page...

List Id	Chain	Res	Type	Atom	Shift, ppm	Expected range, ppm	Z-score
1	A	41	LYS	CE	36.23	37.57 – 46.21	-6.5
1	A	19	ARG	CD	49.09	38.57 – 47.75	6.5
1	A	172	ARG	HD2	1.64	1.97 – 4.26	-6.5
1	A	100	ALA	CB	7.72	10.19 – 27.75	-6.4
1	A	128	ILE	HG21	2.48	-0.56 – 2.11	6.4
1	A	128	ILE	HG22	2.48	-0.56 – 2.11	6.4
1	A	128	ILE	HG23	2.48	-0.56 – 2.11	6.4
1	A	172	ARG	HD3	1.50	1.81 – 4.39	-6.2
1	A	178	LEU	CD1	14.95	16.71 – 32.55	-6.1
1	A	23	LEU	CG	20.36	21.37 – 32.19	-5.9
1	A	178	LEU	CD2	14.63	15.73 – 32.47	-5.7
1	A	12	ILE	CG2	24.96	10.93 – 24.12	5.6
1	A	129	ILE	HG21	2.25	-0.56 – 2.11	5.5
1	A	129	ILE	HG22	2.25	-0.56 – 2.11	5.5
1	A	129	ILE	HG23	2.25	-0.56 – 2.11	5.5
1	A	41	LYS	CD	23.00	23.50 – 34.42	-5.5
1	A	22	PRO	CA	55.22	55.85 – 70.84	-5.4
1	A	129	ILE	HD11	2.20	-0.72 – 2.09	5.4
1	A	129	ILE	HD12	2.20	-0.72 – 2.09	5.4
1	A	129	ILE	HD13	2.20	-0.72 – 2.09	5.4
1	A	80	ILE	CD1	22.11	5.18 – 21.60	5.3
1	A	80	ILE	CG2	24.52	10.93 – 24.12	5.3
1	A	29	TRP	CB	40.32	20.06 – 39.75	5.3
1	A	33	ALA	HB1	2.64	0.14 – 2.58	5.3
1	A	33	ALA	HB2	2.64	0.14 – 2.58	5.3
1	A	33	ALA	HB3	2.64	0.14 – 2.58	5.3
1	A	76	PHE	CZ	121.47	121.82 – 136.66	-5.2
1	A	40	ARG	HG2	0.21	0.26 – 2.87	-5.2
1	A	133	PHE	CZ	121.58	121.82 – 136.66	-5.2
1	A	61	VAL	CG1	28.46	14.71 – 28.29	5.1
1	A	115	ILE	CD1	21.73	5.18 – 21.60	5.1
1	A	35	LEU	CG	32.21	21.37 – 32.19	5.0

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

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

Random coil index (RCI) for chain A:



8 NMR restraints analysis [i](#)

8.1 Conformationally restricting restraints [i](#)

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

Description	Value
Total distance restraints	760
Intra-residue ($ i-j =0$)	44
Sequential ($ i-j =1$)	411
Medium range ($ i-j >1$ and $ i-j <5$)	84
Long range ($ i-j \geq 5$)	58
Inter-chain	0
Hydrogen bond restraints	163
Disulfide bond restraints	0
Total dihedral-angle restraints	214
Number of unmapped restraints	0
Number of restraints per residue	5.3
Number of long range restraints per residue ¹	0.6

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

8.2 Residual restraint violations [i](#)

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

8.2.1 Average number of distance violations per model [i](#)

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

Bins (Å)	Average number of violations per model	Max (Å)
0.1-0.2 (Small)	33.8	0.2
0.2-0.5 (Medium)	34.5	0.5
>0.5 (Large)	196.9	41.44

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

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

Bins (°)	Average number of violations per model	Max (°)
1.0-10.0 (Small)	48.3	9.99
10.0-20.0 (Medium)	31.3	20.0
>20.0 (Large)	41.4	165.19

9 Distance violation analysis ⓘ

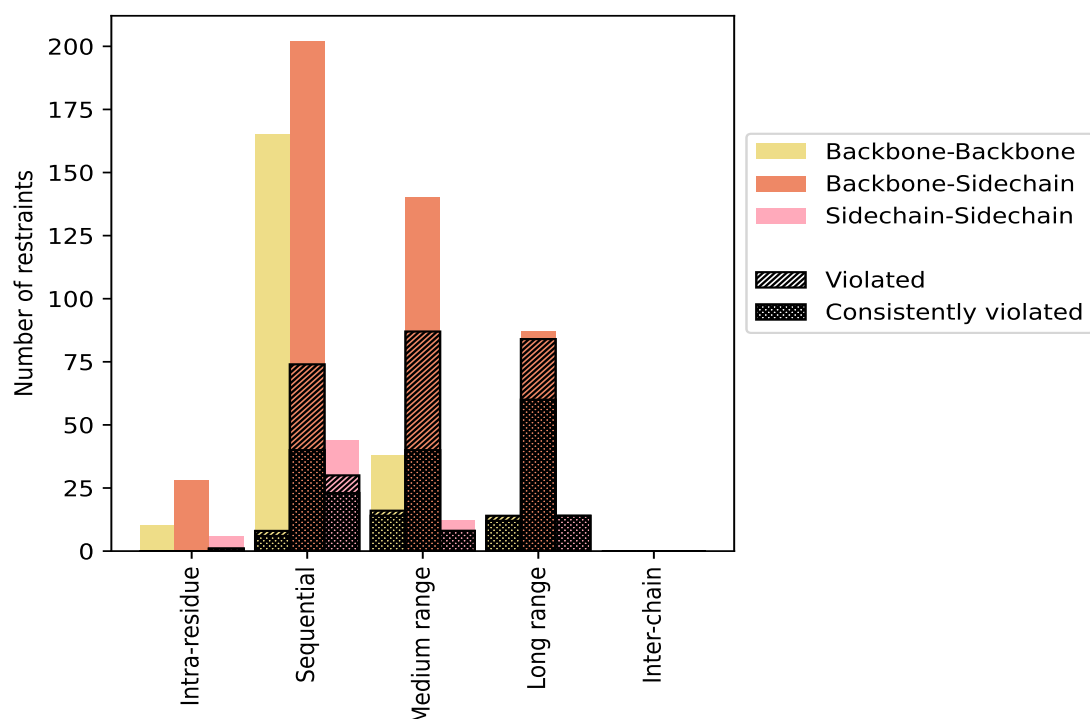
9.1 Summary of distance violations ⓘ

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)	44	5.8	1	2.3	0.1	1	2.3	0.1
Backbone-Backbone	10	1.3	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	28	3.7	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	6	0.8	1	16.7	0.1	1	16.7	0.1
Sequential (i-j =1)	411	54.1	112	27.3	14.7	69	16.8	9.1
Backbone-Backbone	165	21.7	8	4.8	1.1	6	3.6	0.8
Backbone-Sidechain	202	26.6	74	36.6	9.7	40	19.8	5.3
Sidechain-Sidechain	44	5.8	30	68.2	3.9	23	52.3	3.0
Medium range (i-j >1 & i-j <5)	84	11.1	46	54.8	6.1	40	47.6	5.3
Backbone-Backbone	38	5.0	16	42.1	2.1	14	36.8	1.8
Backbone-Sidechain	34	4.5	22	64.7	2.9	18	52.9	2.4
Sidechain-Sidechain	12	1.6	8	66.7	1.1	8	66.7	1.1
Long range (i-j ≥5)	58	7.6	58	100.0	7.6	55	94.8	7.2
Backbone-Backbone	14	1.8	14	100.0	1.8	12	85.7	1.6
Backbone-Sidechain	30	3.9	30	100.0	3.9	29	96.7	3.8
Sidechain-Sidechain	14	1.8	14	100.0	1.8	14	100.0	1.8
Inter-chain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Backbone	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Hydrogen bond	163	21.4	119	73.0	15.7	53	32.5	7.0
Disulfide bond	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Total	760	100.0	336	44.2	44.2	218	28.7	28.7
Backbone-Backbone	227	29.9	38	16.7	5.0	32	14.1	4.2
Backbone-Sidechain	457	60.1	245	53.6	32.2	140	30.6	18.4
Sidechain-Sidechain	76	10.0	53	69.7	7.0	46	60.5	6.1

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

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



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

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

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

Model ID	Number of violations						Mean (Å)	Max (Å)	SD ⁶ (Å)	Median (Å)
	IR ¹	SQ ²	MR ³	LR ⁴	IC ⁵	Total				
1	1	79	76	99	0	255	7.6	40.14	9.73	2.09
2	1	79	78	99	0	257	7.6	40.76	9.75	1.86
3	1	85	77	102	0	265	7.37	40.4	9.64	1.59
4	1	85	80	99	0	265	7.42	40.5	9.76	1.51
5	1	81	80	101	0	263	7.34	39.93	9.62	1.69
6	1	85	80	95	0	261	7.54	40.58	9.86	1.59
7	1	91	82	98	0	272	7.26	40.54	9.78	1.49
8	1	87	84	97	0	269	7.37	41.26	9.87	1.5
9	1	87	83	98	0	269	7.34	40.77	9.82	1.49
10	1	87	81	97	0	266	7.45	41.44	9.87	1.61

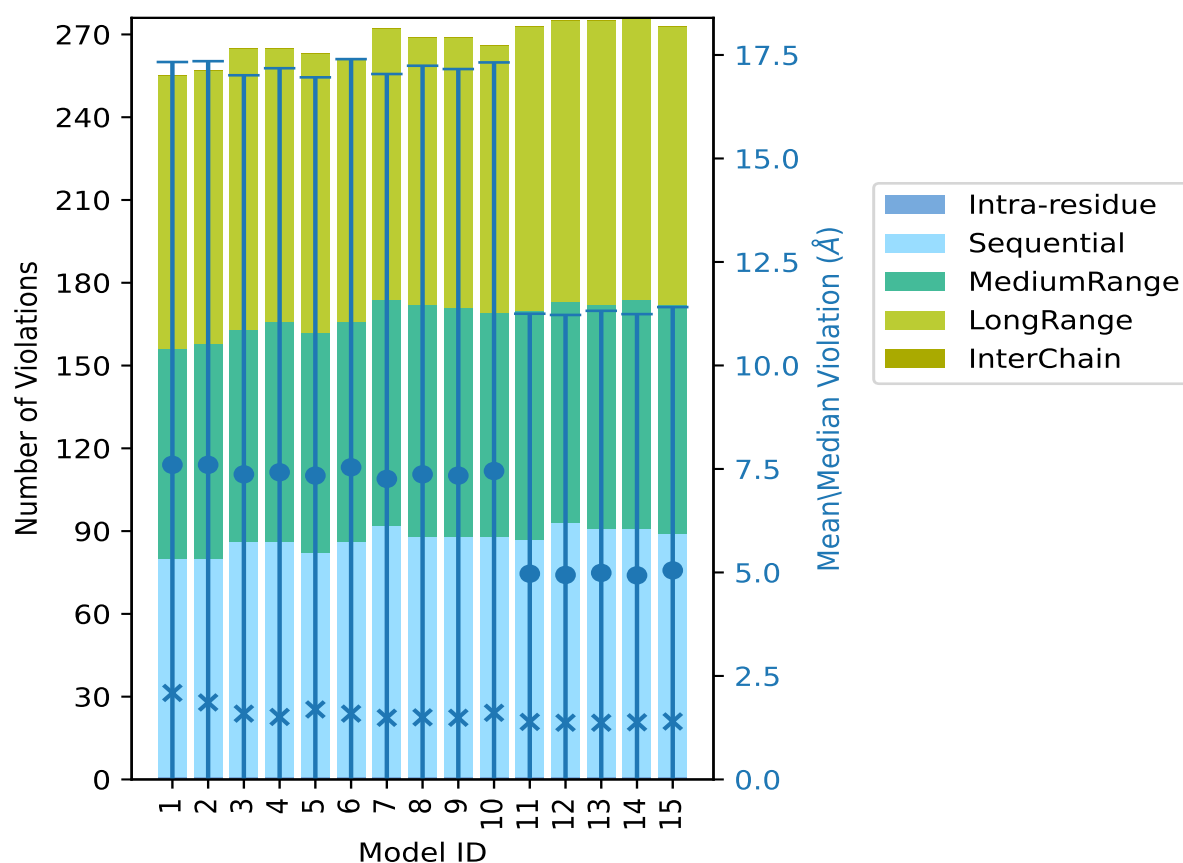
Continued on next page...

Continued from previous page...

Model ID	Number of violations						Mean (Å)	Max (Å)	SD ⁶ (Å)	Median (Å)
	IR ¹	SQ ²	MR ³	LR ⁴	IC ⁵	Total				
11	1	86	83	103	0	273	4.97	22.26	6.28	1.39
12	1	92	80	102	0	275	4.94	22.42	6.28	1.37
13	1	90	81	103	0	275	4.99	22.54	6.33	1.37
14	1	90	83	102	0	276	4.93	22.3	6.31	1.38
15	1	88	83	101	0	273	5.05	22.52	6.36	1.4

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

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



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

9.3 Distance violation statistics for the ensemble

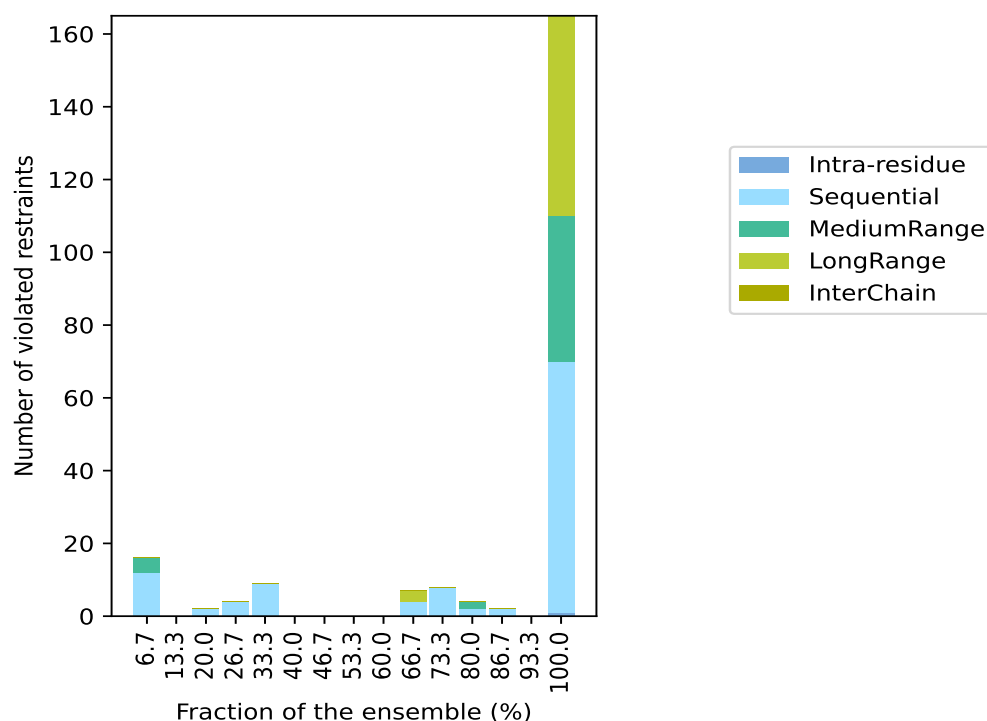
Violation analysis may find that some restraints are violated in few models and some are violated in most of models. The following table provides this information as number of violated restraints for a given fraction of the ensemble. In total, 380(IR:43, SQ:299, MR:38, LR:0, IC:0) restraints are not violated in the ensemble.

Number of violated restraints						Fraction of the ensemble	
IR ¹	SQ ²	MR ³	LR ⁴	IC ⁵	Total	Count ⁶	%
0	12	4	0	0	16	1	6.7
0	0	0	0	0	0	2	13.3
0	2	0	0	0	2	3	20.0
0	4	0	0	0	4	4	26.7
0	9	0	0	0	9	5	33.3
0	0	0	0	0	0	6	40.0
0	0	0	0	0	0	7	46.7
0	0	0	0	0	0	8	53.3
0	0	0	0	0	0	9	60.0
0	4	0	3	0	7	10	66.7
0	8	0	0	0	8	11	73.3
0	2	2	0	0	4	12	80.0
0	2	0	0	0	2	13	86.7
0	0	0	0	0	0	14	93.3
1	69	40	55	0	165	15	100.0

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

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

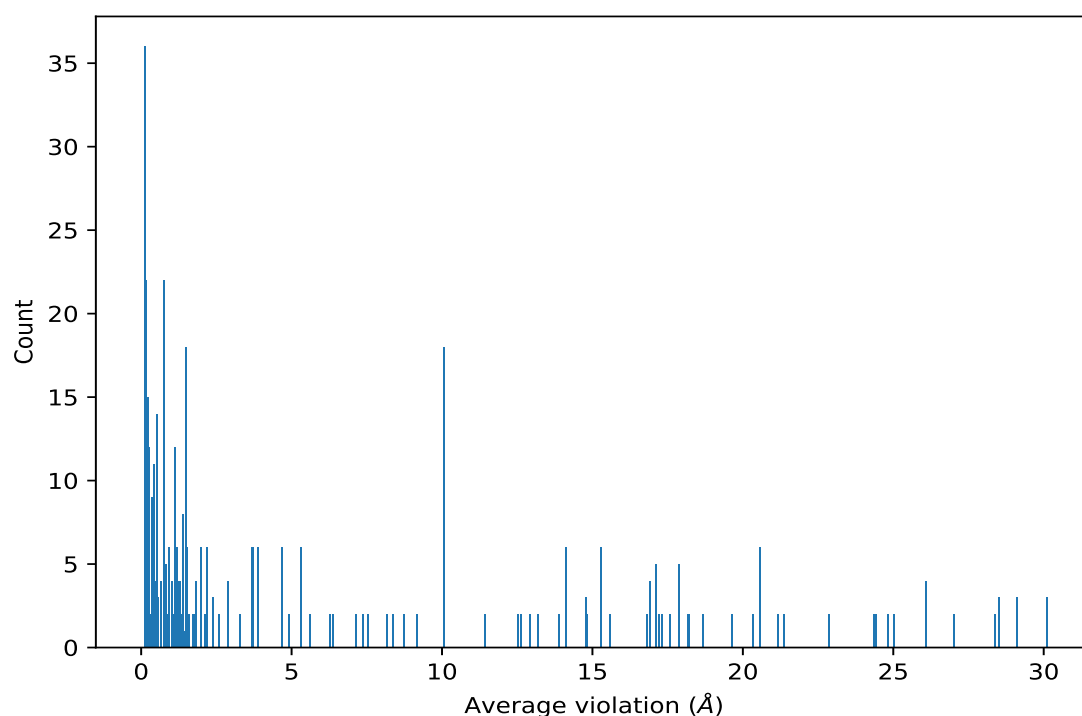
9.3.1 Bar graph : Distance violation statistics for the ensemble [i](#)



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)
(4,9)	1:62:A:GLU:H	1:141:A:PRO:O	15	28.38	6.35	32.53
(5,9)	1:62:A:GLU:H	1:141:A:PRO:O	15	28.38	6.35	32.53
(4,10)	1:62:A:GLU:N	1:141:A:PRO:O	15	27.0	6.54	31.29
(5,10)	1:62:A:GLU:N	1:141:A:PRO:O	15	27.0	6.54	31.29
(6,14)	1:1:A:MET:HE2	1:180:A:HIS:H	15	26.05	13.12	33.83
(6,14)	1:1:A:MET:HE1	1:180:A:HIS:H	15	26.05	13.12	33.83
(6,14)	1:1:A:MET:HG2	1:180:A:HIS:H	15	26.05	13.12	33.83
(6,14)	1:1:A:MET:HB2	1:180:A:HIS:H	15	26.05	13.12	33.83
(2,64)	1:33:A:ALA:H	1:183:A:HIS:H	15	25.02	10.15	32.18
(6,71)	1:33:A:ALA:H	1:183:A:HIS:H	15	25.02	10.15	32.18
(2,84)	1:41:A:LYS:HE2	1:51:A:GLY:HA3	15	24.84	1.82	26.04
(6,93)	1:41:A:LYS:HE2	1:51:A:GLY:HA3	15	24.84	1.82	26.04
(2,83)	1:41:A:LYS:HE2	1:51:A:GLY:H	15	24.41	1.69	25.46
(6,92)	1:41:A:LYS:HE2	1:51:A:GLY:H	15	24.41	1.69	25.46
(2,40)	1:19:A:ARG:HD2	1:37:A:ARG:HG2	15	24.39	1.86	25.36
(6,42)	1:19:A:ARG:HD2	1:37:A:ARG:HG2	15	24.39	1.86	25.36

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(4,15)	1:82:A:ASP:H	1:138:A:GLU:O	15	22.85	5.23	26.17
(5,15)	1:82:A:ASP:H	1:138:A:GLU:O	15	22.85	5.23	26.17
(2,158)	1:77:A:LEU:HG	1:117:A:GLY:H	15	21.39	0.65	21.7
(6,179)	1:77:A:LEU:HG	1:117:A:GLY:H	15	21.39	0.65	21.7
(4,16)	1:82:A:ASP:N	1:138:A:GLU:O	15	21.19	5.39	24.62
(5,16)	1:82:A:ASP:N	1:138:A:GLU:O	15	21.19	5.39	24.62
(2,63)	1:33:A:ALA:HB1	1:183:A:HIS:H	15	20.56	8.27	26.39
(2,63)	1:33:A:ALA:HB2	1:183:A:HIS:H	15	20.56	8.27	26.39
(2,63)	1:33:A:ALA:HB3	1:183:A:HIS:H	15	20.56	8.27	26.39
(6,70)	1:33:A:ALA:HB1	1:183:A:HIS:H	15	20.56	8.27	26.39
(6,70)	1:33:A:ALA:HB2	1:183:A:HIS:H	15	20.56	8.27	26.39
(6,70)	1:33:A:ALA:HB3	1:183:A:HIS:H	15	20.56	8.27	26.39
(3,6)	1:41:A:LYS:HE2	1:163:A:LYS:HG2	15	20.3	7.38	24.98
(6,94)	1:41:A:LYS:HE2	1:163:A:LYS:HG2	15	20.3	7.38	24.98
(2,145)	1:70:A:GLU:H	1:121:A:ARG:HD3	15	19.61	0.68	19.42
(6,166)	1:70:A:GLU:H	1:121:A:ARG:HD3	15	19.61	0.68	19.42
(4,23)	1:142:A:VAL:H	1:160:A:GLY:O	15	18.67	0.39	18.61
(5,23)	1:142:A:VAL:H	1:160:A:GLY:O	15	18.67	0.39	18.61
(2,16)	1:2:A:ASP:HB2	1:158:A:SER:HB2	15	18.23	2.21	16.91
(6,16)	1:2:A:ASP:HB2	1:158:A:SER:HB2	15	18.23	2.21	16.91
(2,91)	1:42:A:HIS:H	1:168:A:ARG:HD2	15	18.17	4.43	21.08
(6,101)	1:42:A:HIS:H	1:168:A:ARG:HD2	15	18.17	4.43	21.08
(6,9)	1:1:A:MET:HE2	1:159:A:LEU:HD22	15	17.88	5.05	20.45
(6,9)	1:1:A:MET:HE1	1:159:A:LEU:HD22	15	17.88	5.05	20.45
(6,9)	1:1:A:MET:HG2	1:159:A:LEU:HD22	15	17.88	5.05	20.45
(6,9)	1:1:A:MET:HE1	1:159:A:LEU:HD23	15	17.88	5.05	20.45
(6,9)	1:1:A:MET:HA	1:159:A:LEU:HD22	15	17.88	5.05	20.45
(2,92)	1:42:A:HIS:H	1:168:A:ARG:HB3	15	17.55	5.76	21.44
(6,102)	1:42:A:HIS:H	1:168:A:ARG:HB3	15	17.55	5.76	21.44
(4,24)	1:142:A:VAL:N	1:160:A:GLY:O	15	17.3	0.17	17.38
(5,24)	1:142:A:VAL:N	1:160:A:GLY:O	15	17.3	0.17	17.38
(2,79)	1:40:A:ARG:H	1:168:A:ARG:HD2	15	17.22	1.22	17.94
(6,88)	1:40:A:ARG:H	1:168:A:ARG:HD2	15	17.22	1.22	17.94
(6,10)	1:1:A:MET:HE2	1:164:A:VAL:HG22	15	17.11	6.64	20.56
(6,10)	1:1:A:MET:HE2	1:164:A:VAL:HG21	15	17.11	6.64	20.56
(6,10)	1:1:A:MET:HE1	1:164:A:VAL:HG22	15	17.11	6.64	20.56
(6,10)	1:1:A:MET:HG2	1:164:A:VAL:HG22	15	17.11	6.64	20.56
(6,10)	1:1:A:MET:HE1	1:164:A:VAL:HG23	15	17.11	6.64	20.56
(6,8)	1:1:A:MET:HE2	1:158:A:SER:H	15	16.9	2.14	17.32
(6,8)	1:1:A:MET:HB3	1:158:A:SER:H	15	16.9	2.14	17.32
(6,8)	1:1:A:MET:HG2	1:158:A:SER:H	15	16.9	2.14	17.32
(6,8)	1:1:A:MET:HE1	1:158:A:SER:H	15	16.9	2.14	17.32

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(2,85)	1:41:A:LYS:H	1:168:A:ARG:HG3	15	16.81	4.66	19.9
(6,95)	1:41:A:LYS:H	1:168:A:ARG:HG3	15	16.81	4.66	19.9
(4,19)	1:90:A:ALA:H	1:67:A:ARG:O	15	15.55	0.12	15.57
(5,19)	1:90:A:ALA:H	1:67:A:ARG:O	15	15.55	0.12	15.57
(2,159)	1:77:A:LEU:HD21	1:118:A:ARG:H	15	15.25	0.79	14.78
(2,159)	1:77:A:LEU:HD22	1:118:A:ARG:H	15	15.25	0.79	14.78
(2,159)	1:77:A:LEU:HD23	1:118:A:ARG:H	15	15.25	0.79	14.78
(6,180)	1:77:A:LEU:HD21	1:118:A:ARG:H	15	15.25	0.79	14.78
(6,180)	1:77:A:LEU:HD22	1:118:A:ARG:H	15	15.25	0.79	14.78
(6,180)	1:77:A:LEU:HD23	1:118:A:ARG:H	15	15.25	0.79	14.78
(4,20)	1:90:A:ALA:N	1:67:A:ARG:O	15	14.82	0.1	14.82
(5,20)	1:90:A:ALA:N	1:67:A:ARG:O	15	14.82	0.1	14.82
(6,7)	1:1:A:MET:HE2	1:153:A:ARG:H	15	14.76	1.23	15.46
(6,7)	1:1:A:MET:HE1	1:153:A:ARG:H	15	14.76	1.23	15.46
(6,7)	1:1:A:MET:HG2	1:153:A:ARG:H	15	14.76	1.23	15.46
(2,160)	1:77:A:LEU:HD21	1:121:A:ARG:HG2	15	14.12	1.22	13.36
(2,160)	1:77:A:LEU:HD22	1:121:A:ARG:HG2	15	14.12	1.22	13.36
(2,160)	1:77:A:LEU:HD23	1:121:A:ARG:HG2	15	14.12	1.22	13.36
(6,181)	1:77:A:LEU:HD21	1:121:A:ARG:HG2	15	14.12	1.22	13.36
(6,181)	1:77:A:LEU:HD22	1:121:A:ARG:HG2	15	14.12	1.22	13.36
(6,181)	1:77:A:LEU:HD23	1:121:A:ARG:HG2	15	14.12	1.22	13.36
(4,13)	1:76:A:PHE:H	1:65:A:GLY:O	15	13.86	0.51	14.11
(5,13)	1:76:A:PHE:H	1:65:A:GLY:O	15	13.86	0.51	14.11
(4,1)	1:13:A:LEU:H	1:32:A:ASP:O	15	13.19	0.12	13.22
(5,1)	1:13:A:LEU:H	1:32:A:ASP:O	15	13.19	0.12	13.22
(4,14)	1:76:A:PHE:N	1:65:A:GLY:O	15	12.93	0.48	13.17
(5,14)	1:76:A:PHE:N	1:65:A:GLY:O	15	12.93	0.48	13.17
(4,2)	1:13:A:LEU:N	1:32:A:ASP:O	15	12.64	0.11	12.66
(5,2)	1:13:A:LEU:N	1:32:A:ASP:O	15	12.64	0.11	12.66
(4,11)	1:75:A:GLY:H	1:58:A:GLU:O	15	12.52	1.02	13.08
(5,11)	1:75:A:GLY:H	1:58:A:GLU:O	15	12.52	1.02	13.08
(4,12)	1:75:A:GLY:N	1:58:A:GLU:O	15	11.42	0.93	11.95
(5,12)	1:75:A:GLY:N	1:58:A:GLU:O	15	11.42	0.93	11.95
(3,15)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD11	15	10.05	1.35	10.48
(3,15)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD12	15	10.05	1.35	10.48
(3,15)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD13	15	10.05	1.35	10.48
(3,15)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD11	15	10.05	1.35	10.48
(3,15)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD12	15	10.05	1.35	10.48
(3,15)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD13	15	10.05	1.35	10.48
(3,15)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD11	15	10.05	1.35	10.48
(3,15)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD12	15	10.05	1.35	10.48
(3,15)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD13	15	10.05	1.35	10.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(6,162)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD11	15	10.05	1.35	10.48
(6,162)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD12	15	10.05	1.35	10.48
(6,162)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD13	15	10.05	1.35	10.48
(6,162)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD11	15	10.05	1.35	10.48
(6,162)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD12	15	10.05	1.35	10.48
(6,162)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD13	15	10.05	1.35	10.48
(6,162)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD11	15	10.05	1.35	10.48
(6,162)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD12	15	10.05	1.35	10.48
(6,162)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD13	15	10.05	1.35	10.48
(3,14)	1:64:A:LEU:HB2	1:75:A:GLY:HA2	15	9.19	0.99	9.79
(6,152)	1:64:A:LEU:HB2	1:75:A:GLY:HA2	15	9.19	0.99	9.79
(2,136)	1:66:A:GLY:H	1:76:A:PHE:H	15	8.7	0.49	8.98
(6,155)	1:66:A:GLY:H	1:76:A:PHE:H	15	8.7	0.49	8.98
(4,5)	1:24:A:TRP:H	1:20:A:ASN:O	15	8.36	0.16	8.42
(5,5)	1:24:A:TRP:H	1:20:A:ASN:O	15	8.36	0.16	8.42
(4,7)	1:26:A:GLY:H	1:22:A:PRO:O	15	8.18	0.15	8.19
(5,7)	1:26:A:GLY:H	1:22:A:PRO:O	15	8.18	0.15	8.19
(4,3)	1:23:A:LEU:H	1:19:A:ARG:O	15	7.51	0.2	7.56
(5,3)	1:23:A:LEU:H	1:19:A:ARG:O	15	7.51	0.2	7.56
(4,6)	1:24:A:TRP:N	1:20:A:ASN:O	15	7.36	0.12	7.38
(5,6)	1:24:A:TRP:N	1:20:A:ASN:O	15	7.36	0.12	7.38
(4,8)	1:26:A:GLY:N	1:22:A:PRO:O	15	7.13	0.19	7.05
(5,8)	1:26:A:GLY:N	1:22:A:PRO:O	15	7.13	0.19	7.05
(2,94)	1:43:A:ASP:HA	1:47:A:LEU:H	15	6.35	0.19	6.29
(6,104)	1:43:A:ASP:HA	1:47:A:LEU:H	15	6.35	0.19	6.29
(4,4)	1:23:A:LEU:N	1:19:A:ARG:O	15	6.27	0.22	6.31
(5,4)	1:23:A:LEU:N	1:19:A:ARG:O	15	6.27	0.22	6.31
(4,17)	1:85:A:LEU:H	1:81:A:GLY:O	15	5.63	0.12	5.67
(5,17)	1:85:A:LEU:H	1:81:A:GLY:O	15	5.63	0.12	5.67
(2,61)	1:31:A:ILE:HD11	1:38:A:VAL:HB	15	5.31	0.27	5.39
(2,61)	1:31:A:ILE:HD12	1:38:A:VAL:HB	15	5.31	0.27	5.39
(2,61)	1:31:A:ILE:HD13	1:38:A:VAL:HB	15	5.31	0.27	5.39
(6,68)	1:31:A:ILE:HD11	1:38:A:VAL:HB	15	5.31	0.27	5.39
(6,68)	1:31:A:ILE:HD12	1:38:A:VAL:HB	15	5.31	0.27	5.39
(6,68)	1:31:A:ILE:HD13	1:38:A:VAL:HB	15	5.31	0.27	5.39
(4,18)	1:85:A:LEU:N	1:81:A:GLY:O	15	4.94	0.12	4.98
(5,18)	1:85:A:LEU:N	1:81:A:GLY:O	15	4.94	0.12	4.98
(2,164)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD21	15	4.65	0.1	4.67
(2,164)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD22	15	4.65	0.1	4.67
(2,164)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD23	15	4.65	0.1	4.67
(6,185)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD21	15	4.65	0.1	4.67
(6,185)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD22	15	4.65	0.1	4.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(6,185)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD23	15	4.65	0.1	4.67
(2,27)	1:9:A:ILE:HD11	1:11:A:LYS:HG2	15	3.88	0.05	3.85
(2,27)	1:9:A:ILE:HD12	1:11:A:LYS:HG2	15	3.88	0.05	3.85
(2,27)	1:9:A:ILE:HD13	1:11:A:LYS:HG2	15	3.88	0.05	3.85
(6,28)	1:9:A:ILE:HD11	1:11:A:LYS:HG2	15	3.88	0.05	3.85
(6,28)	1:9:A:ILE:HD12	1:11:A:LYS:HG2	15	3.88	0.05	3.85
(6,28)	1:9:A:ILE:HD13	1:11:A:LYS:HG2	15	3.88	0.05	3.85
(2,60)	1:31:A:ILE:HD11	1:37:A:ARG:H	15	3.74	0.06	3.74
(2,60)	1:31:A:ILE:HD12	1:37:A:ARG:H	15	3.74	0.06	3.74
(2,60)	1:31:A:ILE:HD13	1:37:A:ARG:H	15	3.74	0.06	3.74
(6,67)	1:31:A:ILE:HD11	1:37:A:ARG:H	15	3.74	0.06	3.74
(6,67)	1:31:A:ILE:HD12	1:37:A:ARG:H	15	3.74	0.06	3.74
(6,67)	1:31:A:ILE:HD13	1:37:A:ARG:H	15	3.74	0.06	3.74
(2,95)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD11	15	3.66	0.45	3.69
(2,95)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD12	15	3.66	0.45	3.69
(2,95)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD13	15	3.66	0.45	3.69
(6,105)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD11	15	3.66	0.45	3.69
(6,105)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD12	15	3.66	0.45	3.69
(6,105)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD13	15	3.66	0.45	3.69
(2,142)	1:69:A:MET:HG2	1:71:A:GLU:H	15	3.27	0.16	3.2
(6,161)	1:69:A:MET:HG2	1:71:A:GLU:H	15	3.27	0.16	3.2
(2,5)	1:1:A:MET:HB2	1:3:A:THR:HG1	15	2.87	0.52	3.11
(6,5)	1:1:A:MET:HB2	1:3:A:THR:HG1	15	2.87	0.52	3.11
(2,184)	1:99:A:ILE:HG13	1:101:A:GLU:H	15	2.87	0.03	2.87
(6,208)	1:99:A:ILE:HG13	1:101:A:GLU:H	15	2.87	0.03	2.87
(2,65)	1:34:A:ARG:HG3	1:36:A:GLY:HA3	15	2.59	0.61	2.97
(6,72)	1:34:A:ARG:HG3	1:36:A:GLY:HA3	15	2.59	0.61	2.97
(2,173)	1:92:A:TRP:HB2	1:94:A:ASP:H	15	2.35	0.31	2.45
(6,194)	1:92:A:TRP:HB2	1:94:A:ASP:H	15	2.35	0.31	2.45
(2,183)	1:99:A:ILE:HD11	1:101:A:GLU:H	15	2.18	0.08	2.21
(2,183)	1:99:A:ILE:HD12	1:101:A:GLU:H	15	2.18	0.08	2.21
(2,183)	1:99:A:ILE:HD13	1:101:A:GLU:H	15	2.18	0.08	2.21
(6,207)	1:99:A:ILE:HD11	1:101:A:GLU:H	15	2.18	0.08	2.21
(6,207)	1:99:A:ILE:HD12	1:101:A:GLU:H	15	2.18	0.08	2.21
(6,207)	1:99:A:ILE:HD13	1:101:A:GLU:H	15	2.18	0.08	2.21
(2,185)	1:99:A:ILE:H	1:101:A:GLU:HA	15	2.1	0.07	2.12
(6,209)	1:99:A:ILE:H	1:101:A:GLU:HA	15	2.1	0.07	2.12
(2,167)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD21	15	1.96	0.13	2.0
(2,167)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD22	15	1.96	0.13	2.0
(2,167)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD23	15	1.96	0.13	2.0
(6,188)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD21	15	1.96	0.13	2.0
(6,188)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD22	15	1.96	0.13	2.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(6,188)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD23	15	1.96	0.13	2.0
(2,116)	1:57:A:LEU:HG	1:58:A:GLU:HB3	15	1.84	1.1	2.59
(6,133)	1:57:A:LEU:HG	1:58:A:GLU:HB3	15	1.84	1.1	2.59
(2,51)	1:27:A:GLY:H	1:29:A:TRP:HA	15	1.8	0.14	1.75
(6,53)	1:27:A:GLY:H	1:29:A:TRP:HA	15	1.8	0.14	1.75
(2,32)	1:11:A:LYS:HE2	1:12:A:ILE:H	15	1.78	0.17	1.87
(6,33)	1:11:A:LYS:HE2	1:12:A:ILE:H	15	1.78	0.17	1.87
(2,146)	1:71:A:GLU:H	1:72:A:LEU:HB3	15	1.58	0.14	1.56
(6,167)	1:71:A:GLU:H	1:72:A:LEU:HB3	15	1.58	0.14	1.56
(3,8)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD11	15	1.51	1.55	0.47
(3,8)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD12	15	1.51	1.55	0.47
(3,8)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD13	15	1.51	1.55	0.47
(6,118)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD11	15	1.51	1.55	0.47
(6,118)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD12	15	1.51	1.55	0.47
(6,118)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD13	15	1.51	1.55	0.47
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD11	15	1.49	0.11	1.54
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD12	15	1.49	0.11	1.54
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD13	15	1.49	0.11	1.54
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD21	15	1.49	0.11	1.54
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD22	15	1.49	0.11	1.54
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD23	15	1.49	0.11	1.54
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD11	15	1.49	0.11	1.54
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD12	15	1.49	0.11	1.54
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD13	15	1.49	0.11	1.54
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD21	15	1.49	0.11	1.54
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD22	15	1.49	0.11	1.54
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD23	15	1.49	0.11	1.54
(2,227)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG11	15	1.47	0.13	1.42
(2,227)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG12	15	1.47	0.13	1.42
(2,227)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG13	15	1.47	0.13	1.42
(6,256)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG11	15	1.47	0.13	1.42
(6,256)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG12	15	1.47	0.13	1.42
(6,256)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG13	15	1.47	0.13	1.42
(2,87)	1:42:A:HIS:HA	1:43:A:ASP:HB3	15	1.39	0.03	1.38
(6,97)	1:42:A:HIS:HA	1:43:A:ASP:HB3	15	1.39	0.03	1.38
(2,125)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG21	15	1.35	0.08	1.33
(2,125)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG22	15	1.35	0.08	1.33
(2,125)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG23	15	1.35	0.08	1.33
(6,142)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG21	15	1.35	0.08	1.33
(6,142)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG22	15	1.35	0.08	1.33
(6,142)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG23	15	1.35	0.08	1.33
(3,25)	1:157:A:THR:HG1	1:158:A:SER:HB3	15	1.26	0.02	1.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(6,277)	1:157:A:THR:HG1	1:158:A:SER:HB3	15	1.26	0.02	1.26
(2,141)	1:69:A:MET:HG3	1:70:A:GLU:HB2	15	1.23	0.51	1.01
(6,160)	1:69:A:MET:HG3	1:70:A:GLU:HB2	15	1.23	0.51	1.01
(2,127)	1:61:A:VAL:HA	1:62:A:GLU:HB3	15	1.2	0.01	1.19
(6,144)	1:61:A:VAL:HA	1:62:A:GLU:HB3	15	1.2	0.01	1.19
(2,137)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG11	15	1.18	0.01	1.18
(2,137)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG12	15	1.18	0.01	1.18
(2,137)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG13	15	1.18	0.01	1.18
(6,156)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG11	15	1.18	0.01	1.18
(6,156)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG12	15	1.18	0.01	1.18
(6,156)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG13	15	1.18	0.01	1.18
(2,110)	1:54:A:ARG:HD3	1:55:A:GLY:HA2	15	1.14	0.46	1.3
(6,123)	1:54:A:ARG:HD3	1:55:A:GLY:HA2	15	1.14	0.46	1.3
(2,117)	1:57:A:LEU:HD21	1:58:A:GLU:HB2	15	1.12	0.31	1.33
(2,117)	1:57:A:LEU:HD22	1:58:A:GLU:HB2	15	1.12	0.31	1.33
(2,117)	1:57:A:LEU:HD23	1:58:A:GLU:HB2	15	1.12	0.31	1.33
(6,134)	1:57:A:LEU:HD21	1:58:A:GLU:HB2	15	1.12	0.31	1.33
(6,134)	1:57:A:LEU:HD22	1:58:A:GLU:HB2	15	1.12	0.31	1.33
(6,134)	1:57:A:LEU:HD23	1:58:A:GLU:HB2	15	1.12	0.31	1.33
(2,235)	1:149:A:ILE:HG12	1:150:A:GLU:HA	15	1.11	0.02	1.1
(6,266)	1:149:A:ILE:HG12	1:150:A:GLU:HA	15	1.11	0.02	1.1
(2,39)	1:19:A:ARG:H	1:20:A:ASN:HB3	15	1.1	0.02	1.09
(6,41)	1:19:A:ARG:H	1:20:A:ASN:HB3	15	1.1	0.02	1.09
(2,23)	1:7:A:THR:HB	1:11:A:LYS:HG2	15	1.01	0.05	1.02
(6,23)	1:7:A:THR:HB	1:11:A:LYS:HG2	15	1.01	0.05	1.02
(2,229)	1:144:A:TRP:HB3	1:146:A:THR:H	15	1.0	0.46	0.74
(6,258)	1:144:A:TRP:HB3	1:146:A:THR:H	15	1.0	0.46	0.74
(2,196)	1:110:A:ALA:H	1:112:A:GLU:H	15	0.94	0.38	0.87
(6,221)	1:110:A:ALA:H	1:112:A:GLU:H	15	0.94	0.38	0.87
(2,101)	1:47:A:LEU:H	1:48:A:THR:HB	15	0.9	0.07	0.89
(6,111)	1:47:A:LEU:H	1:48:A:THR:HB	15	0.9	0.07	0.89
(2,221)	1:131:A:ASP:HA	1:132:A:TYR:HB3	15	0.9	0.34	1.16
(6,250)	1:131:A:ASP:HA	1:132:A:TYR:HB3	15	0.9	0.34	1.16
(2,144)	1:70:A:GLU:H	1:72:A:LEU:H	15	0.86	0.1	0.87
(6,165)	1:70:A:GLU:H	1:72:A:LEU:H	15	0.86	0.1	0.87
(2,97)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:H	15	0.82	0.13	0.85
(6,107)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:H	15	0.82	0.13	0.85
(2,59)	1:31:A:ILE:H	1:32:A:ASP:HB3	15	0.81	0.02	0.81
(6,65)	1:31:A:ILE:H	1:32:A:ASP:HB3	15	0.81	0.02	0.81
(6,199)	1:94:A:ASP:HB3	1:95:A:GLU:HB3	15	0.81	0.16	0.73
(2,2)	1:1:A:MET:HE1	1:2:A:ASP:H	15	0.78	0.39	0.6
(2,2)	1:1:A:MET:HE2	1:2:A:ASP:H	15	0.78	0.39	0.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(2,2)	1:1:A:MET:HE3	1:2:A:ASP:H	15	0.78	0.39	0.6
(6,2)	1:1:A:MET:HE1	1:2:A:ASP:H	15	0.78	0.39	0.6
(6,2)	1:1:A:MET:HE2	1:2:A:ASP:H	15	0.78	0.39	0.6
(6,2)	1:1:A:MET:HE3	1:2:A:ASP:H	15	0.78	0.39	0.6
(2,45)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HA	15	0.77	0.15	0.79
(3,20)	1:118:A:ARG:HD2	1:119:A:PRO:HG3	15	0.77	0.3	0.72
(6,47)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HA	15	0.77	0.15	0.79
(6,237)	1:118:A:ARG:HD2	1:119:A:PRO:HG3	15	0.77	0.3	0.72
(2,96)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD21	15	0.76	0.08	0.76
(2,96)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD22	15	0.76	0.08	0.76
(2,96)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD23	15	0.76	0.08	0.76
(6,106)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD21	15	0.76	0.08	0.76
(6,106)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD22	15	0.76	0.08	0.76
(6,106)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD23	15	0.76	0.08	0.76
(2,179)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB1	15	0.75	0.4	1.01
(2,179)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB2	15	0.75	0.4	1.01
(2,179)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB3	15	0.75	0.4	1.01
(6,202)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB1	15	0.75	0.4	1.01
(6,202)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB2	15	0.75	0.4	1.01
(6,202)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB3	15	0.75	0.4	1.01
(2,189)	1:104:A:GLN:H	1:105:A:GLY:HA3	15	0.69	0.01	0.69
(6,213)	1:104:A:GLN:H	1:105:A:GLY:HA3	15	0.69	0.01	0.69
(2,44)	1:22:A:PRO:HD3	1:23:A:LEU:H	15	0.68	0.11	0.63
(6,46)	1:22:A:PRO:HD3	1:23:A:LEU:H	15	0.68	0.11	0.63
(2,89)	1:42:A:HIS:H	1:44:A:ASP:H	15	0.57	0.06	0.55
(6,99)	1:42:A:HIS:H	1:44:A:ASP:H	15	0.57	0.06	0.55
(1,52)	1:87:A:CYS:O	1:76:A:PHE:N	15	0.55	0.23	0.49
(2,240)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD21	15	0.53	0.04	0.51
(2,240)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD22	15	0.53	0.04	0.51
(2,240)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD23	15	0.53	0.04	0.51
(6,271)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD21	15	0.53	0.04	0.51
(6,271)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD22	15	0.53	0.04	0.51
(6,271)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD23	15	0.53	0.04	0.51
(2,108)	1:54:A:ARG:HA	1:55:A:GLY:HA3	15	0.52	0.01	0.52
(6,121)	1:54:A:ARG:HA	1:55:A:GLY:HA3	15	0.52	0.01	0.52
(2,62)	1:33:A:ALA:HB1	1:34:A:ARG:HD3	15	0.51	0.2	0.51
(2,62)	1:33:A:ALA:HB2	1:34:A:ARG:HD3	15	0.51	0.2	0.51
(2,62)	1:33:A:ALA:HB3	1:34:A:ARG:HD3	15	0.51	0.2	0.51
(6,69)	1:33:A:ALA:HB1	1:34:A:ARG:HD3	15	0.51	0.2	0.51
(6,69)	1:33:A:ALA:HB2	1:34:A:ARG:HD3	15	0.51	0.2	0.51
(6,69)	1:33:A:ALA:HB3	1:34:A:ARG:HD3	15	0.51	0.2	0.51
(2,251)	1:163:A:LYS:HD3	1:164:A:VAL:H	15	0.48	0.15	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(6,283)	1:163:A:LYS:HD3	1:164:A:VAL:H	15	0.48	0.15	0.47
(2,130)	1:62:A:GLU:HG3	1:63:A:MET:H	15	0.45	0.27	0.27
(6,147)	1:62:A:GLU:HG3	1:63:A:MET:H	15	0.45	0.27	0.27
(2,234)	1:147:A:LYS:HD3	1:148:A:HIS:H	15	0.42	0.15	0.39
(6,264)	1:147:A:LYS:HD3	1:148:A:HIS:H	15	0.42	0.15	0.39
(1,30)	1:50:A:PRO:O	1:53:A:ARG:N	15	0.35	0.13	0.33
(2,104)	1:50:A:PRO:HG3	1:51:A:GLY:H	15	0.35	0.23	0.24
(6,114)	1:50:A:PRO:HG3	1:51:A:GLY:H	15	0.35	0.23	0.24
(1,17)	1:27:A:GLY:O	1:31:A:ILE:N	15	0.29	0.12	0.26
(1,23)	1:32:A:ASP:O	1:37:A:ARG:N	15	0.27	0.05	0.25
(2,206)	1:114:A:VAL:HG11	1:115:A:ILE:HG13	15	0.26	0.04	0.25
(2,206)	1:114:A:VAL:HG12	1:115:A:ILE:HG13	15	0.26	0.04	0.25
(2,206)	1:114:A:VAL:HG13	1:115:A:ILE:HG13	15	0.26	0.04	0.25
(6,231)	1:114:A:VAL:HG11	1:115:A:ILE:HG13	15	0.26	0.04	0.25
(6,231)	1:114:A:VAL:HG12	1:115:A:ILE:HG13	15	0.26	0.04	0.25
(6,231)	1:114:A:VAL:HG13	1:115:A:ILE:HG13	15	0.26	0.04	0.25
(6,59)	1:29:A:TRP:HB3	1:29:A:TRP:HB2	15	0.24	0.0	0.24
(1,58)	1:99:A:ILE:O	1:102:A:ALA:N	15	0.22	0.05	0.21
(1,43)	1:76:A:PHE:O	1:87:A:CYS:N	15	0.21	0.04	0.19
(1,3)	1:5:A:GLN:O	1:9:A:ILE:N	15	0.2	0.03	0.21
(1,71)	1:145:A:PRO:O	1:148:A:HIS:N	15	0.17	0.03	0.16
(2,121)	1:58:A:GLU:HB2	1:60:A:ILE:H	15	0.16	0.02	0.16
(6,138)	1:58:A:GLU:HB2	1:60:A:ILE:H	15	0.16	0.02	0.16
(2,24)	1:8:A:LEU:H	1:9:A:ILE:HA	15	0.15	0.0	0.15
(6,24)	1:8:A:LEU:H	1:9:A:ILE:HA	15	0.15	0.0	0.15
(1,85)	1:162:A:GLU:O	1:166:A:VAL:N	15	0.13	0.01	0.14
(1,36)	1:58:A:GLU:O	1:62:A:GLU:N	14	0.18	0.04	0.18
(1,60)	1:113:A:GLY:O	1:120:A:VAL:N	14	0.14	0.02	0.14
(2,219)	1:126:A:GLU:HG2	1:127:A:ALA:H	13	0.43	0.03	0.43
(6,248)	1:126:A:GLU:HG2	1:127:A:ALA:H	13	0.43	0.03	0.43
(1,31)	1:53:A:ARG:O	1:56:A:GLU:N	13	0.23	0.07	0.23
(1,83)	1:160:A:GLY:O	1:164:A:VAL:N	13	0.19	0.05	0.2
(1,45)	1:78:A:ALA:O	1:85:A:LEU:N	13	0.13	0.02	0.12
(1,24)	1:33:A:ALA:O	1:114:A:VAL:N	12	1.43	1.47	0.31
(2,211)	1:119:A:PRO:HG3	1:120:A:VAL:H	12	0.35	0.02	0.35
(6,239)	1:119:A:PRO:HG3	1:120:A:VAL:H	12	0.35	0.02	0.35
(2,98)	1:45:A:ILE:HB	1:47:A:LEU:H	12	0.26	0.06	0.26
(6,108)	1:45:A:ILE:HB	1:47:A:LEU:H	12	0.26	0.06	0.26
(1,16)	1:25:A:ILE:O	1:123:A:ASN:N	12	0.2	0.06	0.18
(1,12)	1:14:A:ALA:O	1:18:A:GLU:N	12	0.16	0.03	0.16
(1,28)	1:48:A:THR:O	1:24:A:TRP:N	12	0.16	0.04	0.15
(1,33)	1:55:A:GLY:O	1:59:A:ALA:N	12	0.15	0.04	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(2,140)	1:69:A:MET:HB2	1:70:A:GLU:HG3	11	1.05	0.14	1.12
(6,159)	1:69:A:MET:HB2	1:70:A:GLU:HG3	11	1.05	0.14	1.12
(2,162)	1:82:A:ASP:HB3	1:83:A:GLU:HA	11	0.41	0.13	0.48
(6,183)	1:82:A:ASP:HB3	1:83:A:GLU:HA	11	0.41	0.13	0.48
(2,163)	1:82:A:ASP:H	1:83:A:GLU:HB3	11	0.3	0.17	0.19
(6,184)	1:82:A:ASP:H	1:83:A:GLU:HB3	11	0.3	0.17	0.19
(1,93)	1:170:A:ALA:O	1:174:A:ARG:N	11	0.15	0.03	0.15
(1,35)	1:57:A:LEU:O	1:61:A:VAL:N	11	0.14	0.02	0.15
(1,55)	1:91:A:TRP:O	1:98:A:GLU:N	11	0.13	0.03	0.12
(1,75)	1:149:A:ILE:O	1:153:A:ARG:N	11	0.13	0.01	0.13
(1,88)	1:165:A:GLU:O	1:169:A:ALA:N	11	0.13	0.01	0.13
(2,138)	1:68:A:VAL:HG21	1:69:A:MET:H	11	0.12	0.02	0.11
(2,138)	1:68:A:VAL:HG22	1:69:A:MET:H	11	0.12	0.02	0.11
(2,138)	1:68:A:VAL:HG23	1:69:A:MET:H	11	0.12	0.02	0.11
(6,157)	1:68:A:VAL:HG21	1:69:A:MET:H	11	0.12	0.02	0.11
(6,157)	1:68:A:VAL:HG22	1:69:A:MET:H	11	0.12	0.02	0.11
(6,157)	1:68:A:VAL:HG23	1:69:A:MET:H	11	0.12	0.02	0.11
(6,13)	1:1:A:MET:HE2	1:174:A:ARG:H	10	30.1	1.27	30.2
(6,13)	1:1:A:MET:HE1	1:174:A:ARG:H	10	30.1	1.27	30.2
(6,13)	1:1:A:MET:HG2	1:174:A:ARG:H	10	30.1	1.27	30.2
(6,11)	1:1:A:MET:HE2	1:166:A:VAL:HG12	10	29.13	1.0	29.55
(6,11)	1:1:A:MET:HE1	1:166:A:VAL:HG12	10	29.13	1.0	29.55
(6,11)	1:1:A:MET:HG2	1:166:A:VAL:HG12	10	29.13	1.0	29.55
(6,12)	1:1:A:MET:HE2	1:170:A:ALA:H	10	28.5	1.11	28.83
(6,12)	1:1:A:MET:HE1	1:170:A:ALA:H	10	28.5	1.11	28.83
(6,12)	1:1:A:MET:HG2	1:170:A:ALA:H	10	28.5	1.11	28.83
(2,198)	1:111:A:ALA:H	1:112:A:GLU:HG2	10	1.73	1.11	1.86
(6,223)	1:111:A:ALA:H	1:112:A:GLU:HG2	10	1.73	1.11	1.86
(2,81)	1:41:A:LYS:HD3	1:42:A:HIS:H	10	0.44	0.36	0.26
(6,90)	1:41:A:LYS:HD3	1:42:A:HIS:H	10	0.44	0.36	0.26
(1,67)	1:131:A:ASP:O	1:135:A:TYR:N	10	0.19	0.04	0.2
(1,53)	1:88:A:GLU:O	1:49:A:PHE:N	10	0.19	0.05	0.18
(1,49)	1:84:A:LEU:O	1:45:A:ILE:N	10	0.17	0.05	0.16
(1,39)	1:61:A:VAL:O	1:66:A:GLY:N	10	0.16	0.05	0.15
(1,69)	1:135:A:TYR:O	1:139:A:VAL:N	9	0.21	0.06	0.25
(1,81)	1:155:A:ALA:O	1:159:A:LEU:N	9	0.13	0.02	0.13
(1,51)	1:86:A:ASP:O	1:47:A:LEU:N	8	0.15	0.05	0.12
(1,29)	1:49:A:PHE:O	1:90:A:ALA:N	8	0.13	0.02	0.12
(1,86)	1:163:A:LYS:O	1:167:A:LEU:N	8	0.11	0.01	0.11
(1,54)	1:90:A:ALA:O	1:51:A:GLY:N	7	0.2	0.11	0.17
(1,15)	1:24:A:TRP:O	1:48:A:THR:N	7	0.14	0.02	0.14
(1,32)	1:54:A:ARG:O	1:58:A:GLU:N	7	0.14	0.03	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,6)	1:8:A:LEU:O	1:12:A:ILE:N	7	0.13	0.01	0.13
(1,47)	1:80:A:ILE:O	1:83:A:GLU:N	7	0.13	0.01	0.12
(1,79)	1:153:A:ARG:O	1:157:A:THR:N	7	0.12	0.02	0.11
(1,56)	1:96:A:ALA:O	1:93:A:ALA:N	6	0.11	0.01	0.11
(1,70)	1:140:A:PRO:O	1:143:A:ASP:N	5	2.39	0.08	2.38
(2,70)	1:37:A:ARG:HG2	1:38:A:VAL:HA	5	1.34	0.09	1.38
(6,77)	1:37:A:ARG:HG2	1:38:A:VAL:HA	5	1.34	0.09	1.38
(3,5)	1:40:A:ARG:HA	1:41:A:LYS:HE3	5	1.25	0.06	1.23
(6,86)	1:40:A:ARG:HA	1:41:A:LYS:HE3	5	1.25	0.06	1.23
(6,198)	1:94:A:ASP:HB3	1:95:A:GLU:HB2	5	0.4	0.04	0.37
(2,80)	1:41:A:LYS:HB2	1:42:A:HIS:HA	5	0.38	0.03	0.39
(6,89)	1:41:A:LYS:HB2	1:42:A:HIS:HA	5	0.38	0.03	0.39
(2,49)	1:25:A:ILE:HG13	1:26:A:GLY:H	5	0.29	0.03	0.31
(6,51)	1:25:A:ILE:HG13	1:26:A:GLY:H	5	0.29	0.03	0.31
(1,59)	1:106:A:SER:O	1:124:A:SER:N	5	0.21	0.05	0.21
(1,46)	1:79:A:GLU:O	1:67:A:ARG:N	5	0.21	0.06	0.19
(1,62)	1:120:A:VAL:O	1:113:A:GLY:N	5	0.2	0.05	0.18
(1,11)	1:13:A:LEU:O	1:17:A:ASP:N	5	0.2	0.03	0.2
(1,42)	1:75:A:GLY:O	1:72:A:LEU:N	5	0.2	0.05	0.21
(1,10)	1:12:A:ILE:O	1:16:A:ALA:N	5	0.19	0.03	0.21
(1,14)	1:16:A:ALA:O	1:21:A:LEU:N	5	0.18	0.02	0.18
(1,27)	1:47:A:LEU:O	1:88:A:GLU:N	5	0.16	0.05	0.12
(1,66)	1:126:A:GLU:O	1:130:A:TRP:N	5	0.15	0.03	0.14
(1,7)	1:9:A:ILE:O	1:13:A:LEU:N	5	0.11	0.0	0.11
(1,77)	1:151:A:SER:O	1:155:A:ALA:N	5	0.11	0.01	0.11
(1,44)	1:77:A:LEU:O	1:69:A:MET:N	5	0.11	0.01	0.1
(2,71)	1:37:A:ARG:HD2	1:38:A:VAL:H	4	0.41	0.37	0.24
(6,78)	1:37:A:ARG:HD2	1:38:A:VAL:H	4	0.41	0.37	0.24
(2,76)	1:39:A:THR:HB	1:40:A:ARG:HD3	4	0.2	0.09	0.18
(6,83)	1:39:A:THR:HB	1:40:A:ARG:HD3	4	0.2	0.09	0.18
(1,13)	1:16:A:ALA:O	1:20:A:ASN:N	4	0.13	0.02	0.14
(1,80)	1:154:A:LEU:O	1:158:A:SER:N	4	0.12	0.01	0.12
(1,50)	1:85:A:LEU:O	1:78:A:ALA:N	4	0.12	0.01	0.12
(1,76)	1:150:A:GLU:O	1:154:A:LEU:N	4	0.12	0.01	0.12
(1,41)	1:70:A:GLU:O	1:77:A:LEU:N	4	0.12	0.02	0.11
(1,89)	1:166:A:VAL:O	1:170:A:ALA:N	4	0.12	0.0	0.12
(1,9)	1:11:A:LYS:O	1:15:A:ALA:N	4	0.11	0.01	0.12
(2,213)	1:119:A:PRO:HG2	1:120:A:VAL:H	3	0.37	0.0	0.37
(6,241)	1:119:A:PRO:HG2	1:120:A:VAL:H	3	0.37	0.0	0.37
(1,26)	1:46:A:ASP:O	1:26:A:GLY:N	3	0.13	0.02	0.14
(1,8)	1:10:A:HIS:O	1:14:A:ALA:N	3	0.13	0.0	0.13
(1,92)	1:169:A:ALA:O	1:173:A:SER:N	3	0.12	0.01	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

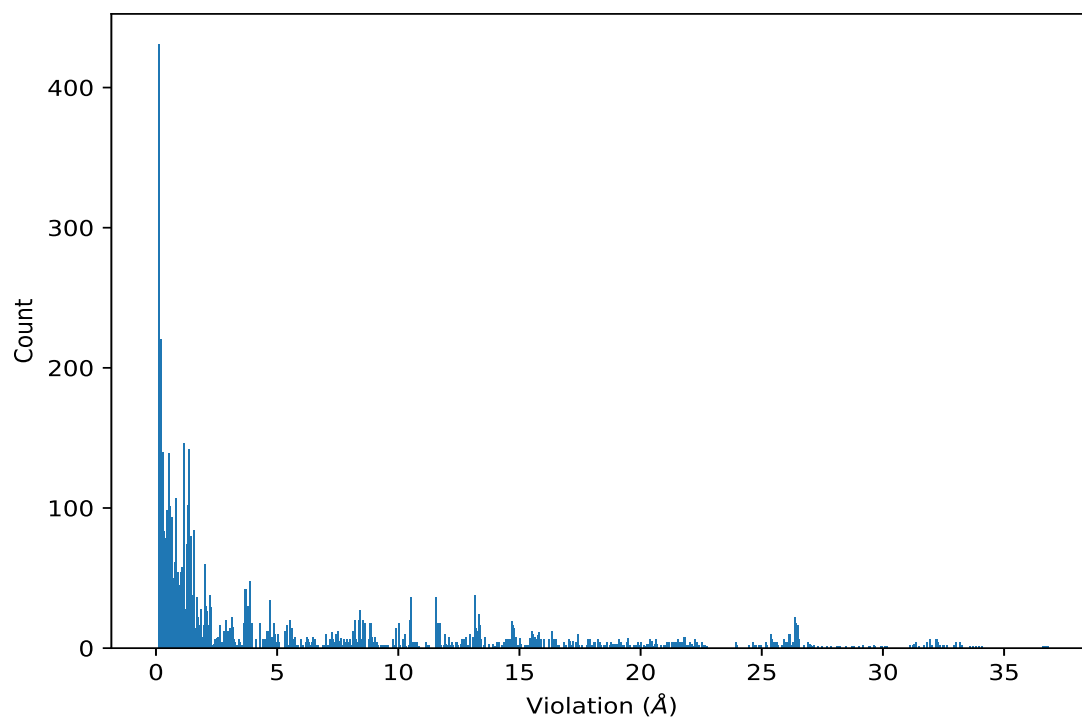
Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,2)	1:4:A:THR:O	1:8:A:LEU:N	2	0.19	0.0	0.19
(1,20)	1:30:A:ALA:O	1:34:A:ARG:N	2	0.15	0.02	0.15
(1,84)	1:161:A:ALA:O	1:165:A:GLU:N	2	0.13	0.01	0.13

¹Number of violated models, ²Standard deviation

9.5 All violated distance restraints [i](#)

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

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



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

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

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(6,14)	1:1:A:MET:HG2	1:180:A:HIS:H	9	36.85

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(6,14)	1:1:A:MET:HG2	1:180:A:HIS:H	10	36.78
(6,14)	1:1:A:MET:HG2	1:180:A:HIS:H	6	36.73
(6,14)	1:1:A:MET:HG2	1:180:A:HIS:H	7	36.67
(6,14)	1:1:A:MET:HG2	1:180:A:HIS:H	8	36.62
(6,14)	1:1:A:MET:HE2	1:180:A:HIS:H	2	34.08
(6,14)	1:1:A:MET:HE2	1:180:A:HIS:H	3	33.98
(6,14)	1:1:A:MET:HE1	1:180:A:HIS:H	4	33.83
(6,14)	1:1:A:MET:HE2	1:180:A:HIS:H	1	33.73
(6,14)	1:1:A:MET:HE1	1:180:A:HIS:H	5	33.58
(5,9)	1:62:A:GLU:H	1:141:A:PRO:O	9	33.27
(4,9)	1:62:A:GLU:H	1:141:A:PRO:O	9	33.27
(5,9)	1:62:A:GLU:H	1:141:A:PRO:O	8	33.18
(4,9)	1:62:A:GLU:H	1:141:A:PRO:O	8	33.18
(5,9)	1:62:A:GLU:H	1:141:A:PRO:O	7	33.17
(4,9)	1:62:A:GLU:H	1:141:A:PRO:O	7	33.17
(5,9)	1:62:A:GLU:H	1:141:A:PRO:O	10	33.05
(4,9)	1:62:A:GLU:H	1:141:A:PRO:O	10	33.05
(5,9)	1:62:A:GLU:H	1:141:A:PRO:O	6	33.04
(4,9)	1:62:A:GLU:H	1:141:A:PRO:O	6	33.04
(5,9)	1:62:A:GLU:H	1:141:A:PRO:O	4	32.93
(4,9)	1:62:A:GLU:H	1:141:A:PRO:O	4	32.93
(5,9)	1:62:A:GLU:H	1:141:A:PRO:O	1	32.6
(4,9)	1:62:A:GLU:H	1:141:A:PRO:O	1	32.6
(5,9)	1:62:A:GLU:H	1:141:A:PRO:O	5	32.53
(4,9)	1:62:A:GLU:H	1:141:A:PRO:O	5	32.53
(5,9)	1:62:A:GLU:H	1:141:A:PRO:O	2	32.47
(4,9)	1:62:A:GLU:H	1:141:A:PRO:O	2	32.47
(5,9)	1:62:A:GLU:H	1:141:A:PRO:O	3	32.38
(4,9)	1:62:A:GLU:H	1:141:A:PRO:O	3	32.38
(6,71)	1:33:A:ALA:H	1:183:A:HIS:H	9	32.31
(2,64)	1:33:A:ALA:H	1:183:A:HIS:H	9	32.31
(6,71)	1:33:A:ALA:H	1:183:A:HIS:H	7	32.3
(2,64)	1:33:A:ALA:H	1:183:A:HIS:H	7	32.3
(6,71)	1:33:A:ALA:H	1:183:A:HIS:H	6	32.28
(2,64)	1:33:A:ALA:H	1:183:A:HIS:H	6	32.28
(6,71)	1:33:A:ALA:H	1:183:A:HIS:H	1	32.23
(6,71)	1:33:A:ALA:H	1:183:A:HIS:H	8	32.23
(2,64)	1:33:A:ALA:H	1:183:A:HIS:H	1	32.23
(2,64)	1:33:A:ALA:H	1:183:A:HIS:H	8	32.23
(6,71)	1:33:A:ALA:H	1:183:A:HIS:H	3	32.21
(2,64)	1:33:A:ALA:H	1:183:A:HIS:H	3	32.21
(6,71)	1:33:A:ALA:H	1:183:A:HIS:H	4	32.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(6,71)	1:33:A:ALA:H	1:183:A:HIS:H	10	32.18
(2,64)	1:33:A:ALA:H	1:183:A:HIS:H	4	32.18
(2,64)	1:33:A:ALA:H	1:183:A:HIS:H	10	32.18
(6,71)	1:33:A:ALA:H	1:183:A:HIS:H	2	32.15
(2,64)	1:33:A:ALA:H	1:183:A:HIS:H	2	32.15
(5,10)	1:62:A:GLU:N	1:141:A:PRO:O	9	32.05
(4,10)	1:62:A:GLU:N	1:141:A:PRO:O	9	32.05
(5,10)	1:62:A:GLU:N	1:141:A:PRO:O	8	31.94
(4,10)	1:62:A:GLU:N	1:141:A:PRO:O	8	31.94
(6,71)	1:33:A:ALA:H	1:183:A:HIS:H	5	31.93
(5,10)	1:62:A:GLU:N	1:141:A:PRO:O	7	31.93
(4,10)	1:62:A:GLU:N	1:141:A:PRO:O	7	31.93
(2,64)	1:33:A:ALA:H	1:183:A:HIS:H	5	31.93
(5,10)	1:62:A:GLU:N	1:141:A:PRO:O	10	31.81
(4,10)	1:62:A:GLU:N	1:141:A:PRO:O	10	31.81
(5,10)	1:62:A:GLU:N	1:141:A:PRO:O	6	31.8
(4,10)	1:62:A:GLU:N	1:141:A:PRO:O	6	31.8
(5,10)	1:62:A:GLU:N	1:141:A:PRO:O	4	31.7
(4,10)	1:62:A:GLU:N	1:141:A:PRO:O	4	31.7
(6,13)	1:1:A:MET:HG2	1:174:A:ARG:H	9	31.47
(6,13)	1:1:A:MET:HG2	1:174:A:ARG:H	10	31.4
(6,13)	1:1:A:MET:HG2	1:174:A:ARG:H	7	31.37
(5,10)	1:62:A:GLU:N	1:141:A:PRO:O	1	31.36
(4,10)	1:62:A:GLU:N	1:141:A:PRO:O	1	31.36
(6,13)	1:1:A:MET:HG2	1:174:A:ARG:H	6	31.3
(5,10)	1:62:A:GLU:N	1:141:A:PRO:O	5	31.29
(4,10)	1:62:A:GLU:N	1:141:A:PRO:O	5	31.29
(6,13)	1:1:A:MET:HG2	1:174:A:ARG:H	8	31.25
(5,10)	1:62:A:GLU:N	1:141:A:PRO:O	2	31.22
(4,10)	1:62:A:GLU:N	1:141:A:PRO:O	2	31.22
(5,10)	1:62:A:GLU:N	1:141:A:PRO:O	3	31.15
(4,10)	1:62:A:GLU:N	1:141:A:PRO:O	3	31.15
(6,11)	1:1:A:MET:HG2	1:166:A:VAL:HG12	9	30.18
(6,11)	1:1:A:MET:HG2	1:166:A:VAL:HG12	10	30.13
(6,11)	1:1:A:MET:HG2	1:166:A:VAL:HG12	7	30.09
(6,11)	1:1:A:MET:HG2	1:166:A:VAL:HG12	6	29.98
(6,11)	1:1:A:MET:HG2	1:166:A:VAL:HG12	8	29.93
(6,12)	1:1:A:MET:HG2	1:170:A:ALA:H	9	29.7
(6,12)	1:1:A:MET:HG2	1:170:A:ALA:H	10	29.61
(6,12)	1:1:A:MET:HG2	1:170:A:ALA:H	7	29.6
(6,12)	1:1:A:MET:HG2	1:170:A:ALA:H	6	29.47
(6,12)	1:1:A:MET:HG2	1:170:A:ALA:H	8	29.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(6,11)	1:1:A:MET:HE1	1:166:A:VAL:HG12	4	29.17
(6,13)	1:1:A:MET:HE1	1:174:A:ARG:H	4	29.16
(6,13)	1:1:A:MET:HE2	1:174:A:ARG:H	2	29.03
(6,13)	1:1:A:MET:HE2	1:174:A:ARG:H	3	28.83
(6,13)	1:1:A:MET:HE2	1:174:A:ARG:H	5	28.72
(6,13)	1:1:A:MET:HE2	1:174:A:ARG:H	1	28.49
(6,12)	1:1:A:MET:HE1	1:170:A:ALA:H	4	28.21
(6,11)	1:1:A:MET:HE2	1:166:A:VAL:HG12	2	28.18
(6,11)	1:1:A:MET:HE2	1:166:A:VAL:HG12	3	28.12
(6,11)	1:1:A:MET:HE2	1:166:A:VAL:HG12	5	27.87
(6,11)	1:1:A:MET:HE2	1:166:A:VAL:HG12	1	27.67
(6,12)	1:1:A:MET:HE2	1:170:A:ALA:H	2	27.47
(6,12)	1:1:A:MET:HE2	1:170:A:ALA:H	3	27.33
(6,42)	1:19:A:ARG:HD2	1:37:A:ARG:HG2	1	27.2
(2,40)	1:19:A:ARG:HD2	1:37:A:ARG:HG2	1	27.2
(6,12)	1:1:A:MET:HE2	1:170:A:ALA:H	5	27.15
(5,15)	1:82:A:ASP:H	1:138:A:GLU:O	7	27.0
(4,15)	1:82:A:ASP:H	1:138:A:GLU:O	7	27.0
(6,12)	1:1:A:MET:HE2	1:170:A:ALA:H	1	26.99
(5,15)	1:82:A:ASP:H	1:138:A:GLU:O	8	26.96
(4,15)	1:82:A:ASP:H	1:138:A:GLU:O	8	26.96
(5,15)	1:82:A:ASP:H	1:138:A:GLU:O	9	26.94
(4,15)	1:82:A:ASP:H	1:138:A:GLU:O	9	26.94
(5,15)	1:82:A:ASP:H	1:138:A:GLU:O	10	26.92
(4,15)	1:82:A:ASP:H	1:138:A:GLU:O	10	26.92
(5,15)	1:82:A:ASP:H	1:138:A:GLU:O	6	26.73
(4,15)	1:82:A:ASP:H	1:138:A:GLU:O	6	26.73
(6,70)	1:33:A:ALA:HB1	1:183:A:HIS:H	9	26.53
(6,70)	1:33:A:ALA:HB2	1:183:A:HIS:H	9	26.53
(6,70)	1:33:A:ALA:HB3	1:183:A:HIS:H	9	26.53
(2,63)	1:33:A:ALA:HB1	1:183:A:HIS:H	9	26.53
(2,63)	1:33:A:ALA:HB2	1:183:A:HIS:H	9	26.53
(2,63)	1:33:A:ALA:HB3	1:183:A:HIS:H	9	26.53
(6,70)	1:33:A:ALA:HB1	1:183:A:HIS:H	6	26.48
(6,70)	1:33:A:ALA:HB2	1:183:A:HIS:H	6	26.48
(6,70)	1:33:A:ALA:HB3	1:183:A:HIS:H	6	26.48
(6,70)	1:33:A:ALA:HB1	1:183:A:HIS:H	7	26.48
(6,70)	1:33:A:ALA:HB2	1:183:A:HIS:H	7	26.48
(6,70)	1:33:A:ALA:HB3	1:183:A:HIS:H	7	26.48
(2,63)	1:33:A:ALA:HB1	1:183:A:HIS:H	6	26.48
(2,63)	1:33:A:ALA:HB2	1:183:A:HIS:H	6	26.48
(2,63)	1:33:A:ALA:HB3	1:183:A:HIS:H	6	26.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,63)	1:33:A:ALA:HB1	1:183:A:HIS:H	7	26.48
(2,63)	1:33:A:ALA:HB2	1:183:A:HIS:H	7	26.48
(2,63)	1:33:A:ALA:HB3	1:183:A:HIS:H	7	26.48
(6,93)	1:41:A:LYS:HE2	1:51:A:GLY:HA3	3	26.46
(6,93)	1:41:A:LYS:HE2	1:51:A:GLY:HA3	4	26.46
(2,84)	1:41:A:LYS:HE2	1:51:A:GLY:HA3	3	26.46
(2,84)	1:41:A:LYS:HE2	1:51:A:GLY:HA3	4	26.46
(6,70)	1:33:A:ALA:HB1	1:183:A:HIS:H	1	26.44
(6,70)	1:33:A:ALA:HB2	1:183:A:HIS:H	1	26.44
(6,70)	1:33:A:ALA:HB3	1:183:A:HIS:H	1	26.44
(2,63)	1:33:A:ALA:HB1	1:183:A:HIS:H	1	26.44
(2,63)	1:33:A:ALA:HB2	1:183:A:HIS:H	1	26.44
(2,63)	1:33:A:ALA:HB3	1:183:A:HIS:H	1	26.44
(6,70)	1:33:A:ALA:HB1	1:183:A:HIS:H	3	26.42
(6,70)	1:33:A:ALA:HB2	1:183:A:HIS:H	3	26.42
(6,70)	1:33:A:ALA:HB3	1:183:A:HIS:H	3	26.42
(6,70)	1:33:A:ALA:HB1	1:183:A:HIS:H	8	26.42
(6,70)	1:33:A:ALA:HB2	1:183:A:HIS:H	8	26.42
(6,70)	1:33:A:ALA:HB3	1:183:A:HIS:H	8	26.42
(2,63)	1:33:A:ALA:HB1	1:183:A:HIS:H	3	26.42
(2,63)	1:33:A:ALA:HB2	1:183:A:HIS:H	3	26.42
(2,63)	1:33:A:ALA:HB3	1:183:A:HIS:H	3	26.42
(2,63)	1:33:A:ALA:HB1	1:183:A:HIS:H	8	26.42
(2,63)	1:33:A:ALA:HB2	1:183:A:HIS:H	8	26.42
(2,63)	1:33:A:ALA:HB3	1:183:A:HIS:H	8	26.42
(6,70)	1:33:A:ALA:HB1	1:183:A:HIS:H	2	26.4
(6,70)	1:33:A:ALA:HB2	1:183:A:HIS:H	2	26.4
(6,70)	1:33:A:ALA:HB3	1:183:A:HIS:H	2	26.4
(2,63)	1:33:A:ALA:HB1	1:183:A:HIS:H	2	26.4
(2,63)	1:33:A:ALA:HB2	1:183:A:HIS:H	2	26.4
(2,63)	1:33:A:ALA:HB3	1:183:A:HIS:H	2	26.4
(6,70)	1:33:A:ALA:HB1	1:183:A:HIS:H	10	26.39
(6,70)	1:33:A:ALA:HB2	1:183:A:HIS:H	10	26.39
(6,70)	1:33:A:ALA:HB3	1:183:A:HIS:H	10	26.39
(2,63)	1:33:A:ALA:HB1	1:183:A:HIS:H	10	26.39
(2,63)	1:33:A:ALA:HB2	1:183:A:HIS:H	10	26.39
(2,63)	1:33:A:ALA:HB3	1:183:A:HIS:H	10	26.39
(6,94)	1:41:A:LYS:HE2	1:163:A:LYS:HG2	7	26.38
(6,70)	1:33:A:ALA:HB1	1:183:A:HIS:H	4	26.38
(6,70)	1:33:A:ALA:HB2	1:183:A:HIS:H	4	26.38
(6,70)	1:33:A:ALA:HB3	1:183:A:HIS:H	4	26.38
(3,6)	1:41:A:LYS:HE2	1:163:A:LYS:HG2	7	26.38

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,63)	1:33:A:ALA:HB1	1:183:A:HIS:H	4	26.38
(2,63)	1:33:A:ALA:HB2	1:183:A:HIS:H	4	26.38
(2,63)	1:33:A:ALA:HB3	1:183:A:HIS:H	4	26.38
(6,94)	1:41:A:LYS:HE2	1:163:A:LYS:HG2	6	26.36
(3,6)	1:41:A:LYS:HE2	1:163:A:LYS:HG2	6	26.36
(6,94)	1:41:A:LYS:HE2	1:163:A:LYS:HG2	8	26.31
(3,6)	1:41:A:LYS:HE2	1:163:A:LYS:HG2	8	26.31
(5,15)	1:82:A:ASP:H	1:138:A:GLU:O	5	26.29
(4,15)	1:82:A:ASP:H	1:138:A:GLU:O	5	26.29
(6,94)	1:41:A:LYS:HE2	1:163:A:LYS:HG2	9	26.25
(3,6)	1:41:A:LYS:HE2	1:163:A:LYS:HG2	9	26.25
(6,93)	1:41:A:LYS:HE2	1:51:A:GLY:HA3	6	26.21
(2,84)	1:41:A:LYS:HE2	1:51:A:GLY:HA3	6	26.21
(6,93)	1:41:A:LYS:HE2	1:51:A:GLY:HA3	9	26.2
(2,84)	1:41:A:LYS:HE2	1:51:A:GLY:HA3	9	26.2
(5,15)	1:82:A:ASP:H	1:138:A:GLU:O	4	26.18
(4,15)	1:82:A:ASP:H	1:138:A:GLU:O	4	26.18
(5,15)	1:82:A:ASP:H	1:138:A:GLU:O	2	26.17
(5,15)	1:82:A:ASP:H	1:138:A:GLU:O	3	26.17
(4,15)	1:82:A:ASP:H	1:138:A:GLU:O	2	26.17
(4,15)	1:82:A:ASP:H	1:138:A:GLU:O	3	26.17
(6,93)	1:41:A:LYS:HE2	1:51:A:GLY:HA3	1	26.16
(2,84)	1:41:A:LYS:HE2	1:51:A:GLY:HA3	1	26.16
(6,93)	1:41:A:LYS:HE2	1:51:A:GLY:HA3	8	26.15
(2,84)	1:41:A:LYS:HE2	1:51:A:GLY:HA3	8	26.15
(6,93)	1:41:A:LYS:HE2	1:51:A:GLY:HA3	10	26.14
(2,84)	1:41:A:LYS:HE2	1:51:A:GLY:HA3	10	26.14
(6,70)	1:33:A:ALA:HB1	1:183:A:HIS:H	5	26.12
(6,70)	1:33:A:ALA:HB2	1:183:A:HIS:H	5	26.12
(6,70)	1:33:A:ALA:HB3	1:183:A:HIS:H	5	26.12
(2,63)	1:33:A:ALA:HB1	1:183:A:HIS:H	5	26.12
(2,63)	1:33:A:ALA:HB2	1:183:A:HIS:H	5	26.12
(2,63)	1:33:A:ALA:HB3	1:183:A:HIS:H	5	26.12
(5,15)	1:82:A:ASP:H	1:138:A:GLU:O	1	26.06
(4,15)	1:82:A:ASP:H	1:138:A:GLU:O	1	26.06
(6,93)	1:41:A:LYS:HE2	1:51:A:GLY:HA3	7	26.04
(2,84)	1:41:A:LYS:HE2	1:51:A:GLY:HA3	7	26.04
(6,92)	1:41:A:LYS:HE2	1:51:A:GLY:H	3	26.02
(2,83)	1:41:A:LYS:HE2	1:51:A:GLY:H	3	26.02
(6,92)	1:41:A:LYS:HE2	1:51:A:GLY:H	4	25.97
(2,83)	1:41:A:LYS:HE2	1:51:A:GLY:H	4	25.97
(6,42)	1:19:A:ARG:HD2	1:37:A:ARG:HG2	6	25.96

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,40)	1:19:A:ARG:HD2	1:37:A:ARG:HG2	6	25.96
(6,42)	1:19:A:ARG:HD2	1:37:A:ARG:HG2	2	25.95
(6,42)	1:19:A:ARG:HD2	1:37:A:ARG:HG2	10	25.95
(2,40)	1:19:A:ARG:HD2	1:37:A:ARG:HG2	2	25.95
(2,40)	1:19:A:ARG:HD2	1:37:A:ARG:HG2	10	25.95
(6,42)	1:19:A:ARG:HD2	1:37:A:ARG:HG2	4	25.92
(2,40)	1:19:A:ARG:HD2	1:37:A:ARG:HG2	4	25.92
(6,94)	1:41:A:LYS:HE2	1:163:A:LYS:HG2	5	25.89
(3,6)	1:41:A:LYS:HE2	1:163:A:LYS:HG2	5	25.89
(6,92)	1:41:A:LYS:HE2	1:51:A:GLY:H	1	25.81
(2,83)	1:41:A:LYS:HE2	1:51:A:GLY:H	1	25.81
(6,93)	1:41:A:LYS:HE2	1:51:A:GLY:HA3	2	25.67
(2,84)	1:41:A:LYS:HE2	1:51:A:GLY:HA3	2	25.67
(6,93)	1:41:A:LYS:HE2	1:51:A:GLY:HA3	5	25.63
(2,84)	1:41:A:LYS:HE2	1:51:A:GLY:HA3	5	25.63
(6,92)	1:41:A:LYS:HE2	1:51:A:GLY:H	6	25.6
(2,83)	1:41:A:LYS:HE2	1:51:A:GLY:H	6	25.6
(6,92)	1:41:A:LYS:HE2	1:51:A:GLY:H	9	25.58
(2,83)	1:41:A:LYS:HE2	1:51:A:GLY:H	9	25.58
(6,92)	1:41:A:LYS:HE2	1:51:A:GLY:H	10	25.55
(2,83)	1:41:A:LYS:HE2	1:51:A:GLY:H	10	25.55
(6,92)	1:41:A:LYS:HE2	1:51:A:GLY:H	8	25.54
(2,83)	1:41:A:LYS:HE2	1:51:A:GLY:H	8	25.54
(6,42)	1:19:A:ARG:HD2	1:37:A:ARG:HG2	5	25.5
(2,40)	1:19:A:ARG:HD2	1:37:A:ARG:HG2	5	25.5
(6,92)	1:41:A:LYS:HE2	1:51:A:GLY:H	7	25.46
(2,83)	1:41:A:LYS:HE2	1:51:A:GLY:H	7	25.46
(6,42)	1:19:A:ARG:HD2	1:37:A:ARG:HG2	8	25.43
(2,40)	1:19:A:ARG:HD2	1:37:A:ARG:HG2	8	25.43
(5,16)	1:82:A:ASP:N	1:138:A:GLU:O	7	25.41
(5,16)	1:82:A:ASP:N	1:138:A:GLU:O	9	25.41
(4,16)	1:82:A:ASP:N	1:138:A:GLU:O	7	25.41
(4,16)	1:82:A:ASP:N	1:138:A:GLU:O	9	25.41
(5,16)	1:82:A:ASP:N	1:138:A:GLU:O	8	25.4
(4,16)	1:82:A:ASP:N	1:138:A:GLU:O	8	25.4
(6,94)	1:41:A:LYS:HE2	1:163:A:LYS:HG2	3	25.38
(5,16)	1:82:A:ASP:N	1:138:A:GLU:O	10	25.38
(4,16)	1:82:A:ASP:N	1:138:A:GLU:O	10	25.38
(3,6)	1:41:A:LYS:HE2	1:163:A:LYS:HG2	3	25.38
(6,94)	1:41:A:LYS:HE2	1:163:A:LYS:HG2	4	25.36
(6,42)	1:19:A:ARG:HD2	1:37:A:ARG:HG2	9	25.36
(3,6)	1:41:A:LYS:HE2	1:163:A:LYS:HG2	4	25.36

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,40)	1:19:A:ARG:HD2	1:37:A:ARG:HG2	9	25.36
(6,92)	1:41:A:LYS:HE2	1:51:A:GLY:H	5	25.21
(2,83)	1:41:A:LYS:HE2	1:51:A:GLY:H	5	25.21
(6,92)	1:41:A:LYS:HE2	1:51:A:GLY:H	2	25.2
(2,83)	1:41:A:LYS:HE2	1:51:A:GLY:H	2	25.2
(5,16)	1:82:A:ASP:N	1:138:A:GLU:O	6	25.16
(4,16)	1:82:A:ASP:N	1:138:A:GLU:O	6	25.16
(6,94)	1:41:A:LYS:HE2	1:163:A:LYS:HG2	1	24.98
(3,6)	1:41:A:LYS:HE2	1:163:A:LYS:HG2	1	24.98
(6,42)	1:19:A:ARG:HD2	1:37:A:ARG:HG2	7	24.87
(2,40)	1:19:A:ARG:HD2	1:37:A:ARG:HG2	7	24.87
(5,16)	1:82:A:ASP:N	1:138:A:GLU:O	5	24.76
(4,16)	1:82:A:ASP:N	1:138:A:GLU:O	5	24.76
(5,16)	1:82:A:ASP:N	1:138:A:GLU:O	3	24.68
(4,16)	1:82:A:ASP:N	1:138:A:GLU:O	3	24.68
(5,16)	1:82:A:ASP:N	1:138:A:GLU:O	2	24.62
(4,16)	1:82:A:ASP:N	1:138:A:GLU:O	2	24.62
(5,16)	1:82:A:ASP:N	1:138:A:GLU:O	4	24.6
(4,16)	1:82:A:ASP:N	1:138:A:GLU:O	4	24.6
(5,16)	1:82:A:ASP:N	1:138:A:GLU:O	1	24.48
(4,16)	1:82:A:ASP:N	1:138:A:GLU:O	1	24.48
(6,42)	1:19:A:ARG:HD2	1:37:A:ARG:HG2	3	23.96
(2,40)	1:19:A:ARG:HD2	1:37:A:ARG:HG2	3	23.96
(6,94)	1:41:A:LYS:HE2	1:163:A:LYS:HG2	10	23.95
(3,6)	1:41:A:LYS:HE2	1:163:A:LYS:HG2	10	23.95
(6,94)	1:41:A:LYS:HE2	1:163:A:LYS:HG2	2	23.92
(3,6)	1:41:A:LYS:HE2	1:163:A:LYS:HG2	2	23.92
(6,10)	1:1:A:MET:HG2	1:164:A:VAL:HG22	9	22.74
(6,10)	1:1:A:MET:HG2	1:164:A:VAL:HG22	10	22.68
(6,10)	1:1:A:MET:HG2	1:164:A:VAL:HG22	7	22.67
(6,10)	1:1:A:MET:HG2	1:164:A:VAL:HG22	6	22.59
(6,10)	1:1:A:MET:HG2	1:164:A:VAL:HG22	8	22.56
(6,93)	1:41:A:LYS:HE2	1:51:A:GLY:HA3	13	22.54
(2,84)	1:41:A:LYS:HE2	1:51:A:GLY:HA3	13	22.54
(6,93)	1:41:A:LYS:HE2	1:51:A:GLY:HA3	15	22.52
(2,84)	1:41:A:LYS:HE2	1:51:A:GLY:HA3	15	22.52
(6,93)	1:41:A:LYS:HE2	1:51:A:GLY:HA3	12	22.42
(2,84)	1:41:A:LYS:HE2	1:51:A:GLY:HA3	12	22.42
(6,10)	1:1:A:MET:HE1	1:164:A:VAL:HG22	4	22.39
(6,92)	1:41:A:LYS:HE2	1:51:A:GLY:H	13	22.31
(2,83)	1:41:A:LYS:HE2	1:51:A:GLY:H	13	22.31
(6,93)	1:41:A:LYS:HE2	1:51:A:GLY:HA3	14	22.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,84)	1:41:A:LYS:HE2	1:51:A:GLY:HA3	14	22.3
(6,42)	1:19:A:ARG:HD2	1:37:A:ARG:HG2	11	22.26
(6,9)	1:1:A:MET:HG2	1:159:A:LEU:HD22	9	22.26
(2,40)	1:19:A:ARG:HD2	1:37:A:ARG:HG2	11	22.26
(6,92)	1:41:A:LYS:HE2	1:51:A:GLY:H	15	22.23
(6,42)	1:19:A:ARG:HD2	1:37:A:ARG:HG2	12	22.23
(2,83)	1:41:A:LYS:HE2	1:51:A:GLY:H	15	22.23
(2,40)	1:19:A:ARG:HD2	1:37:A:ARG:HG2	12	22.23
(6,179)	1:77:A:LEU:HG	1:117:A:GLY:H	11	22.21
(2,158)	1:77:A:LEU:HG	1:117:A:GLY:H	11	22.21
(6,9)	1:1:A:MET:HG2	1:159:A:LEU:HD22	7	22.16
(6,9)	1:1:A:MET:HG2	1:159:A:LEU:HD22	6	22.15
(6,92)	1:41:A:LYS:HE2	1:51:A:GLY:H	12	22.12
(2,83)	1:41:A:LYS:HE2	1:51:A:GLY:H	12	22.12
(6,92)	1:41:A:LYS:HE2	1:51:A:GLY:H	14	22.06
(2,83)	1:41:A:LYS:HE2	1:51:A:GLY:H	14	22.06
(6,9)	1:1:A:MET:HG2	1:159:A:LEU:HD22	8	22.05
(6,179)	1:77:A:LEU:HG	1:117:A:GLY:H	1	22.02
(2,158)	1:77:A:LEU:HG	1:117:A:GLY:H	1	22.02
(6,42)	1:19:A:ARG:HD2	1:37:A:ARG:HG2	14	22.01
(2,40)	1:19:A:ARG:HD2	1:37:A:ARG:HG2	14	22.01
(6,9)	1:1:A:MET:HE1	1:159:A:LEU:HD22	4	21.99
(6,9)	1:1:A:MET:HG2	1:159:A:LEU:HD22	10	21.97
(6,179)	1:77:A:LEU:HG	1:117:A:GLY:H	5	21.93
(2,158)	1:77:A:LEU:HG	1:117:A:GLY:H	5	21.93
(6,102)	1:42:A:HIS:H	1:168:A:ARG:HB3	6	21.85
(2,92)	1:42:A:HIS:H	1:168:A:ARG:HB3	6	21.85
(6,179)	1:77:A:LEU:HG	1:117:A:GLY:H	6	21.83
(6,102)	1:42:A:HIS:H	1:168:A:ARG:HB3	8	21.83
(6,42)	1:19:A:ARG:HD2	1:37:A:ARG:HG2	15	21.83
(2,158)	1:77:A:LEU:HG	1:117:A:GLY:H	6	21.83
(2,92)	1:42:A:HIS:H	1:168:A:ARG:HB3	8	21.83
(2,40)	1:19:A:ARG:HD2	1:37:A:ARG:HG2	15	21.83
(6,102)	1:42:A:HIS:H	1:168:A:ARG:HB3	7	21.8
(2,92)	1:42:A:HIS:H	1:168:A:ARG:HB3	7	21.8
(6,102)	1:42:A:HIS:H	1:168:A:ARG:HB3	9	21.79
(2,92)	1:42:A:HIS:H	1:168:A:ARG:HB3	9	21.79
(6,179)	1:77:A:LEU:HG	1:117:A:GLY:H	8	21.78
(2,158)	1:77:A:LEU:HG	1:117:A:GLY:H	8	21.78
(6,102)	1:42:A:HIS:H	1:168:A:ARG:HB3	10	21.77
(2,92)	1:42:A:HIS:H	1:168:A:ARG:HB3	10	21.77
(6,179)	1:77:A:LEU:HG	1:117:A:GLY:H	9	21.76

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,158)	1:77:A:LEU:HG	1:117:A:GLY:H	9	21.76
(6,179)	1:77:A:LEU:HG	1:117:A:GLY:H	10	21.72
(2,158)	1:77:A:LEU:HG	1:117:A:GLY:H	10	21.72
(6,93)	1:41:A:LYS:HE2	1:51:A:GLY:HA3	11	21.71
(2,84)	1:41:A:LYS:HE2	1:51:A:GLY:HA3	11	21.71
(6,179)	1:77:A:LEU:HG	1:117:A:GLY:H	12	21.7
(2,158)	1:77:A:LEU:HG	1:117:A:GLY:H	12	21.7
(6,179)	1:77:A:LEU:HG	1:117:A:GLY:H	14	21.68
(2,158)	1:77:A:LEU:HG	1:117:A:GLY:H	14	21.68
(6,16)	1:2:A:ASP:HB2	1:158:A:SER:HB2	13	21.65
(2,16)	1:2:A:ASP:HB2	1:158:A:SER:HB2	13	21.65
(6,179)	1:77:A:LEU:HG	1:117:A:GLY:H	7	21.63
(2,158)	1:77:A:LEU:HG	1:117:A:GLY:H	7	21.63
(6,101)	1:42:A:HIS:H	1:168:A:ARG:HD2	6	21.57
(2,91)	1:42:A:HIS:H	1:168:A:ARG:HD2	6	21.57
(6,102)	1:42:A:HIS:H	1:168:A:ARG:HB3	2	21.55
(2,92)	1:42:A:HIS:H	1:168:A:ARG:HB3	2	21.55
(6,102)	1:42:A:HIS:H	1:168:A:ARG:HB3	3	21.53
(6,92)	1:41:A:LYS:HE2	1:51:A:GLY:H	11	21.53
(2,92)	1:42:A:HIS:H	1:168:A:ARG:HB3	3	21.53
(2,83)	1:41:A:LYS:HE2	1:51:A:GLY:H	11	21.53
(6,101)	1:42:A:HIS:H	1:168:A:ARG:HD2	8	21.51
(2,91)	1:42:A:HIS:H	1:168:A:ARG:HD2	8	21.51
(6,101)	1:42:A:HIS:H	1:168:A:ARG:HD2	9	21.48
(2,91)	1:42:A:HIS:H	1:168:A:ARG:HD2	9	21.48
(6,101)	1:42:A:HIS:H	1:168:A:ARG:HD2	7	21.46
(2,91)	1:42:A:HIS:H	1:168:A:ARG:HD2	7	21.46
(6,16)	1:2:A:ASP:HB2	1:158:A:SER:HB2	11	21.45
(2,16)	1:2:A:ASP:HB2	1:158:A:SER:HB2	11	21.45
(6,102)	1:42:A:HIS:H	1:168:A:ARG:HB3	4	21.44
(2,92)	1:42:A:HIS:H	1:168:A:ARG:HB3	4	21.44
(6,101)	1:42:A:HIS:H	1:168:A:ARG:HD2	10	21.4
(2,91)	1:42:A:HIS:H	1:168:A:ARG:HD2	10	21.4
(6,42)	1:19:A:ARG:HD2	1:37:A:ARG:HG2	13	21.35
(2,40)	1:19:A:ARG:HD2	1:37:A:ARG:HG2	13	21.35
(6,16)	1:2:A:ASP:HB2	1:158:A:SER:HB2	15	21.31
(2,16)	1:2:A:ASP:HB2	1:158:A:SER:HB2	15	21.31
(6,102)	1:42:A:HIS:H	1:168:A:ARG:HB3	1	21.3
(2,92)	1:42:A:HIS:H	1:168:A:ARG:HB3	1	21.3
(6,102)	1:42:A:HIS:H	1:168:A:ARG:HB3	5	21.29
(2,92)	1:42:A:HIS:H	1:168:A:ARG:HB3	5	21.29
(6,101)	1:42:A:HIS:H	1:168:A:ARG:HD2	2	21.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,91)	1:42:A:HIS:H	1:168:A:ARG:HD2	2	21.26
(6,16)	1:2:A:ASP:HB2	1:158:A:SER:HB2	14	21.2
(2,16)	1:2:A:ASP:HB2	1:158:A:SER:HB2	14	21.2
(6,101)	1:42:A:HIS:H	1:168:A:ARG:HD2	4	21.18
(2,91)	1:42:A:HIS:H	1:168:A:ARG:HD2	4	21.18
(6,101)	1:42:A:HIS:H	1:168:A:ARG:HD2	1	21.08
(2,91)	1:42:A:HIS:H	1:168:A:ARG:HD2	1	21.08
(6,101)	1:42:A:HIS:H	1:168:A:ARG:HD2	5	21.07
(2,91)	1:42:A:HIS:H	1:168:A:ARG:HD2	5	21.07
(6,16)	1:2:A:ASP:HB2	1:158:A:SER:HB2	12	21.0
(2,16)	1:2:A:ASP:HB2	1:158:A:SER:HB2	12	21.0
(6,101)	1:42:A:HIS:H	1:168:A:ARG:HD2	3	20.98
(2,91)	1:42:A:HIS:H	1:168:A:ARG:HD2	3	20.98
(6,179)	1:77:A:LEU:HG	1:117:A:GLY:H	3	20.81
(2,158)	1:77:A:LEU:HG	1:117:A:GLY:H	3	20.81
(6,166)	1:70:A:GLU:H	1:121:A:ARG:HD3	10	20.67
(6,10)	1:1:A:MET:HE2	1:164:A:VAL:HG21	2	20.67
(2,145)	1:70:A:GLU:H	1:121:A:ARG:HD3	10	20.67
(6,179)	1:77:A:LEU:HG	1:117:A:GLY:H	2	20.64
(2,158)	1:77:A:LEU:HG	1:117:A:GLY:H	2	20.64
(6,166)	1:70:A:GLU:H	1:121:A:ARG:HD3	8	20.62
(2,145)	1:70:A:GLU:H	1:121:A:ARG:HD3	8	20.62
(6,179)	1:77:A:LEU:HG	1:117:A:GLY:H	4	20.6
(2,158)	1:77:A:LEU:HG	1:117:A:GLY:H	4	20.6
(6,166)	1:70:A:GLU:H	1:121:A:ARG:HD3	7	20.57
(2,145)	1:70:A:GLU:H	1:121:A:ARG:HD3	7	20.57
(6,10)	1:1:A:MET:HE2	1:164:A:VAL:HG22	3	20.56
(6,9)	1:1:A:MET:HE2	1:159:A:LEU:HD22	3	20.51
(6,95)	1:41:A:LYS:H	1:168:A:ARG:HG3	8	20.49
(2,85)	1:41:A:LYS:H	1:168:A:ARG:HG3	8	20.49
(6,95)	1:41:A:LYS:H	1:168:A:ARG:HG3	6	20.47
(6,10)	1:1:A:MET:HE2	1:164:A:VAL:HG22	5	20.47
(2,85)	1:41:A:LYS:H	1:168:A:ARG:HG3	6	20.47
(6,9)	1:1:A:MET:HE2	1:159:A:LEU:HD22	2	20.45
(6,95)	1:41:A:LYS:H	1:168:A:ARG:HG3	7	20.38
(2,85)	1:41:A:LYS:H	1:168:A:ARG:HG3	7	20.38
(6,179)	1:77:A:LEU:HG	1:117:A:GLY:H	13	20.36
(2,158)	1:77:A:LEU:HG	1:117:A:GLY:H	13	20.36
(6,166)	1:70:A:GLU:H	1:121:A:ARG:HD3	5	20.35
(2,145)	1:70:A:GLU:H	1:121:A:ARG:HD3	5	20.35
(6,9)	1:1:A:MET:HE2	1:159:A:LEU:HD22	5	20.34
(6,95)	1:41:A:LYS:H	1:168:A:ARG:HG3	10	20.32

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,85)	1:41:A:LYS:H	1:168:A:ARG:HG3	10	20.32
(6,95)	1:41:A:LYS:H	1:168:A:ARG:HG3	9	20.29
(2,85)	1:41:A:LYS:H	1:168:A:ARG:HG3	9	20.29
(6,10)	1:1:A:MET:HE2	1:164:A:VAL:HG22	1	20.28
(6,9)	1:1:A:MET:HE2	1:159:A:LEU:HD22	1	20.21
(6,179)	1:77:A:LEU:HG	1:117:A:GLY:H	15	20.13
(2,158)	1:77:A:LEU:HG	1:117:A:GLY:H	15	20.13
(6,166)	1:70:A:GLU:H	1:121:A:ARG:HD3	1	20.03
(2,145)	1:70:A:GLU:H	1:121:A:ARG:HD3	1	20.03
(6,95)	1:41:A:LYS:H	1:168:A:ARG:HG3	3	20.02
(2,85)	1:41:A:LYS:H	1:168:A:ARG:HG3	3	20.02
(6,95)	1:41:A:LYS:H	1:168:A:ARG:HG3	4	19.92
(2,85)	1:41:A:LYS:H	1:168:A:ARG:HG3	4	19.92
(6,95)	1:41:A:LYS:H	1:168:A:ARG:HG3	2	19.9
(2,85)	1:41:A:LYS:H	1:168:A:ARG:HG3	2	19.9
(6,166)	1:70:A:GLU:H	1:121:A:ARG:HD3	3	19.87
(2,145)	1:70:A:GLU:H	1:121:A:ARG:HD3	3	19.87
(6,166)	1:70:A:GLU:H	1:121:A:ARG:HD3	2	19.81
(2,145)	1:70:A:GLU:H	1:121:A:ARG:HD3	2	19.81
(6,95)	1:41:A:LYS:H	1:168:A:ARG:HG3	1	19.71
(2,85)	1:41:A:LYS:H	1:168:A:ARG:HG3	1	19.71
(5,9)	1:62:A:GLU:H	1:141:A:PRO:O	11	19.56
(4,9)	1:62:A:GLU:H	1:141:A:PRO:O	11	19.56
(6,95)	1:41:A:LYS:H	1:168:A:ARG:HG3	5	19.48
(5,9)	1:62:A:GLU:H	1:141:A:PRO:O	13	19.48
(4,9)	1:62:A:GLU:H	1:141:A:PRO:O	13	19.48
(2,85)	1:41:A:LYS:H	1:168:A:ARG:HG3	5	19.48
(5,9)	1:62:A:GLU:H	1:141:A:PRO:O	15	19.47
(4,9)	1:62:A:GLU:H	1:141:A:PRO:O	15	19.47
(6,8)	1:1:A:MET:HB3	1:158:A:SER:H	4	19.46
(5,9)	1:62:A:GLU:H	1:141:A:PRO:O	14	19.43
(4,9)	1:62:A:GLU:H	1:141:A:PRO:O	14	19.43
(6,166)	1:70:A:GLU:H	1:121:A:ARG:HD3	12	19.42
(2,145)	1:70:A:GLU:H	1:121:A:ARG:HD3	12	19.42
(5,23)	1:142:A:VAL:H	1:160:A:GLY:O	15	19.34
(4,23)	1:142:A:VAL:H	1:160:A:GLY:O	15	19.34
(6,166)	1:70:A:GLU:H	1:121:A:ARG:HD3	14	19.23
(2,145)	1:70:A:GLU:H	1:121:A:ARG:HD3	14	19.23
(5,23)	1:142:A:VAL:H	1:160:A:GLY:O	11	19.16
(5,23)	1:142:A:VAL:H	1:160:A:GLY:O	13	19.16
(4,23)	1:142:A:VAL:H	1:160:A:GLY:O	11	19.16
(4,23)	1:142:A:VAL:H	1:160:A:GLY:O	13	19.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(5,23)	1:142:A:VAL:H	1:160:A:GLY:O	14	19.15
(4,23)	1:142:A:VAL:H	1:160:A:GLY:O	14	19.15
(6,166)	1:70:A:GLU:H	1:121:A:ARG:HD3	13	19.12
(2,145)	1:70:A:GLU:H	1:121:A:ARG:HD3	13	19.12
(5,9)	1:62:A:GLU:H	1:141:A:PRO:O	12	19.11
(4,9)	1:62:A:GLU:H	1:141:A:PRO:O	12	19.11
(6,166)	1:70:A:GLU:H	1:121:A:ARG:HD3	11	19.05
(2,145)	1:70:A:GLU:H	1:121:A:ARG:HD3	11	19.05
(6,8)	1:1:A:MET:HG2	1:158:A:SER:H	9	19.04
(5,23)	1:142:A:VAL:H	1:160:A:GLY:O	12	19.0
(4,23)	1:142:A:VAL:H	1:160:A:GLY:O	12	19.0
(6,8)	1:1:A:MET:HG2	1:158:A:SER:H	7	18.99
(6,8)	1:1:A:MET:HG2	1:158:A:SER:H	10	18.97
(6,166)	1:70:A:GLU:H	1:121:A:ARG:HD3	4	18.93
(2,145)	1:70:A:GLU:H	1:121:A:ARG:HD3	4	18.93
(6,8)	1:1:A:MET:HG2	1:158:A:SER:H	6	18.91
(6,166)	1:70:A:GLU:H	1:121:A:ARG:HD3	15	18.9
(2,145)	1:70:A:GLU:H	1:121:A:ARG:HD3	15	18.9
(6,8)	1:1:A:MET:HG2	1:158:A:SER:H	8	18.87
(6,166)	1:70:A:GLU:H	1:121:A:ARG:HD3	9	18.79
(2,145)	1:70:A:GLU:H	1:121:A:ARG:HD3	9	18.79
(6,166)	1:70:A:GLU:H	1:121:A:ARG:HD3	6	18.77
(2,145)	1:70:A:GLU:H	1:121:A:ARG:HD3	6	18.77
(5,23)	1:142:A:VAL:H	1:160:A:GLY:O	4	18.72
(4,23)	1:142:A:VAL:H	1:160:A:GLY:O	4	18.72
(5,23)	1:142:A:VAL:H	1:160:A:GLY:O	9	18.62
(4,23)	1:142:A:VAL:H	1:160:A:GLY:O	9	18.62
(5,23)	1:142:A:VAL:H	1:160:A:GLY:O	6	18.61
(4,23)	1:142:A:VAL:H	1:160:A:GLY:O	6	18.61
(5,23)	1:142:A:VAL:H	1:160:A:GLY:O	7	18.57
(4,23)	1:142:A:VAL:H	1:160:A:GLY:O	7	18.57
(5,23)	1:142:A:VAL:H	1:160:A:GLY:O	10	18.47
(4,23)	1:142:A:VAL:H	1:160:A:GLY:O	10	18.47
(6,88)	1:40:A:ARG:H	1:168:A:ARG:HD2	8	18.35
(2,79)	1:40:A:ARG:H	1:168:A:ARG:HD2	8	18.35
(5,23)	1:142:A:VAL:H	1:160:A:GLY:O	8	18.33
(4,23)	1:142:A:VAL:H	1:160:A:GLY:O	8	18.33
(5,23)	1:142:A:VAL:H	1:160:A:GLY:O	1	18.3
(4,23)	1:142:A:VAL:H	1:160:A:GLY:O	1	18.3
(6,88)	1:40:A:ARG:H	1:168:A:ARG:HD2	6	18.28
(2,79)	1:40:A:ARG:H	1:168:A:ARG:HD2	6	18.28
(5,23)	1:142:A:VAL:H	1:160:A:GLY:O	3	18.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,23)	1:142:A:VAL:H	1:160:A:GLY:O	3	18.24
(6,88)	1:40:A:ARG:H	1:168:A:ARG:HD2	7	18.23
(2,79)	1:40:A:ARG:H	1:168:A:ARG:HD2	7	18.23
(5,23)	1:142:A:VAL:H	1:160:A:GLY:O	5	18.22
(4,23)	1:142:A:VAL:H	1:160:A:GLY:O	5	18.22
(5,23)	1:142:A:VAL:H	1:160:A:GLY:O	2	18.15
(4,23)	1:142:A:VAL:H	1:160:A:GLY:O	2	18.15
(6,88)	1:40:A:ARG:H	1:168:A:ARG:HD2	9	18.13
(2,79)	1:40:A:ARG:H	1:168:A:ARG:HD2	9	18.13
(6,88)	1:40:A:ARG:H	1:168:A:ARG:HD2	4	18.09
(6,88)	1:40:A:ARG:H	1:168:A:ARG:HD2	10	18.09
(2,79)	1:40:A:ARG:H	1:168:A:ARG:HD2	4	18.09
(2,79)	1:40:A:ARG:H	1:168:A:ARG:HD2	10	18.09
(6,88)	1:40:A:ARG:H	1:168:A:ARG:HD2	1	17.95
(2,79)	1:40:A:ARG:H	1:168:A:ARG:HD2	1	17.95
(6,88)	1:40:A:ARG:H	1:168:A:ARG:HD2	5	17.94
(2,79)	1:40:A:ARG:H	1:168:A:ARG:HD2	5	17.94
(5,10)	1:62:A:GLU:N	1:141:A:PRO:O	11	17.92
(4,10)	1:62:A:GLU:N	1:141:A:PRO:O	11	17.92
(6,88)	1:40:A:ARG:H	1:168:A:ARG:HD2	2	17.91
(2,79)	1:40:A:ARG:H	1:168:A:ARG:HD2	2	17.91
(5,10)	1:62:A:GLU:N	1:141:A:PRO:O	13	17.82
(4,10)	1:62:A:GLU:N	1:141:A:PRO:O	13	17.82
(5,10)	1:62:A:GLU:N	1:141:A:PRO:O	15	17.81
(4,10)	1:62:A:GLU:N	1:141:A:PRO:O	15	17.81
(5,10)	1:62:A:GLU:N	1:141:A:PRO:O	14	17.8
(4,10)	1:62:A:GLU:N	1:141:A:PRO:O	14	17.8
(6,88)	1:40:A:ARG:H	1:168:A:ARG:HD2	3	17.75
(2,79)	1:40:A:ARG:H	1:168:A:ARG:HD2	3	17.75
(5,24)	1:142:A:VAL:N	1:160:A:GLY:O	15	17.55
(4,24)	1:142:A:VAL:N	1:160:A:GLY:O	15	17.55
(5,24)	1:142:A:VAL:N	1:160:A:GLY:O	4	17.47
(4,24)	1:142:A:VAL:N	1:160:A:GLY:O	4	17.47
(5,24)	1:142:A:VAL:N	1:160:A:GLY:O	9	17.44
(5,10)	1:62:A:GLU:N	1:141:A:PRO:O	12	17.44
(4,24)	1:142:A:VAL:N	1:160:A:GLY:O	9	17.44
(4,10)	1:62:A:GLU:N	1:141:A:PRO:O	12	17.44
(5,24)	1:142:A:VAL:N	1:160:A:GLY:O	6	17.43
(4,24)	1:142:A:VAL:N	1:160:A:GLY:O	6	17.43
(5,24)	1:142:A:VAL:N	1:160:A:GLY:O	11	17.42
(5,24)	1:142:A:VAL:N	1:160:A:GLY:O	13	17.42
(4,24)	1:142:A:VAL:N	1:160:A:GLY:O	11	17.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,24)	1:142:A:VAL:N	1:160:A:GLY:O	13	17.42
(5,24)	1:142:A:VAL:N	1:160:A:GLY:O	7	17.4
(4,24)	1:142:A:VAL:N	1:160:A:GLY:O	7	17.4
(5,24)	1:142:A:VAL:N	1:160:A:GLY:O	14	17.38
(4,24)	1:142:A:VAL:N	1:160:A:GLY:O	14	17.38
(6,8)	1:1:A:MET:HE2	1:158:A:SER:H	2	17.34
(5,24)	1:142:A:VAL:N	1:160:A:GLY:O	10	17.33
(4,24)	1:142:A:VAL:N	1:160:A:GLY:O	10	17.33
(6,8)	1:1:A:MET:HE2	1:158:A:SER:H	3	17.32
(6,8)	1:1:A:MET:HE2	1:158:A:SER:H	5	17.24
(5,24)	1:142:A:VAL:N	1:160:A:GLY:O	12	17.21
(4,24)	1:142:A:VAL:N	1:160:A:GLY:O	12	17.21
(5,24)	1:142:A:VAL:N	1:160:A:GLY:O	8	17.2
(4,24)	1:142:A:VAL:N	1:160:A:GLY:O	8	17.2
(5,24)	1:142:A:VAL:N	1:160:A:GLY:O	1	17.14
(4,24)	1:142:A:VAL:N	1:160:A:GLY:O	1	17.14
(5,24)	1:142:A:VAL:N	1:160:A:GLY:O	3	17.07
(5,24)	1:142:A:VAL:N	1:160:A:GLY:O	5	17.07
(4,24)	1:142:A:VAL:N	1:160:A:GLY:O	3	17.07
(4,24)	1:142:A:VAL:N	1:160:A:GLY:O	5	17.07
(6,8)	1:1:A:MET:HE2	1:158:A:SER:H	1	17.06
(6,16)	1:2:A:ASP:HB2	1:158:A:SER:HB2	3	17.02
(6,16)	1:2:A:ASP:HB2	1:158:A:SER:HB2	4	17.02
(2,16)	1:2:A:ASP:HB2	1:158:A:SER:HB2	3	17.02
(2,16)	1:2:A:ASP:HB2	1:158:A:SER:HB2	4	17.02
(5,24)	1:142:A:VAL:N	1:160:A:GLY:O	2	17.0
(4,24)	1:142:A:VAL:N	1:160:A:GLY:O	2	17.0
(6,16)	1:2:A:ASP:HB2	1:158:A:SER:HB2	2	16.91
(2,16)	1:2:A:ASP:HB2	1:158:A:SER:HB2	2	16.91
(6,16)	1:2:A:ASP:HB2	1:158:A:SER:HB2	1	16.88
(2,16)	1:2:A:ASP:HB2	1:158:A:SER:HB2	1	16.88
(6,16)	1:2:A:ASP:HB2	1:158:A:SER:HB2	7	16.83
(2,16)	1:2:A:ASP:HB2	1:158:A:SER:HB2	7	16.83
(6,16)	1:2:A:ASP:HB2	1:158:A:SER:HB2	8	16.8
(2,16)	1:2:A:ASP:HB2	1:158:A:SER:HB2	8	16.8
(6,16)	1:2:A:ASP:HB2	1:158:A:SER:HB2	10	16.62
(2,16)	1:2:A:ASP:HB2	1:158:A:SER:HB2	10	16.62
(6,16)	1:2:A:ASP:HB2	1:158:A:SER:HB2	9	16.55
(2,16)	1:2:A:ASP:HB2	1:158:A:SER:HB2	9	16.55
(6,180)	1:77:A:LEU:HD21	1:118:A:ARG:H	3	16.51
(6,180)	1:77:A:LEU:HD22	1:118:A:ARG:H	3	16.51
(6,180)	1:77:A:LEU:HD23	1:118:A:ARG:H	3	16.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,159)	1:77:A:LEU:HD21	1:118:A:ARG:H	3	16.51
(2,159)	1:77:A:LEU:HD22	1:118:A:ARG:H	3	16.51
(2,159)	1:77:A:LEU:HD23	1:118:A:ARG:H	3	16.51
(6,16)	1:2:A:ASP:HB2	1:158:A:SER:HB2	6	16.45
(2,16)	1:2:A:ASP:HB2	1:158:A:SER:HB2	6	16.45
(6,180)	1:77:A:LEU:HD21	1:118:A:ARG:H	2	16.41
(6,180)	1:77:A:LEU:HD22	1:118:A:ARG:H	2	16.41
(6,180)	1:77:A:LEU:HD23	1:118:A:ARG:H	2	16.41
(2,159)	1:77:A:LEU:HD21	1:118:A:ARG:H	2	16.41
(2,159)	1:77:A:LEU:HD22	1:118:A:ARG:H	2	16.41
(2,159)	1:77:A:LEU:HD23	1:118:A:ARG:H	2	16.41
(6,180)	1:77:A:LEU:HD21	1:118:A:ARG:H	4	16.33
(6,180)	1:77:A:LEU:HD22	1:118:A:ARG:H	4	16.33
(6,180)	1:77:A:LEU:HD23	1:118:A:ARG:H	4	16.33
(2,159)	1:77:A:LEU:HD21	1:118:A:ARG:H	4	16.33
(2,159)	1:77:A:LEU:HD22	1:118:A:ARG:H	4	16.33
(2,159)	1:77:A:LEU:HD23	1:118:A:ARG:H	4	16.33
(6,180)	1:77:A:LEU:HD21	1:118:A:ARG:H	13	16.3
(6,180)	1:77:A:LEU:HD22	1:118:A:ARG:H	13	16.3
(6,180)	1:77:A:LEU:HD23	1:118:A:ARG:H	13	16.3
(2,159)	1:77:A:LEU:HD21	1:118:A:ARG:H	13	16.3
(2,159)	1:77:A:LEU:HD22	1:118:A:ARG:H	13	16.3
(2,159)	1:77:A:LEU:HD23	1:118:A:ARG:H	13	16.3
(6,180)	1:77:A:LEU:HD21	1:118:A:ARG:H	15	16.21
(6,180)	1:77:A:LEU:HD22	1:118:A:ARG:H	15	16.21
(6,180)	1:77:A:LEU:HD23	1:118:A:ARG:H	15	16.21
(2,159)	1:77:A:LEU:HD21	1:118:A:ARG:H	15	16.21
(2,159)	1:77:A:LEU:HD22	1:118:A:ARG:H	15	16.21
(2,159)	1:77:A:LEU:HD23	1:118:A:ARG:H	15	16.21
(6,181)	1:77:A:LEU:HD21	1:121:A:ARG:HG2	13	16.03
(6,181)	1:77:A:LEU:HD22	1:121:A:ARG:HG2	13	16.03
(6,181)	1:77:A:LEU:HD23	1:121:A:ARG:HG2	13	16.03
(2,160)	1:77:A:LEU:HD21	1:121:A:ARG:HG2	13	16.03
(2,160)	1:77:A:LEU:HD22	1:121:A:ARG:HG2	13	16.03
(2,160)	1:77:A:LEU:HD23	1:121:A:ARG:HG2	13	16.03
(6,181)	1:77:A:LEU:HD21	1:121:A:ARG:HG2	3	15.86
(6,181)	1:77:A:LEU:HD22	1:121:A:ARG:HG2	3	15.86
(6,181)	1:77:A:LEU:HD23	1:121:A:ARG:HG2	3	15.86
(2,160)	1:77:A:LEU:HD21	1:121:A:ARG:HG2	3	15.86
(2,160)	1:77:A:LEU:HD22	1:121:A:ARG:HG2	3	15.86
(2,160)	1:77:A:LEU:HD23	1:121:A:ARG:HG2	3	15.86
(5,19)	1:90:A:ALA:H	1:67:A:ARG:O	12	15.85

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,19)	1:90:A:ALA:H	1:67:A:ARG:O	12	15.85
(6,181)	1:77:A:LEU:HD21	1:121:A:ARG:HG2	2	15.81
(6,181)	1:77:A:LEU:HD22	1:121:A:ARG:HG2	2	15.81
(6,181)	1:77:A:LEU:HD23	1:121:A:ARG:HG2	2	15.81
(2,160)	1:77:A:LEU:HD21	1:121:A:ARG:HG2	2	15.81
(2,160)	1:77:A:LEU:HD22	1:121:A:ARG:HG2	2	15.81
(2,160)	1:77:A:LEU:HD23	1:121:A:ARG:HG2	2	15.81
(6,7)	1:1:A:MET:HE1	1:153:A:ARG:H	12	15.8
(5,15)	1:82:A:ASP:H	1:138:A:GLU:O	13	15.8
(4,15)	1:82:A:ASP:H	1:138:A:GLU:O	13	15.8
(6,181)	1:77:A:LEU:HD21	1:121:A:ARG:HG2	15	15.78
(6,181)	1:77:A:LEU:HD22	1:121:A:ARG:HG2	15	15.78
(6,181)	1:77:A:LEU:HD23	1:121:A:ARG:HG2	15	15.78
(6,16)	1:2:A:ASP:HB2	1:158:A:SER:HB2	5	15.78
(6,7)	1:1:A:MET:HE1	1:153:A:ARG:H	14	15.78
(2,160)	1:77:A:LEU:HD21	1:121:A:ARG:HG2	15	15.78
(2,160)	1:77:A:LEU:HD22	1:121:A:ARG:HG2	15	15.78
(2,160)	1:77:A:LEU:HD23	1:121:A:ARG:HG2	15	15.78
(2,16)	1:2:A:ASP:HB2	1:158:A:SER:HB2	5	15.78
(6,181)	1:77:A:LEU:HD21	1:121:A:ARG:HG2	4	15.73
(6,181)	1:77:A:LEU:HD22	1:121:A:ARG:HG2	4	15.73
(6,181)	1:77:A:LEU:HD23	1:121:A:ARG:HG2	4	15.73
(2,160)	1:77:A:LEU:HD21	1:121:A:ARG:HG2	4	15.73
(2,160)	1:77:A:LEU:HD22	1:121:A:ARG:HG2	4	15.73
(2,160)	1:77:A:LEU:HD23	1:121:A:ARG:HG2	4	15.73
(5,19)	1:90:A:ALA:H	1:67:A:ARG:O	9	15.67
(4,19)	1:90:A:ALA:H	1:67:A:ARG:O	9	15.67
(6,7)	1:1:A:MET:HG2	1:153:A:ARG:H	9	15.64
(5,19)	1:90:A:ALA:H	1:67:A:ARG:O	13	15.64
(4,19)	1:90:A:ALA:H	1:67:A:ARG:O	13	15.64
(6,7)	1:1:A:MET:HG2	1:153:A:ARG:H	7	15.62
(5,19)	1:90:A:ALA:H	1:67:A:ARG:O	15	15.61
(5,15)	1:82:A:ASP:H	1:138:A:GLU:O	15	15.61
(4,19)	1:90:A:ALA:H	1:67:A:ARG:O	15	15.61
(4,15)	1:82:A:ASP:H	1:138:A:GLU:O	15	15.61
(5,19)	1:90:A:ALA:H	1:67:A:ARG:O	7	15.59
(4,19)	1:90:A:ALA:H	1:67:A:ARG:O	7	15.59
(5,19)	1:90:A:ALA:H	1:67:A:ARG:O	8	15.58
(5,19)	1:90:A:ALA:H	1:67:A:ARG:O	10	15.58
(4,19)	1:90:A:ALA:H	1:67:A:ARG:O	8	15.58
(4,19)	1:90:A:ALA:H	1:67:A:ARG:O	10	15.58
(6,88)	1:40:A:ARG:H	1:168:A:ARG:HD2	13	15.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(5,19)	1:90:A:ALA:H	1:67:A:ARG:O	6	15.57
(4,19)	1:90:A:ALA:H	1:67:A:ARG:O	6	15.57
(2,79)	1:40:A:ARG:H	1:168:A:ARG:HD2	13	15.57
(6,88)	1:40:A:ARG:H	1:168:A:ARG:HD2	15	15.54
(2,79)	1:40:A:ARG:H	1:168:A:ARG:HD2	15	15.54
(6,88)	1:40:A:ARG:H	1:168:A:ARG:HD2	11	15.53
(2,79)	1:40:A:ARG:H	1:168:A:ARG:HD2	11	15.53
(6,7)	1:1:A:MET:HG2	1:153:A:ARG:H	8	15.52
(6,7)	1:1:A:MET:HG2	1:153:A:ARG:H	10	15.52
(5,19)	1:90:A:ALA:H	1:67:A:ARG:O	11	15.52
(4,19)	1:90:A:ALA:H	1:67:A:ARG:O	11	15.52
(6,88)	1:40:A:ARG:H	1:168:A:ARG:HD2	12	15.51
(2,79)	1:40:A:ARG:H	1:168:A:ARG:HD2	12	15.51
(5,19)	1:90:A:ALA:H	1:67:A:ARG:O	3	15.5
(4,19)	1:90:A:ALA:H	1:67:A:ARG:O	3	15.5
(5,19)	1:90:A:ALA:H	1:67:A:ARG:O	4	15.49
(5,19)	1:90:A:ALA:H	1:67:A:ARG:O	14	15.49
(4,19)	1:90:A:ALA:H	1:67:A:ARG:O	4	15.49
(4,19)	1:90:A:ALA:H	1:67:A:ARG:O	14	15.49
(6,7)	1:1:A:MET:HG2	1:153:A:ARG:H	6	15.48
(6,7)	1:1:A:MET:HE1	1:153:A:ARG:H	15	15.46
(6,7)	1:1:A:MET:HE1	1:153:A:ARG:H	4	15.44
(5,19)	1:90:A:ALA:H	1:67:A:ARG:O	5	15.44
(5,15)	1:82:A:ASP:H	1:138:A:GLU:O	14	15.44
(4,19)	1:90:A:ALA:H	1:67:A:ARG:O	5	15.44
(4,15)	1:82:A:ASP:H	1:138:A:GLU:O	14	15.44
(5,19)	1:90:A:ALA:H	1:67:A:ARG:O	2	15.4
(4,19)	1:90:A:ALA:H	1:67:A:ARG:O	2	15.4
(6,88)	1:40:A:ARG:H	1:168:A:ARG:HD2	14	15.39
(2,79)	1:40:A:ARG:H	1:168:A:ARG:HD2	14	15.39
(5,19)	1:90:A:ALA:H	1:67:A:ARG:O	1	15.35
(4,19)	1:90:A:ALA:H	1:67:A:ARG:O	1	15.35
(5,15)	1:82:A:ASP:H	1:138:A:GLU:O	12	15.29
(4,15)	1:82:A:ASP:H	1:138:A:GLU:O	12	15.29
(5,15)	1:82:A:ASP:H	1:138:A:GLU:O	11	15.23
(4,15)	1:82:A:ASP:H	1:138:A:GLU:O	11	15.23
(6,7)	1:1:A:MET:HE1	1:153:A:ARG:H	13	15.1
(5,20)	1:90:A:ALA:N	1:67:A:ARG:O	12	15.06
(4,20)	1:90:A:ALA:N	1:67:A:ARG:O	12	15.06
(6,7)	1:1:A:MET:HE1	1:153:A:ARG:H	11	15.02
(6,180)	1:77:A:LEU:HD21	1:118:A:ARG:H	11	15.01
(6,180)	1:77:A:LEU:HD22	1:118:A:ARG:H	11	15.01

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(6,180)	1:77:A:LEU:HD23	1:118:A:ARG:H	11	15.01
(2,159)	1:77:A:LEU:HD21	1:118:A:ARG:H	11	15.01
(2,159)	1:77:A:LEU:HD22	1:118:A:ARG:H	11	15.01
(2,159)	1:77:A:LEU:HD23	1:118:A:ARG:H	11	15.01
(5,20)	1:90:A:ALA:N	1:67:A:ARG:O	9	14.95
(4,20)	1:90:A:ALA:N	1:67:A:ARG:O	9	14.95
(5,20)	1:90:A:ALA:N	1:67:A:ARG:O	7	14.88
(4,20)	1:90:A:ALA:N	1:67:A:ARG:O	7	14.88
(5,20)	1:90:A:ALA:N	1:67:A:ARG:O	8	14.87
(4,20)	1:90:A:ALA:N	1:67:A:ARG:O	8	14.87
(5,20)	1:90:A:ALA:N	1:67:A:ARG:O	6	14.86
(5,20)	1:90:A:ALA:N	1:67:A:ARG:O	10	14.86
(4,20)	1:90:A:ALA:N	1:67:A:ARG:O	6	14.86
(4,20)	1:90:A:ALA:N	1:67:A:ARG:O	10	14.86
(5,20)	1:90:A:ALA:N	1:67:A:ARG:O	3	14.84
(4,20)	1:90:A:ALA:N	1:67:A:ARG:O	3	14.84
(5,20)	1:90:A:ALA:N	1:67:A:ARG:O	13	14.82
(5,20)	1:90:A:ALA:N	1:67:A:ARG:O	15	14.82
(4,20)	1:90:A:ALA:N	1:67:A:ARG:O	13	14.82
(4,20)	1:90:A:ALA:N	1:67:A:ARG:O	15	14.82
(6,180)	1:77:A:LEU:HD21	1:118:A:ARG:H	6	14.79
(6,180)	1:77:A:LEU:HD22	1:118:A:ARG:H	6	14.79
(6,180)	1:77:A:LEU:HD23	1:118:A:ARG:H	6	14.79
(5,20)	1:90:A:ALA:N	1:67:A:ARG:O	4	14.79
(4,20)	1:90:A:ALA:N	1:67:A:ARG:O	4	14.79
(2,159)	1:77:A:LEU:HD21	1:118:A:ARG:H	6	14.79
(2,159)	1:77:A:LEU:HD22	1:118:A:ARG:H	6	14.79
(2,159)	1:77:A:LEU:HD23	1:118:A:ARG:H	6	14.79
(6,180)	1:77:A:LEU:HD21	1:118:A:ARG:H	5	14.78
(6,180)	1:77:A:LEU:HD22	1:118:A:ARG:H	5	14.78
(6,180)	1:77:A:LEU:HD23	1:118:A:ARG:H	5	14.78
(2,159)	1:77:A:LEU:HD21	1:118:A:ARG:H	5	14.78
(2,159)	1:77:A:LEU:HD22	1:118:A:ARG:H	5	14.78
(2,159)	1:77:A:LEU:HD23	1:118:A:ARG:H	5	14.78
(6,180)	1:77:A:LEU:HD21	1:118:A:ARG:H	1	14.74
(6,180)	1:77:A:LEU:HD22	1:118:A:ARG:H	1	14.74
(6,180)	1:77:A:LEU:HD23	1:118:A:ARG:H	1	14.74
(5,20)	1:90:A:ALA:N	1:67:A:ARG:O	11	14.74
(4,20)	1:90:A:ALA:N	1:67:A:ARG:O	11	14.74
(2,159)	1:77:A:LEU:HD21	1:118:A:ARG:H	1	14.74
(2,159)	1:77:A:LEU:HD22	1:118:A:ARG:H	1	14.74
(2,159)	1:77:A:LEU:HD23	1:118:A:ARG:H	1	14.74

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(5,20)	1:90:A:ALA:N	1:67:A:ARG:O	14	14.73
(4,20)	1:90:A:ALA:N	1:67:A:ARG:O	14	14.73
(6,180)	1:77:A:LEU:HD21	1:118:A:ARG:H	10	14.71
(6,180)	1:77:A:LEU:HD22	1:118:A:ARG:H	10	14.71
(6,180)	1:77:A:LEU:HD23	1:118:A:ARG:H	10	14.71
(2,159)	1:77:A:LEU:HD21	1:118:A:ARG:H	10	14.71
(2,159)	1:77:A:LEU:HD22	1:118:A:ARG:H	10	14.71
(2,159)	1:77:A:LEU:HD23	1:118:A:ARG:H	10	14.71
(5,20)	1:90:A:ALA:N	1:67:A:ARG:O	2	14.7
(4,20)	1:90:A:ALA:N	1:67:A:ARG:O	2	14.7
(5,20)	1:90:A:ALA:N	1:67:A:ARG:O	1	14.69
(5,20)	1:90:A:ALA:N	1:67:A:ARG:O	5	14.69
(4,20)	1:90:A:ALA:N	1:67:A:ARG:O	1	14.69
(4,20)	1:90:A:ALA:N	1:67:A:ARG:O	5	14.69
(6,180)	1:77:A:LEU:HD21	1:118:A:ARG:H	7	14.65
(6,180)	1:77:A:LEU:HD22	1:118:A:ARG:H	7	14.65
(6,180)	1:77:A:LEU:HD23	1:118:A:ARG:H	7	14.65
(6,180)	1:77:A:LEU:HD21	1:118:A:ARG:H	9	14.65
(6,180)	1:77:A:LEU:HD22	1:118:A:ARG:H	9	14.65
(6,180)	1:77:A:LEU:HD23	1:118:A:ARG:H	9	14.65
(6,8)	1:1:A:MET:HE1	1:158:A:SER:H	15	14.65
(2,159)	1:77:A:LEU:HD21	1:118:A:ARG:H	7	14.65
(2,159)	1:77:A:LEU:HD22	1:118:A:ARG:H	7	14.65
(2,159)	1:77:A:LEU:HD23	1:118:A:ARG:H	7	14.65
(2,159)	1:77:A:LEU:HD21	1:118:A:ARG:H	9	14.65
(2,159)	1:77:A:LEU:HD22	1:118:A:ARG:H	9	14.65
(2,159)	1:77:A:LEU:HD23	1:118:A:ARG:H	9	14.65
(6,180)	1:77:A:LEU:HD21	1:118:A:ARG:H	8	14.64
(6,180)	1:77:A:LEU:HD22	1:118:A:ARG:H	8	14.64
(6,180)	1:77:A:LEU:HD23	1:118:A:ARG:H	8	14.64
(2,159)	1:77:A:LEU:HD21	1:118:A:ARG:H	8	14.64
(2,159)	1:77:A:LEU:HD22	1:118:A:ARG:H	8	14.64
(2,159)	1:77:A:LEU:HD23	1:118:A:ARG:H	8	14.64
(6,180)	1:77:A:LEU:HD21	1:118:A:ARG:H	14	14.54
(6,180)	1:77:A:LEU:HD22	1:118:A:ARG:H	14	14.54
(6,180)	1:77:A:LEU:HD23	1:118:A:ARG:H	14	14.54
(2,159)	1:77:A:LEU:HD21	1:118:A:ARG:H	14	14.54
(2,159)	1:77:A:LEU:HD22	1:118:A:ARG:H	14	14.54
(2,159)	1:77:A:LEU:HD23	1:118:A:ARG:H	14	14.54
(6,180)	1:77:A:LEU:HD21	1:118:A:ARG:H	12	14.43
(6,180)	1:77:A:LEU:HD22	1:118:A:ARG:H	12	14.43
(6,180)	1:77:A:LEU:HD23	1:118:A:ARG:H	12	14.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,159)	1:77:A:LEU:HD21	1:118:A:ARG:H	12	14.43
(2,159)	1:77:A:LEU:HD22	1:118:A:ARG:H	12	14.43
(2,159)	1:77:A:LEU:HD23	1:118:A:ARG:H	12	14.43
(5,13)	1:76:A:PHE:H	1:65:A:GLY:O	1	14.39
(5,13)	1:76:A:PHE:H	1:65:A:GLY:O	2	14.39
(4,13)	1:76:A:PHE:H	1:65:A:GLY:O	1	14.39
(4,13)	1:76:A:PHE:H	1:65:A:GLY:O	2	14.39
(5,13)	1:76:A:PHE:H	1:65:A:GLY:O	4	14.3
(4,13)	1:76:A:PHE:H	1:65:A:GLY:O	4	14.3
(5,13)	1:76:A:PHE:H	1:65:A:GLY:O	3	14.25
(4,13)	1:76:A:PHE:H	1:65:A:GLY:O	3	14.25
(5,13)	1:76:A:PHE:H	1:65:A:GLY:O	10	14.16
(4,13)	1:76:A:PHE:H	1:65:A:GLY:O	10	14.16
(5,13)	1:76:A:PHE:H	1:65:A:GLY:O	9	14.15
(4,13)	1:76:A:PHE:H	1:65:A:GLY:O	9	14.15
(5,13)	1:76:A:PHE:H	1:65:A:GLY:O	8	14.13
(4,13)	1:76:A:PHE:H	1:65:A:GLY:O	8	14.13
(5,13)	1:76:A:PHE:H	1:65:A:GLY:O	5	14.11
(4,13)	1:76:A:PHE:H	1:65:A:GLY:O	5	14.11
(5,13)	1:76:A:PHE:H	1:65:A:GLY:O	6	14.1
(5,13)	1:76:A:PHE:H	1:65:A:GLY:O	7	14.1
(4,13)	1:76:A:PHE:H	1:65:A:GLY:O	6	14.1
(4,13)	1:76:A:PHE:H	1:65:A:GLY:O	7	14.1
(6,8)	1:1:A:MET:HE1	1:158:A:SER:H	13	14.02
(6,8)	1:1:A:MET:HE1	1:158:A:SER:H	14	13.99
(6,8)	1:1:A:MET:HE1	1:158:A:SER:H	12	13.94
(5,16)	1:82:A:ASP:N	1:138:A:GLU:O	13	13.91
(4,16)	1:82:A:ASP:N	1:138:A:GLU:O	13	13.91
(6,8)	1:1:A:MET:HE1	1:158:A:SER:H	11	13.73
(5,16)	1:82:A:ASP:N	1:138:A:GLU:O	15	13.72
(4,16)	1:82:A:ASP:N	1:138:A:GLU:O	15	13.72
(6,181)	1:77:A:LEU:HD21	1:121:A:ARG:HG2	5	13.56
(6,181)	1:77:A:LEU:HD22	1:121:A:ARG:HG2	5	13.56
(6,181)	1:77:A:LEU:HD23	1:121:A:ARG:HG2	5	13.56
(2,160)	1:77:A:LEU:HD21	1:121:A:ARG:HG2	5	13.56
(2,160)	1:77:A:LEU:HD22	1:121:A:ARG:HG2	5	13.56
(2,160)	1:77:A:LEU:HD23	1:121:A:ARG:HG2	5	13.56
(5,16)	1:82:A:ASP:N	1:138:A:GLU:O	14	13.55
(4,16)	1:82:A:ASP:N	1:138:A:GLU:O	14	13.55
(5,11)	1:75:A:GLY:H	1:58:A:GLU:O	2	13.52
(4,11)	1:75:A:GLY:H	1:58:A:GLU:O	2	13.52
(5,14)	1:76:A:PHE:N	1:65:A:GLY:O	1	13.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,14)	1:76:A:PHE:N	1:65:A:GLY:O	1	13.44
(5,14)	1:76:A:PHE:N	1:65:A:GLY:O	2	13.42
(4,14)	1:76:A:PHE:N	1:65:A:GLY:O	2	13.42
(5,16)	1:82:A:ASP:N	1:138:A:GLU:O	12	13.41
(4,16)	1:82:A:ASP:N	1:138:A:GLU:O	12	13.41
(6,181)	1:77:A:LEU:HD21	1:121:A:ARG:HG2	11	13.39
(6,181)	1:77:A:LEU:HD22	1:121:A:ARG:HG2	11	13.39
(6,181)	1:77:A:LEU:HD23	1:121:A:ARG:HG2	11	13.39
(2,160)	1:77:A:LEU:HD21	1:121:A:ARG:HG2	11	13.39
(2,160)	1:77:A:LEU:HD22	1:121:A:ARG:HG2	11	13.39
(2,160)	1:77:A:LEU:HD23	1:121:A:ARG:HG2	11	13.39
(5,11)	1:75:A:GLY:H	1:58:A:GLU:O	1	13.38
(5,11)	1:75:A:GLY:H	1:58:A:GLU:O	4	13.38
(4,11)	1:75:A:GLY:H	1:58:A:GLU:O	1	13.38
(4,11)	1:75:A:GLY:H	1:58:A:GLU:O	4	13.38
(6,181)	1:77:A:LEU:HD21	1:121:A:ARG:HG2	7	13.36
(6,181)	1:77:A:LEU:HD22	1:121:A:ARG:HG2	7	13.36
(6,181)	1:77:A:LEU:HD23	1:121:A:ARG:HG2	7	13.36
(2,160)	1:77:A:LEU:HD21	1:121:A:ARG:HG2	7	13.36
(2,160)	1:77:A:LEU:HD22	1:121:A:ARG:HG2	7	13.36
(2,160)	1:77:A:LEU:HD23	1:121:A:ARG:HG2	7	13.36
(5,14)	1:76:A:PHE:N	1:65:A:GLY:O	3	13.33
(5,1)	1:13:A:LEU:H	1:32:A:ASP:O	14	13.33
(4,14)	1:76:A:PHE:N	1:65:A:GLY:O	3	13.33
(4,1)	1:13:A:LEU:H	1:32:A:ASP:O	14	13.33
(6,181)	1:77:A:LEU:HD21	1:121:A:ARG:HG2	6	13.32
(6,181)	1:77:A:LEU:HD22	1:121:A:ARG:HG2	6	13.32
(6,181)	1:77:A:LEU:HD23	1:121:A:ARG:HG2	6	13.32
(5,13)	1:76:A:PHE:H	1:65:A:GLY:O	11	13.32
(4,13)	1:76:A:PHE:H	1:65:A:GLY:O	11	13.32
(2,160)	1:77:A:LEU:HD21	1:121:A:ARG:HG2	6	13.32
(2,160)	1:77:A:LEU:HD22	1:121:A:ARG:HG2	6	13.32
(2,160)	1:77:A:LEU:HD23	1:121:A:ARG:HG2	6	13.32
(6,181)	1:77:A:LEU:HD21	1:121:A:ARG:HG2	10	13.31
(6,181)	1:77:A:LEU:HD22	1:121:A:ARG:HG2	10	13.31
(6,181)	1:77:A:LEU:HD23	1:121:A:ARG:HG2	10	13.31
(5,14)	1:76:A:PHE:N	1:65:A:GLY:O	4	13.31
(5,13)	1:76:A:PHE:H	1:65:A:GLY:O	14	13.31
(4,14)	1:76:A:PHE:N	1:65:A:GLY:O	4	13.31
(4,13)	1:76:A:PHE:H	1:65:A:GLY:O	14	13.31
(2,160)	1:77:A:LEU:HD21	1:121:A:ARG:HG2	10	13.31
(2,160)	1:77:A:LEU:HD22	1:121:A:ARG:HG2	10	13.31

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,160)	1:77:A:LEU:HD23	1:121:A:ARG:HG2	10	13.31
(5,16)	1:82:A:ASP:N	1:138:A:GLU:O	11	13.3
(4,16)	1:82:A:ASP:N	1:138:A:GLU:O	11	13.3
(5,13)	1:76:A:PHE:H	1:65:A:GLY:O	15	13.29
(5,1)	1:13:A:LEU:H	1:32:A:ASP:O	7	13.29
(5,1)	1:13:A:LEU:H	1:32:A:ASP:O	9	13.29
(4,13)	1:76:A:PHE:H	1:65:A:GLY:O	15	13.29
(4,1)	1:13:A:LEU:H	1:32:A:ASP:O	7	13.29
(4,1)	1:13:A:LEU:H	1:32:A:ASP:O	9	13.29
(5,11)	1:75:A:GLY:H	1:58:A:GLU:O	5	13.28
(4,11)	1:75:A:GLY:H	1:58:A:GLU:O	5	13.28
(5,1)	1:13:A:LEU:H	1:32:A:ASP:O	6	13.27
(4,1)	1:13:A:LEU:H	1:32:A:ASP:O	6	13.27
(5,1)	1:13:A:LEU:H	1:32:A:ASP:O	8	13.25
(4,1)	1:13:A:LEU:H	1:32:A:ASP:O	8	13.25
(5,1)	1:13:A:LEU:H	1:32:A:ASP:O	15	13.24
(4,1)	1:13:A:LEU:H	1:32:A:ASP:O	15	13.24
(5,11)	1:75:A:GLY:H	1:58:A:GLU:O	10	13.23
(5,1)	1:13:A:LEU:H	1:32:A:ASP:O	13	13.23
(4,11)	1:75:A:GLY:H	1:58:A:GLU:O	10	13.23
(4,1)	1:13:A:LEU:H	1:32:A:ASP:O	13	13.23
(5,14)	1:76:A:PHE:N	1:65:A:GLY:O	10	13.22
(5,1)	1:13:A:LEU:H	1:32:A:ASP:O	10	13.22
(4,14)	1:76:A:PHE:N	1:65:A:GLY:O	10	13.22
(4,1)	1:13:A:LEU:H	1:32:A:ASP:O	10	13.22
(5,14)	1:76:A:PHE:N	1:65:A:GLY:O	9	13.21
(5,1)	1:13:A:LEU:H	1:32:A:ASP:O	1	13.21
(4,14)	1:76:A:PHE:N	1:65:A:GLY:O	9	13.21
(4,1)	1:13:A:LEU:H	1:32:A:ASP:O	1	13.21
(6,181)	1:77:A:LEU:HD21	1:121:A:ARG:HG2	1	13.2
(6,181)	1:77:A:LEU:HD22	1:121:A:ARG:HG2	1	13.2
(6,181)	1:77:A:LEU:HD23	1:121:A:ARG:HG2	1	13.2
(6,181)	1:77:A:LEU:HD21	1:121:A:ARG:HG2	14	13.2
(6,181)	1:77:A:LEU:HD22	1:121:A:ARG:HG2	14	13.2
(6,181)	1:77:A:LEU:HD23	1:121:A:ARG:HG2	14	13.2
(5,1)	1:13:A:LEU:H	1:32:A:ASP:O	11	13.2
(4,1)	1:13:A:LEU:H	1:32:A:ASP:O	11	13.2
(2,160)	1:77:A:LEU:HD21	1:121:A:ARG:HG2	1	13.2
(2,160)	1:77:A:LEU:HD22	1:121:A:ARG:HG2	1	13.2
(2,160)	1:77:A:LEU:HD23	1:121:A:ARG:HG2	1	13.2
(2,160)	1:77:A:LEU:HD21	1:121:A:ARG:HG2	14	13.2
(2,160)	1:77:A:LEU:HD22	1:121:A:ARG:HG2	14	13.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,160)	1:77:A:LEU:HD23	1:121:A:ARG:HG2	14	13.2
(5,14)	1:76:A:PHE:N	1:65:A:GLY:O	8	13.19
(5,1)	1:13:A:LEU:H	1:32:A:ASP:O	12	13.19
(4,14)	1:76:A:PHE:N	1:65:A:GLY:O	8	13.19
(4,1)	1:13:A:LEU:H	1:32:A:ASP:O	12	13.19
(5,11)	1:75:A:GLY:H	1:58:A:GLU:O	9	13.18
(4,11)	1:75:A:GLY:H	1:58:A:GLU:O	9	13.18
(5,14)	1:76:A:PHE:N	1:65:A:GLY:O	7	13.17
(4,14)	1:76:A:PHE:N	1:65:A:GLY:O	7	13.17
(6,181)	1:77:A:LEU:HD21	1:121:A:ARG:HG2	9	13.16
(6,181)	1:77:A:LEU:HD22	1:121:A:ARG:HG2	9	13.16
(6,181)	1:77:A:LEU:HD23	1:121:A:ARG:HG2	9	13.16
(5,14)	1:76:A:PHE:N	1:65:A:GLY:O	5	13.16
(5,14)	1:76:A:PHE:N	1:65:A:GLY:O	6	13.16
(4,14)	1:76:A:PHE:N	1:65:A:GLY:O	5	13.16
(4,14)	1:76:A:PHE:N	1:65:A:GLY:O	6	13.16
(2,160)	1:77:A:LEU:HD21	1:121:A:ARG:HG2	9	13.16
(2,160)	1:77:A:LEU:HD22	1:121:A:ARG:HG2	9	13.16
(2,160)	1:77:A:LEU:HD23	1:121:A:ARG:HG2	9	13.16
(6,181)	1:77:A:LEU:HD21	1:121:A:ARG:HG2	8	13.15
(6,181)	1:77:A:LEU:HD22	1:121:A:ARG:HG2	8	13.15
(6,181)	1:77:A:LEU:HD23	1:121:A:ARG:HG2	8	13.15
(2,160)	1:77:A:LEU:HD21	1:121:A:ARG:HG2	8	13.15
(2,160)	1:77:A:LEU:HD22	1:121:A:ARG:HG2	8	13.15
(2,160)	1:77:A:LEU:HD23	1:121:A:ARG:HG2	8	13.15
(5,11)	1:75:A:GLY:H	1:58:A:GLU:O	3	13.14
(4,11)	1:75:A:GLY:H	1:58:A:GLU:O	3	13.14
(5,1)	1:13:A:LEU:H	1:32:A:ASP:O	4	13.13
(4,1)	1:13:A:LEU:H	1:32:A:ASP:O	4	13.13
(5,1)	1:13:A:LEU:H	1:32:A:ASP:O	2	13.09
(4,1)	1:13:A:LEU:H	1:32:A:ASP:O	2	13.09
(5,11)	1:75:A:GLY:H	1:58:A:GLU:O	6	13.08
(5,11)	1:75:A:GLY:H	1:58:A:GLU:O	7	13.08
(4,11)	1:75:A:GLY:H	1:58:A:GLU:O	6	13.08
(4,11)	1:75:A:GLY:H	1:58:A:GLU:O	7	13.08
(5,11)	1:75:A:GLY:H	1:58:A:GLU:O	8	13.07
(4,11)	1:75:A:GLY:H	1:58:A:GLU:O	8	13.07
(5,13)	1:76:A:PHE:H	1:65:A:GLY:O	13	12.99
(4,13)	1:76:A:PHE:H	1:65:A:GLY:O	13	12.99
(5,1)	1:13:A:LEU:H	1:32:A:ASP:O	3	12.98
(4,1)	1:13:A:LEU:H	1:32:A:ASP:O	3	12.98
(6,181)	1:77:A:LEU:HD21	1:121:A:ARG:HG2	12	12.96

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(6,181)	1:77:A:LEU:HD22	1:121:A:ARG:HG2	12	12.96
(6,181)	1:77:A:LEU:HD23	1:121:A:ARG:HG2	12	12.96
(2,160)	1:77:A:LEU:HD21	1:121:A:ARG:HG2	12	12.96
(2,160)	1:77:A:LEU:HD22	1:121:A:ARG:HG2	12	12.96
(2,160)	1:77:A:LEU:HD23	1:121:A:ARG:HG2	12	12.96
(5,13)	1:76:A:PHE:H	1:65:A:GLY:O	12	12.95
(4,13)	1:76:A:PHE:H	1:65:A:GLY:O	12	12.95
(5,1)	1:13:A:LEU:H	1:32:A:ASP:O	5	12.87
(4,1)	1:13:A:LEU:H	1:32:A:ASP:O	5	12.87
(6,7)	1:1:A:MET:HE2	1:153:A:ARG:H	2	12.81
(6,7)	1:1:A:MET:HE1	1:153:A:ARG:H	5	12.79
(6,7)	1:1:A:MET:HE2	1:153:A:ARG:H	3	12.78
(5,2)	1:13:A:LEU:N	1:32:A:ASP:O	7	12.75
(5,2)	1:13:A:LEU:N	1:32:A:ASP:O	9	12.75
(5,2)	1:13:A:LEU:N	1:32:A:ASP:O	14	12.75
(4,2)	1:13:A:LEU:N	1:32:A:ASP:O	7	12.75
(4,2)	1:13:A:LEU:N	1:32:A:ASP:O	9	12.75
(4,2)	1:13:A:LEU:N	1:32:A:ASP:O	14	12.75
(5,2)	1:13:A:LEU:N	1:32:A:ASP:O	6	12.73
(4,2)	1:13:A:LEU:N	1:32:A:ASP:O	6	12.73
(5,2)	1:13:A:LEU:N	1:32:A:ASP:O	1	12.72
(4,2)	1:13:A:LEU:N	1:32:A:ASP:O	1	12.72
(5,2)	1:13:A:LEU:N	1:32:A:ASP:O	8	12.71
(4,2)	1:13:A:LEU:N	1:32:A:ASP:O	8	12.71
(5,2)	1:13:A:LEU:N	1:32:A:ASP:O	10	12.68
(4,2)	1:13:A:LEU:N	1:32:A:ASP:O	10	12.68
(5,2)	1:13:A:LEU:N	1:32:A:ASP:O	15	12.66
(4,2)	1:13:A:LEU:N	1:32:A:ASP:O	15	12.66
(5,2)	1:13:A:LEU:N	1:32:A:ASP:O	13	12.65
(4,2)	1:13:A:LEU:N	1:32:A:ASP:O	13	12.65
(5,2)	1:13:A:LEU:N	1:32:A:ASP:O	11	12.62
(4,2)	1:13:A:LEU:N	1:32:A:ASP:O	11	12.62
(5,2)	1:13:A:LEU:N	1:32:A:ASP:O	4	12.61
(5,2)	1:13:A:LEU:N	1:32:A:ASP:O	12	12.61
(4,2)	1:13:A:LEU:N	1:32:A:ASP:O	4	12.61
(4,2)	1:13:A:LEU:N	1:32:A:ASP:O	12	12.61
(6,7)	1:1:A:MET:HE2	1:153:A:ARG:H	1	12.6
(5,2)	1:13:A:LEU:N	1:32:A:ASP:O	2	12.59
(4,2)	1:13:A:LEU:N	1:32:A:ASP:O	2	12.59
(5,2)	1:13:A:LEU:N	1:32:A:ASP:O	3	12.48
(4,2)	1:13:A:LEU:N	1:32:A:ASP:O	3	12.48
(5,14)	1:76:A:PHE:N	1:65:A:GLY:O	11	12.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,14)	1:76:A:PHE:N	1:65:A:GLY:O	11	12.43
(5,14)	1:76:A:PHE:N	1:65:A:GLY:O	14	12.41
(4,14)	1:76:A:PHE:N	1:65:A:GLY:O	14	12.41
(5,14)	1:76:A:PHE:N	1:65:A:GLY:O	15	12.38
(4,14)	1:76:A:PHE:N	1:65:A:GLY:O	15	12.38
(5,2)	1:13:A:LEU:N	1:32:A:ASP:O	5	12.36
(4,2)	1:13:A:LEU:N	1:32:A:ASP:O	5	12.36
(5,12)	1:75:A:GLY:N	1:58:A:GLU:O	2	12.28
(4,12)	1:75:A:GLY:N	1:58:A:GLU:O	2	12.28
(5,12)	1:75:A:GLY:N	1:58:A:GLU:O	1	12.23
(5,12)	1:75:A:GLY:N	1:58:A:GLU:O	4	12.23
(4,12)	1:75:A:GLY:N	1:58:A:GLU:O	1	12.23
(4,12)	1:75:A:GLY:N	1:58:A:GLU:O	4	12.23
(5,14)	1:76:A:PHE:N	1:65:A:GLY:O	13	12.13
(4,14)	1:76:A:PHE:N	1:65:A:GLY:O	13	12.13
(5,12)	1:75:A:GLY:N	1:58:A:GLU:O	5	12.08
(4,12)	1:75:A:GLY:N	1:58:A:GLU:O	5	12.08
(6,101)	1:42:A:HIS:H	1:168:A:ARG:HD2	11	12.06
(5,14)	1:76:A:PHE:N	1:65:A:GLY:O	12	12.06
(5,12)	1:75:A:GLY:N	1:58:A:GLU:O	10	12.06
(4,14)	1:76:A:PHE:N	1:65:A:GLY:O	12	12.06
(4,12)	1:75:A:GLY:N	1:58:A:GLU:O	10	12.06
(2,91)	1:42:A:HIS:H	1:168:A:ARG:HD2	11	12.06
(5,12)	1:75:A:GLY:N	1:58:A:GLU:O	9	12.02
(4,12)	1:75:A:GLY:N	1:58:A:GLU:O	9	12.02
(6,9)	1:1:A:MET:HA	1:159:A:LEU:HD22	15	11.99
(5,12)	1:75:A:GLY:N	1:58:A:GLU:O	3	11.99
(4,12)	1:75:A:GLY:N	1:58:A:GLU:O	3	11.99
(5,12)	1:75:A:GLY:N	1:58:A:GLU:O	6	11.95
(4,12)	1:75:A:GLY:N	1:58:A:GLU:O	6	11.95
(6,101)	1:42:A:HIS:H	1:168:A:ARG:HD2	15	11.94
(5,12)	1:75:A:GLY:N	1:58:A:GLU:O	7	11.94
(4,12)	1:75:A:GLY:N	1:58:A:GLU:O	7	11.94
(2,91)	1:42:A:HIS:H	1:168:A:ARG:HD2	15	11.94
(5,12)	1:75:A:GLY:N	1:58:A:GLU:O	8	11.93
(4,12)	1:75:A:GLY:N	1:58:A:GLU:O	8	11.93
(6,101)	1:42:A:HIS:H	1:168:A:ARG:HD2	12	11.92
(2,91)	1:42:A:HIS:H	1:168:A:ARG:HD2	12	11.92
(6,101)	1:42:A:HIS:H	1:168:A:ARG:HD2	14	11.89
(2,91)	1:42:A:HIS:H	1:168:A:ARG:HD2	14	11.89
(6,101)	1:42:A:HIS:H	1:168:A:ARG:HD2	13	11.75
(2,91)	1:42:A:HIS:H	1:168:A:ARG:HD2	13	11.75

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(6,162)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD11	10	11.73
(6,162)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD12	10	11.73
(6,162)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD13	10	11.73
(6,162)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD11	10	11.73
(6,162)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD12	10	11.73
(6,162)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD13	10	11.73
(6,162)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD11	10	11.73
(6,162)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD12	10	11.73
(6,162)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD13	10	11.73
(3,15)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD11	10	11.73
(3,15)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD12	10	11.73
(3,15)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD13	10	11.73
(3,15)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD11	10	11.73
(3,15)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD12	10	11.73
(3,15)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD13	10	11.73
(3,15)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD11	10	11.73
(3,15)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD12	10	11.73
(3,15)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD13	10	11.73
(6,162)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD11	8	11.67
(6,162)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD12	8	11.67
(6,162)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD13	8	11.67
(6,162)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD11	8	11.67
(6,162)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD12	8	11.67
(6,162)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD13	8	11.67
(6,162)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD11	8	11.67
(6,162)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD12	8	11.67
(6,162)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD13	8	11.67
(3,15)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD11	8	11.67
(3,15)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD12	8	11.67
(3,15)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD13	8	11.67
(3,15)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD11	8	11.67
(3,15)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD12	8	11.67
(3,15)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD13	8	11.67
(3,15)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD11	8	11.67
(3,15)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD12	8	11.67
(3,15)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD13	8	11.67
(6,162)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD11	6	11.62
(6,162)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD12	6	11.62
(6,162)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD13	6	11.62
(6,162)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD11	6	11.62
(6,162)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD12	6	11.62
(6,162)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD13	6	11.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(6,162)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD11	6	11.62
(6,162)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD12	6	11.62
(6,162)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD13	6	11.62
(3,15)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD11	6	11.62
(3,15)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD12	6	11.62
(3,15)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD13	6	11.62
(3,15)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD11	6	11.62
(3,15)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD12	6	11.62
(3,15)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD13	6	11.62
(3,15)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD11	6	11.62
(3,15)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD12	6	11.62
(3,15)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD13	6	11.62
(6,162)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD11	9	11.56
(6,162)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD12	9	11.56
(6,162)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD13	9	11.56
(6,162)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD11	9	11.56
(6,162)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD12	9	11.56
(6,162)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD13	9	11.56
(6,162)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD11	9	11.56
(6,162)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD12	9	11.56
(6,162)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD13	9	11.56
(3,15)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD11	9	11.56
(3,15)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD12	9	11.56
(3,15)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD13	9	11.56
(3,15)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD11	9	11.56
(3,15)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD12	9	11.56
(3,15)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD13	9	11.56
(3,15)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD11	9	11.56
(3,15)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD12	9	11.56
(3,15)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD13	9	11.56
(6,162)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD11	7	11.55
(6,162)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD12	7	11.55
(6,162)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD13	7	11.55
(6,162)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD11	7	11.55
(6,162)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD12	7	11.55
(6,162)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD13	7	11.55
(6,162)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD11	7	11.55
(6,162)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD12	7	11.55
(6,162)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD13	7	11.55
(3,15)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD11	7	11.55
(3,15)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD12	7	11.55
(3,15)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD13	7	11.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,15)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD11	7	11.55
(3,15)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD12	7	11.55
(3,15)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD13	7	11.55
(3,15)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD11	7	11.55
(3,15)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD12	7	11.55
(3,15)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD13	7	11.55
(5,11)	1:75:A:GLY:H	1:58:A:GLU:O	15	11.26
(4,11)	1:75:A:GLY:H	1:58:A:GLU:O	15	11.26
(5,11)	1:75:A:GLY:H	1:58:A:GLU:O	11	11.21
(4,11)	1:75:A:GLY:H	1:58:A:GLU:O	11	11.21
(5,11)	1:75:A:GLY:H	1:58:A:GLU:O	13	11.14
(4,11)	1:75:A:GLY:H	1:58:A:GLU:O	13	11.14
(5,11)	1:75:A:GLY:H	1:58:A:GLU:O	14	11.13
(4,11)	1:75:A:GLY:H	1:58:A:GLU:O	14	11.13
(6,9)	1:1:A:MET:HE1	1:159:A:LEU:HD22	11	10.86
(5,11)	1:75:A:GLY:H	1:58:A:GLU:O	12	10.77
(4,11)	1:75:A:GLY:H	1:58:A:GLU:O	12	10.77
(6,71)	1:33:A:ALA:H	1:183:A:HIS:H	15	10.75
(2,64)	1:33:A:ALA:H	1:183:A:HIS:H	15	10.75
(6,71)	1:33:A:ALA:H	1:183:A:HIS:H	14	10.68
(2,64)	1:33:A:ALA:H	1:183:A:HIS:H	14	10.68
(6,71)	1:33:A:ALA:H	1:183:A:HIS:H	12	10.66
(2,64)	1:33:A:ALA:H	1:183:A:HIS:H	12	10.66
(6,71)	1:33:A:ALA:H	1:183:A:HIS:H	11	10.62
(2,64)	1:33:A:ALA:H	1:183:A:HIS:H	11	10.62
(6,71)	1:33:A:ALA:H	1:183:A:HIS:H	13	10.61
(2,64)	1:33:A:ALA:H	1:183:A:HIS:H	13	10.61
(6,94)	1:41:A:LYS:HE2	1:163:A:LYS:HG2	12	10.55
(3,6)	1:41:A:LYS:HE2	1:163:A:LYS:HG2	12	10.55
(6,162)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD11	2	10.52
(6,162)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD12	2	10.52
(6,162)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD13	2	10.52
(6,162)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD11	2	10.52
(6,162)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD12	2	10.52
(6,162)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD13	2	10.52
(6,162)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD11	2	10.52
(6,162)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD12	2	10.52
(6,162)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD13	2	10.52
(6,162)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD11	3	10.52
(6,162)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD12	3	10.52
(6,162)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD13	3	10.52
(6,162)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD11	3	10.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(6,162)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD12	3	10.52
(6,162)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD13	3	10.52
(6,162)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD11	3	10.52
(6,162)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD12	3	10.52
(6,162)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD13	3	10.52
(3,15)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD11	2	10.52
(3,15)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD12	2	10.52
(3,15)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD13	2	10.52
(3,15)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD11	2	10.52
(3,15)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD12	2	10.52
(3,15)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD13	2	10.52
(3,15)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD11	2	10.52
(3,15)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD12	2	10.52
(3,15)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD13	2	10.52
(3,15)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD11	3	10.52
(3,15)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD12	3	10.52
(3,15)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD13	3	10.52
(3,15)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD11	3	10.52
(3,15)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD12	3	10.52
(3,15)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD13	3	10.52
(3,15)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD11	3	10.52
(3,15)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD12	3	10.52
(3,15)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD13	3	10.52
(6,162)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD11	5	10.48
(6,162)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD12	5	10.48
(6,162)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD13	5	10.48
(6,162)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD11	5	10.48
(6,162)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD12	5	10.48
(6,162)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD13	5	10.48
(6,162)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD11	5	10.48
(6,162)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD12	5	10.48
(6,162)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD13	5	10.48
(6,9)	1:1:A:MET:HE1	1:159:A:LEU:HD22	14	10.48
(3,15)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD11	5	10.48
(3,15)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD12	5	10.48
(3,15)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD13	5	10.48
(3,15)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD11	5	10.48
(3,15)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD12	5	10.48
(3,15)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD13	5	10.48
(3,15)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD11	5	10.48
(3,15)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD12	5	10.48
(3,15)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD13	5	10.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(6,9)	1:1:A:MET:HE1	1:159:A:LEU:HD22	12	10.46
(6,94)	1:41:A:LYS:HE2	1:163:A:LYS:HG2	14	10.4
(3,6)	1:41:A:LYS:HE2	1:163:A:LYS:HG2	14	10.4
(6,9)	1:1:A:MET:HE1	1:159:A:LEU:HD23	13	10.35
(6,95)	1:41:A:LYS:H	1:168:A:ARG:HG3	12	10.27
(6,95)	1:41:A:LYS:H	1:168:A:ARG:HG3	13	10.27
(6,94)	1:41:A:LYS:HE2	1:163:A:LYS:HG2	15	10.27
(3,6)	1:41:A:LYS:HE2	1:163:A:LYS:HG2	15	10.27
(2,85)	1:41:A:LYS:H	1:168:A:ARG:HG3	12	10.27
(2,85)	1:41:A:LYS:H	1:168:A:ARG:HG3	13	10.27
(6,95)	1:41:A:LYS:H	1:168:A:ARG:HG3	15	10.26
(2,85)	1:41:A:LYS:H	1:168:A:ARG:HG3	15	10.26
(5,12)	1:75:A:GLY:N	1:58:A:GLU:O	15	10.25
(4,12)	1:75:A:GLY:N	1:58:A:GLU:O	15	10.25
(6,94)	1:41:A:LYS:HE2	1:163:A:LYS:HG2	13	10.24
(3,6)	1:41:A:LYS:HE2	1:163:A:LYS:HG2	13	10.24
(5,12)	1:75:A:GLY:N	1:58:A:GLU:O	11	10.21
(4,12)	1:75:A:GLY:N	1:58:A:GLU:O	11	10.21
(6,95)	1:41:A:LYS:H	1:168:A:ARG:HG3	11	10.17
(2,85)	1:41:A:LYS:H	1:168:A:ARG:HG3	11	10.17
(6,95)	1:41:A:LYS:H	1:168:A:ARG:HG3	14	10.16
(5,12)	1:75:A:GLY:N	1:58:A:GLU:O	14	10.16
(4,12)	1:75:A:GLY:N	1:58:A:GLU:O	14	10.16
(2,85)	1:41:A:LYS:H	1:168:A:ARG:HG3	14	10.16
(5,12)	1:75:A:GLY:N	1:58:A:GLU:O	13	10.09
(4,12)	1:75:A:GLY:N	1:58:A:GLU:O	13	10.09
(6,162)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD11	4	10.0
(6,162)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD12	4	10.0
(6,162)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD13	4	10.0
(6,162)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD11	4	10.0
(6,162)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD12	4	10.0
(6,162)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD13	4	10.0
(6,162)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD11	4	10.0
(6,162)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD12	4	10.0
(6,162)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD13	4	10.0
(3,15)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD11	4	10.0
(3,15)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD12	4	10.0
(3,15)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD13	4	10.0
(3,15)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD11	4	10.0
(3,15)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD12	4	10.0
(3,15)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD13	4	10.0
(3,15)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD11	4	10.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,15)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD12	4	10.0
(3,15)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD13	4	10.0
(6,152)	1:64:A:LEU:HB2	1:75:A:GLY:HA2	1	9.95
(6,152)	1:64:A:LEU:HB2	1:75:A:GLY:HA2	2	9.95
(6,152)	1:64:A:LEU:HB2	1:75:A:GLY:HA2	4	9.95
(6,152)	1:64:A:LEU:HB2	1:75:A:GLY:HA2	10	9.95
(3,14)	1:64:A:LEU:HB2	1:75:A:GLY:HA2	1	9.95
(3,14)	1:64:A:LEU:HB2	1:75:A:GLY:HA2	2	9.95
(3,14)	1:64:A:LEU:HB2	1:75:A:GLY:HA2	4	9.95
(3,14)	1:64:A:LEU:HB2	1:75:A:GLY:HA2	10	9.95
(6,152)	1:64:A:LEU:HB2	1:75:A:GLY:HA2	9	9.93
(3,14)	1:64:A:LEU:HB2	1:75:A:GLY:HA2	9	9.93
(6,152)	1:64:A:LEU:HB2	1:75:A:GLY:HA2	7	9.91
(6,152)	1:64:A:LEU:HB2	1:75:A:GLY:HA2	8	9.91
(3,14)	1:64:A:LEU:HB2	1:75:A:GLY:HA2	7	9.91
(3,14)	1:64:A:LEU:HB2	1:75:A:GLY:HA2	8	9.91
(5,12)	1:75:A:GLY:N	1:58:A:GLU:O	12	9.83
(4,12)	1:75:A:GLY:N	1:58:A:GLU:O	12	9.83
(6,152)	1:64:A:LEU:HB2	1:75:A:GLY:HA2	6	9.79
(3,14)	1:64:A:LEU:HB2	1:75:A:GLY:HA2	6	9.79
(6,152)	1:64:A:LEU:HB2	1:75:A:GLY:HA2	3	9.75
(6,152)	1:64:A:LEU:HB2	1:75:A:GLY:HA2	5	9.75
(3,14)	1:64:A:LEU:HB2	1:75:A:GLY:HA2	3	9.75
(3,14)	1:64:A:LEU:HB2	1:75:A:GLY:HA2	5	9.75
(6,102)	1:42:A:HIS:H	1:168:A:ARG:HB3	11	9.56
(2,92)	1:42:A:HIS:H	1:168:A:ARG:HB3	11	9.56
(6,102)	1:42:A:HIS:H	1:168:A:ARG:HB3	15	9.48
(2,92)	1:42:A:HIS:H	1:168:A:ARG:HB3	15	9.48
(6,102)	1:42:A:HIS:H	1:168:A:ARG:HB3	12	9.4
(2,92)	1:42:A:HIS:H	1:168:A:ARG:HB3	12	9.4
(6,102)	1:42:A:HIS:H	1:168:A:ARG:HB3	14	9.37
(2,92)	1:42:A:HIS:H	1:168:A:ARG:HB3	14	9.37
(6,102)	1:42:A:HIS:H	1:168:A:ARG:HB3	13	9.25
(2,92)	1:42:A:HIS:H	1:168:A:ARG:HB3	13	9.25
(6,155)	1:66:A:GLY:H	1:76:A:PHE:H	1	9.15
(2,136)	1:66:A:GLY:H	1:76:A:PHE:H	1	9.15
(6,155)	1:66:A:GLY:H	1:76:A:PHE:H	2	9.13
(2,136)	1:66:A:GLY:H	1:76:A:PHE:H	2	9.13
(6,155)	1:66:A:GLY:H	1:76:A:PHE:H	4	9.12
(2,136)	1:66:A:GLY:H	1:76:A:PHE:H	4	9.12
(6,155)	1:66:A:GLY:H	1:76:A:PHE:H	10	9.04
(2,136)	1:66:A:GLY:H	1:76:A:PHE:H	10	9.04

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(6,155)	1:66:A:GLY:H	1:76:A:PHE:H	8	9.02
(6,155)	1:66:A:GLY:H	1:76:A:PHE:H	9	9.02
(2,136)	1:66:A:GLY:H	1:76:A:PHE:H	8	9.02
(2,136)	1:66:A:GLY:H	1:76:A:PHE:H	9	9.02
(6,155)	1:66:A:GLY:H	1:76:A:PHE:H	7	9.0
(2,136)	1:66:A:GLY:H	1:76:A:PHE:H	7	9.0
(6,155)	1:66:A:GLY:H	1:76:A:PHE:H	3	8.98
(2,136)	1:66:A:GLY:H	1:76:A:PHE:H	3	8.98
(6,155)	1:66:A:GLY:H	1:76:A:PHE:H	6	8.97
(2,136)	1:66:A:GLY:H	1:76:A:PHE:H	6	8.97
(6,70)	1:33:A:ALA:HB1	1:183:A:HIS:H	15	8.95
(6,70)	1:33:A:ALA:HB2	1:183:A:HIS:H	15	8.95
(6,70)	1:33:A:ALA:HB3	1:183:A:HIS:H	15	8.95
(2,63)	1:33:A:ALA:HB1	1:183:A:HIS:H	15	8.95
(2,63)	1:33:A:ALA:HB2	1:183:A:HIS:H	15	8.95
(2,63)	1:33:A:ALA:HB3	1:183:A:HIS:H	15	8.95
(6,155)	1:66:A:GLY:H	1:76:A:PHE:H	5	8.92
(2,136)	1:66:A:GLY:H	1:76:A:PHE:H	5	8.92
(6,70)	1:33:A:ALA:HB1	1:183:A:HIS:H	12	8.87
(6,70)	1:33:A:ALA:HB2	1:183:A:HIS:H	12	8.87
(6,70)	1:33:A:ALA:HB3	1:183:A:HIS:H	12	8.87
(6,70)	1:33:A:ALA:HB1	1:183:A:HIS:H	14	8.87
(6,70)	1:33:A:ALA:HB2	1:183:A:HIS:H	14	8.87
(6,70)	1:33:A:ALA:HB3	1:183:A:HIS:H	14	8.87
(2,63)	1:33:A:ALA:HB1	1:183:A:HIS:H	12	8.87
(2,63)	1:33:A:ALA:HB2	1:183:A:HIS:H	12	8.87
(2,63)	1:33:A:ALA:HB3	1:183:A:HIS:H	12	8.87
(2,63)	1:33:A:ALA:HB1	1:183:A:HIS:H	14	8.87
(2,63)	1:33:A:ALA:HB2	1:183:A:HIS:H	14	8.87
(2,63)	1:33:A:ALA:HB3	1:183:A:HIS:H	14	8.87
(6,70)	1:33:A:ALA:HB1	1:183:A:HIS:H	13	8.85
(6,70)	1:33:A:ALA:HB2	1:183:A:HIS:H	13	8.85
(6,70)	1:33:A:ALA:HB3	1:183:A:HIS:H	13	8.85
(2,63)	1:33:A:ALA:HB1	1:183:A:HIS:H	13	8.85
(2,63)	1:33:A:ALA:HB2	1:183:A:HIS:H	13	8.85
(2,63)	1:33:A:ALA:HB3	1:183:A:HIS:H	13	8.85
(6,162)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD11	15	8.84
(6,162)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD12	15	8.84
(6,162)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD13	15	8.84
(6,162)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD11	15	8.84
(6,162)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD12	15	8.84
(6,162)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD13	15	8.84

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(6,162)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD11	15	8.84
(6,162)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD12	15	8.84
(6,162)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD13	15	8.84
(3,15)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD11	15	8.84
(3,15)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD12	15	8.84
(3,15)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD13	15	8.84
(3,15)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD11	15	8.84
(3,15)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD12	15	8.84
(3,15)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD13	15	8.84
(3,15)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD11	15	8.84
(3,15)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD12	15	8.84
(3,15)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD13	15	8.84
(6,70)	1:33:A:ALA:HB1	1:183:A:HIS:H	11	8.77
(6,70)	1:33:A:ALA:HB2	1:183:A:HIS:H	11	8.77
(6,70)	1:33:A:ALA:HB3	1:183:A:HIS:H	11	8.77
(2,63)	1:33:A:ALA:HB1	1:183:A:HIS:H	11	8.77
(2,63)	1:33:A:ALA:HB2	1:183:A:HIS:H	11	8.77
(2,63)	1:33:A:ALA:HB3	1:183:A:HIS:H	11	8.77
(6,162)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD11	12	8.63
(6,162)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD12	12	8.63
(6,162)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD13	12	8.63
(6,162)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD11	12	8.63
(6,162)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD12	12	8.63
(6,162)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD13	12	8.63
(6,162)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD11	12	8.63
(6,162)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD12	12	8.63
(6,162)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD13	12	8.63
(3,15)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD11	12	8.63
(3,15)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD12	12	8.63
(3,15)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD13	12	8.63
(3,15)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD11	12	8.63
(3,15)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD12	12	8.63
(3,15)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD13	12	8.63
(3,15)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD11	12	8.63
(3,15)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD12	12	8.63
(3,15)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD13	12	8.63
(5,5)	1:24:A:TRP:H	1:20:A:ASN:O	3	8.59
(4,5)	1:24:A:TRP:H	1:20:A:ASN:O	3	8.59
(5,5)	1:24:A:TRP:H	1:20:A:ASN:O	2	8.57
(4,5)	1:24:A:TRP:H	1:20:A:ASN:O	2	8.57
(6,162)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD11	14	8.54
(6,162)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD12	14	8.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(6,162)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD13	14	8.54
(6,162)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD11	14	8.54
(6,162)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD12	14	8.54
(6,162)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD13	14	8.54
(6,162)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD11	14	8.54
(6,162)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD12	14	8.54
(6,162)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD13	14	8.54
(3,15)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD11	14	8.54
(3,15)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD12	14	8.54
(3,15)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD13	14	8.54
(3,15)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD11	14	8.54
(3,15)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD12	14	8.54
(3,15)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD13	14	8.54
(3,15)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD11	14	8.54
(3,15)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD12	14	8.54
(3,15)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD13	14	8.54
(5,5)	1:24:A:TRP:H	1:20:A:ASN:O	1	8.53
(4,5)	1:24:A:TRP:H	1:20:A:ASN:O	1	8.53
(5,5)	1:24:A:TRP:H	1:20:A:ASN:O	6	8.48
(4,5)	1:24:A:TRP:H	1:20:A:ASN:O	6	8.48
(5,5)	1:24:A:TRP:H	1:20:A:ASN:O	9	8.47
(4,5)	1:24:A:TRP:H	1:20:A:ASN:O	9	8.47
(5,7)	1:26:A:GLY:H	1:22:A:PRO:O	14	8.46
(4,7)	1:26:A:GLY:H	1:22:A:PRO:O	14	8.46
(6,162)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD11	1	8.44
(6,162)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD12	1	8.44
(6,162)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD13	1	8.44
(6,162)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD11	1	8.44
(6,162)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD12	1	8.44
(6,162)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD13	1	8.44
(6,162)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD11	1	8.44
(6,162)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD12	1	8.44
(6,162)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD13	1	8.44
(5,5)	1:24:A:TRP:H	1:20:A:ASN:O	8	8.44
(4,5)	1:24:A:TRP:H	1:20:A:ASN:O	8	8.44
(3,15)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD11	1	8.44
(3,15)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD12	1	8.44
(3,15)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD13	1	8.44
(3,15)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD11	1	8.44
(3,15)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD12	1	8.44
(3,15)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD13	1	8.44
(3,15)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD11	1	8.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,15)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD12	1	8.44
(3,15)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD13	1	8.44
(5,5)	1:24:A:TRP:H	1:20:A:ASN:O	7	8.43
(4,5)	1:24:A:TRP:H	1:20:A:ASN:O	7	8.43
(6,10)	1:1:A:MET:HE1	1:164:A:VAL:HG23	15	8.42
(5,5)	1:24:A:TRP:H	1:20:A:ASN:O	10	8.42
(4,5)	1:24:A:TRP:H	1:20:A:ASN:O	10	8.42
(5,7)	1:26:A:GLY:H	1:22:A:PRO:O	12	8.41
(4,7)	1:26:A:GLY:H	1:22:A:PRO:O	12	8.41
(6,162)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD11	13	8.38
(6,162)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD12	13	8.38
(6,162)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD13	13	8.38
(6,162)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD11	13	8.38
(6,162)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD12	13	8.38
(6,162)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD13	13	8.38
(6,162)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD11	13	8.38
(6,162)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD12	13	8.38
(6,162)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD13	13	8.38
(3,15)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD11	13	8.38
(3,15)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD12	13	8.38
(3,15)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD13	13	8.38
(3,15)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD11	13	8.38
(3,15)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD12	13	8.38
(3,15)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD13	13	8.38
(3,15)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD11	13	8.38
(3,15)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD12	13	8.38
(3,15)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD13	13	8.38
(5,5)	1:24:A:TRP:H	1:20:A:ASN:O	5	8.37
(4,5)	1:24:A:TRP:H	1:20:A:ASN:O	5	8.37
(5,7)	1:26:A:GLY:H	1:22:A:PRO:O	15	8.34
(4,7)	1:26:A:GLY:H	1:22:A:PRO:O	15	8.34
(5,7)	1:26:A:GLY:H	1:22:A:PRO:O	11	8.31
(4,7)	1:26:A:GLY:H	1:22:A:PRO:O	11	8.31
(5,7)	1:26:A:GLY:H	1:22:A:PRO:O	13	8.29
(5,5)	1:24:A:TRP:H	1:20:A:ASN:O	4	8.29
(4,7)	1:26:A:GLY:H	1:22:A:PRO:O	13	8.29
(4,5)	1:24:A:TRP:H	1:20:A:ASN:O	4	8.29
(6,94)	1:41:A:LYS:HE2	1:163:A:LYS:HG2	11	8.26
(3,6)	1:41:A:LYS:HE2	1:163:A:LYS:HG2	11	8.26
(6,162)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD11	11	8.24
(6,162)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD12	11	8.24
(6,162)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD13	11	8.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(6,162)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD11	11	8.24
(6,162)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD12	11	8.24
(6,162)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD13	11	8.24
(6,162)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD11	11	8.24
(6,162)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD12	11	8.24
(6,162)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD13	11	8.24
(3,15)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD11	11	8.24
(3,15)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD12	11	8.24
(3,15)	1:69:A:MET:HE1	1:128:A:ILE:HD13	11	8.24
(3,15)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD11	11	8.24
(3,15)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD12	11	8.24
(3,15)	1:69:A:MET:HE2	1:128:A:ILE:HD13	11	8.24
(3,15)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD11	11	8.24
(3,15)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD12	11	8.24
(3,15)	1:69:A:MET:HE3	1:128:A:ILE:HD13	11	8.24
(5,7)	1:26:A:GLY:H	1:22:A:PRO:O	9	8.22
(4,7)	1:26:A:GLY:H	1:22:A:PRO:O	9	8.22
(5,7)	1:26:A:GLY:H	1:22:A:PRO:O	10	8.2
(5,5)	1:24:A:TRP:H	1:20:A:ASN:O	14	8.2
(5,5)	1:24:A:TRP:H	1:20:A:ASN:O	15	8.2
(4,7)	1:26:A:GLY:H	1:22:A:PRO:O	10	8.2
(4,5)	1:24:A:TRP:H	1:20:A:ASN:O	14	8.2
(4,5)	1:24:A:TRP:H	1:20:A:ASN:O	15	8.2
(5,7)	1:26:A:GLY:H	1:22:A:PRO:O	3	8.19
(4,7)	1:26:A:GLY:H	1:22:A:PRO:O	3	8.19
(6,155)	1:66:A:GLY:H	1:76:A:PHE:H	15	8.16
(2,136)	1:66:A:GLY:H	1:76:A:PHE:H	15	8.16
(5,5)	1:24:A:TRP:H	1:20:A:ASN:O	12	8.15
(4,5)	1:24:A:TRP:H	1:20:A:ASN:O	12	8.15
(5,5)	1:24:A:TRP:H	1:20:A:ASN:O	13	8.14
(4,5)	1:24:A:TRP:H	1:20:A:ASN:O	13	8.14
(6,155)	1:66:A:GLY:H	1:76:A:PHE:H	11	8.12
(5,7)	1:26:A:GLY:H	1:22:A:PRO:O	6	8.12
(5,5)	1:24:A:TRP:H	1:20:A:ASN:O	11	8.12
(4,7)	1:26:A:GLY:H	1:22:A:PRO:O	6	8.12
(4,5)	1:24:A:TRP:H	1:20:A:ASN:O	11	8.12
(2,136)	1:66:A:GLY:H	1:76:A:PHE:H	11	8.12
(5,7)	1:26:A:GLY:H	1:22:A:PRO:O	8	8.11
(4,7)	1:26:A:GLY:H	1:22:A:PRO:O	8	8.11
(6,155)	1:66:A:GLY:H	1:76:A:PHE:H	14	8.1
(2,136)	1:66:A:GLY:H	1:76:A:PHE:H	14	8.1
(5,7)	1:26:A:GLY:H	1:22:A:PRO:O	7	8.08

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,7)	1:26:A:GLY:H	1:22:A:PRO:O	7	8.08
(5,7)	1:26:A:GLY:H	1:22:A:PRO:O	2	8.04
(4,7)	1:26:A:GLY:H	1:22:A:PRO:O	2	8.04
(5,7)	1:26:A:GLY:H	1:22:A:PRO:O	1	8.03
(4,7)	1:26:A:GLY:H	1:22:A:PRO:O	1	8.03
(5,7)	1:26:A:GLY:H	1:22:A:PRO:O	4	8.01
(4,7)	1:26:A:GLY:H	1:22:A:PRO:O	4	8.01
(6,152)	1:64:A:LEU:HB2	1:75:A:GLY:HA2	11	7.97
(3,14)	1:64:A:LEU:HB2	1:75:A:GLY:HA2	11	7.97
(5,7)	1:26:A:GLY:H	1:22:A:PRO:O	5	7.95
(4,7)	1:26:A:GLY:H	1:22:A:PRO:O	5	7.95
(6,155)	1:66:A:GLY:H	1:76:A:PHE:H	13	7.88
(2,136)	1:66:A:GLY:H	1:76:A:PHE:H	13	7.88
(6,152)	1:64:A:LEU:HB2	1:75:A:GLY:HA2	14	7.87
(6,152)	1:64:A:LEU:HB2	1:75:A:GLY:HA2	15	7.87
(3,14)	1:64:A:LEU:HB2	1:75:A:GLY:HA2	14	7.87
(3,14)	1:64:A:LEU:HB2	1:75:A:GLY:HA2	15	7.87
(6,155)	1:66:A:GLY:H	1:76:A:PHE:H	12	7.84
(6,14)	1:1:A:MET:HB2	1:180:A:HIS:H	12	7.84
(2,136)	1:66:A:GLY:H	1:76:A:PHE:H	12	7.84
(6,10)	1:1:A:MET:HE1	1:164:A:VAL:HG23	13	7.82
(5,3)	1:23:A:LEU:H	1:19:A:ARG:O	7	7.8
(4,3)	1:23:A:LEU:H	1:19:A:ARG:O	7	7.8
(6,152)	1:64:A:LEU:HB2	1:75:A:GLY:HA2	13	7.76
(3,14)	1:64:A:LEU:HB2	1:75:A:GLY:HA2	13	7.76
(5,3)	1:23:A:LEU:H	1:19:A:ARG:O	12	7.75
(4,3)	1:23:A:LEU:H	1:19:A:ARG:O	12	7.75
(5,3)	1:23:A:LEU:H	1:19:A:ARG:O	3	7.73
(4,3)	1:23:A:LEU:H	1:19:A:ARG:O	3	7.73
(5,3)	1:23:A:LEU:H	1:19:A:ARG:O	15	7.68
(4,3)	1:23:A:LEU:H	1:19:A:ARG:O	15	7.68
(6,10)	1:1:A:MET:HE1	1:164:A:VAL:HG23	14	7.64
(5,3)	1:23:A:LEU:H	1:19:A:ARG:O	2	7.63
(4,3)	1:23:A:LEU:H	1:19:A:ARG:O	2	7.63
(6,14)	1:1:A:MET:HB2	1:180:A:HIS:H	11	7.62
(6,14)	1:1:A:MET:HB2	1:180:A:HIS:H	14	7.62
(5,3)	1:23:A:LEU:H	1:19:A:ARG:O	1	7.62
(4,3)	1:23:A:LEU:H	1:19:A:ARG:O	1	7.62
(6,10)	1:1:A:MET:HE1	1:164:A:VAL:HG23	11	7.58
(5,3)	1:23:A:LEU:H	1:19:A:ARG:O	14	7.57
(4,3)	1:23:A:LEU:H	1:19:A:ARG:O	14	7.57
(5,3)	1:23:A:LEU:H	1:19:A:ARG:O	13	7.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,3)	1:23:A:LEU:H	1:19:A:ARG:O	13	7.56
(5,6)	1:24:A:TRP:N	1:20:A:ASN:O	2	7.55
(4,6)	1:24:A:TRP:N	1:20:A:ASN:O	2	7.55
(6,10)	1:1:A:MET:HE1	1:164:A:VAL:HG23	12	7.54
(6,152)	1:64:A:LEU:HB2	1:75:A:GLY:HA2	12	7.53
(6,14)	1:1:A:MET:HB2	1:180:A:HIS:H	13	7.53
(5,6)	1:24:A:TRP:N	1:20:A:ASN:O	1	7.53
(5,3)	1:23:A:LEU:H	1:19:A:ARG:O	5	7.53
(4,6)	1:24:A:TRP:N	1:20:A:ASN:O	1	7.53
(4,3)	1:23:A:LEU:H	1:19:A:ARG:O	5	7.53
(3,14)	1:64:A:LEU:HB2	1:75:A:GLY:HA2	12	7.53
(5,6)	1:24:A:TRP:N	1:20:A:ASN:O	3	7.51
(4,6)	1:24:A:TRP:N	1:20:A:ASN:O	3	7.51
(5,3)	1:23:A:LEU:H	1:19:A:ARG:O	11	7.48
(4,3)	1:23:A:LEU:H	1:19:A:ARG:O	11	7.48
(5,8)	1:26:A:GLY:N	1:22:A:PRO:O	14	7.46
(5,6)	1:24:A:TRP:N	1:20:A:ASN:O	6	7.46
(4,8)	1:26:A:GLY:N	1:22:A:PRO:O	14	7.46
(4,6)	1:24:A:TRP:N	1:20:A:ASN:O	6	7.46
(5,8)	1:26:A:GLY:N	1:22:A:PRO:O	15	7.41
(5,6)	1:24:A:TRP:N	1:20:A:ASN:O	9	7.41
(4,8)	1:26:A:GLY:N	1:22:A:PRO:O	15	7.41
(4,6)	1:24:A:TRP:N	1:20:A:ASN:O	9	7.41
(5,8)	1:26:A:GLY:N	1:22:A:PRO:O	12	7.4
(5,6)	1:24:A:TRP:N	1:20:A:ASN:O	7	7.4
(5,6)	1:24:A:TRP:N	1:20:A:ASN:O	8	7.4
(4,8)	1:26:A:GLY:N	1:22:A:PRO:O	12	7.4
(4,6)	1:24:A:TRP:N	1:20:A:ASN:O	7	7.4
(4,6)	1:24:A:TRP:N	1:20:A:ASN:O	8	7.4
(5,6)	1:24:A:TRP:N	1:20:A:ASN:O	5	7.38
(5,6)	1:24:A:TRP:N	1:20:A:ASN:O	10	7.38
(4,6)	1:24:A:TRP:N	1:20:A:ASN:O	5	7.38
(4,6)	1:24:A:TRP:N	1:20:A:ASN:O	10	7.38
(5,3)	1:23:A:LEU:H	1:19:A:ARG:O	4	7.35
(4,3)	1:23:A:LEU:H	1:19:A:ARG:O	4	7.35
(5,8)	1:26:A:GLY:N	1:22:A:PRO:O	11	7.34
(4,8)	1:26:A:GLY:N	1:22:A:PRO:O	11	7.34
(5,8)	1:26:A:GLY:N	1:22:A:PRO:O	13	7.31
(4,8)	1:26:A:GLY:N	1:22:A:PRO:O	13	7.31
(5,6)	1:24:A:TRP:N	1:20:A:ASN:O	4	7.3
(4,6)	1:24:A:TRP:N	1:20:A:ASN:O	4	7.3
(5,3)	1:23:A:LEU:H	1:19:A:ARG:O	6	7.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(5,3)	1:23:A:LEU:H	1:19:A:ARG:O	8	7.27
(4,3)	1:23:A:LEU:H	1:19:A:ARG:O	6	7.27
(4,3)	1:23:A:LEU:H	1:19:A:ARG:O	8	7.27
(5,3)	1:23:A:LEU:H	1:19:A:ARG:O	9	7.26
(4,3)	1:23:A:LEU:H	1:19:A:ARG:O	9	7.26
(6,14)	1:1:A:MET:HB2	1:180:A:HIS:H	15	7.25
(5,6)	1:24:A:TRP:N	1:20:A:ASN:O	15	7.25
(4,6)	1:24:A:TRP:N	1:20:A:ASN:O	15	7.25
(5,6)	1:24:A:TRP:N	1:20:A:ASN:O	14	7.22
(4,6)	1:24:A:TRP:N	1:20:A:ASN:O	14	7.22
(5,6)	1:24:A:TRP:N	1:20:A:ASN:O	12	7.21
(4,6)	1:24:A:TRP:N	1:20:A:ASN:O	12	7.21
(5,6)	1:24:A:TRP:N	1:20:A:ASN:O	11	7.19
(5,6)	1:24:A:TRP:N	1:20:A:ASN:O	13	7.19
(4,6)	1:24:A:TRP:N	1:20:A:ASN:O	11	7.19
(4,6)	1:24:A:TRP:N	1:20:A:ASN:O	13	7.19
(5,3)	1:23:A:LEU:H	1:19:A:ARG:O	10	7.16
(4,3)	1:23:A:LEU:H	1:19:A:ARG:O	10	7.16
(5,8)	1:26:A:GLY:N	1:22:A:PRO:O	3	7.13
(4,8)	1:26:A:GLY:N	1:22:A:PRO:O	3	7.13
(5,8)	1:26:A:GLY:N	1:22:A:PRO:O	9	7.07
(4,8)	1:26:A:GLY:N	1:22:A:PRO:O	9	7.07
(5,8)	1:26:A:GLY:N	1:22:A:PRO:O	10	7.05
(4,8)	1:26:A:GLY:N	1:22:A:PRO:O	10	7.05
(5,8)	1:26:A:GLY:N	1:22:A:PRO:O	6	7.02
(5,8)	1:26:A:GLY:N	1:22:A:PRO:O	8	7.02
(4,8)	1:26:A:GLY:N	1:22:A:PRO:O	6	7.02
(4,8)	1:26:A:GLY:N	1:22:A:PRO:O	8	7.02
(5,8)	1:26:A:GLY:N	1:22:A:PRO:O	2	7.0
(5,8)	1:26:A:GLY:N	1:22:A:PRO:O	7	7.0
(4,8)	1:26:A:GLY:N	1:22:A:PRO:O	2	7.0
(4,8)	1:26:A:GLY:N	1:22:A:PRO:O	7	7.0
(5,8)	1:26:A:GLY:N	1:22:A:PRO:O	1	6.99
(4,8)	1:26:A:GLY:N	1:22:A:PRO:O	1	6.99
(5,8)	1:26:A:GLY:N	1:22:A:PRO:O	4	6.93
(4,8)	1:26:A:GLY:N	1:22:A:PRO:O	4	6.93
(5,8)	1:26:A:GLY:N	1:22:A:PRO:O	5	6.89
(4,8)	1:26:A:GLY:N	1:22:A:PRO:O	5	6.89
(6,104)	1:43:A:ASP:HA	1:47:A:LEU:H	9	6.67
(2,94)	1:43:A:ASP:HA	1:47:A:LEU:H	9	6.67
(6,104)	1:43:A:ASP:HA	1:47:A:LEU:H	10	6.62
(2,94)	1:43:A:ASP:HA	1:47:A:LEU:H	10	6.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(5,4)	1:23:A:LEU:N	1:19:A:ARG:O	3	6.58
(4,4)	1:23:A:LEU:N	1:19:A:ARG:O	3	6.58
(5,4)	1:23:A:LEU:N	1:19:A:ARG:O	7	6.57
(4,4)	1:23:A:LEU:N	1:19:A:ARG:O	7	6.57
(6,104)	1:43:A:ASP:HA	1:47:A:LEU:H	7	6.56
(2,94)	1:43:A:ASP:HA	1:47:A:LEU:H	7	6.56
(6,104)	1:43:A:ASP:HA	1:47:A:LEU:H	8	6.5
(2,94)	1:43:A:ASP:HA	1:47:A:LEU:H	8	6.5
(6,104)	1:43:A:ASP:HA	1:47:A:LEU:H	12	6.49
(2,94)	1:43:A:ASP:HA	1:47:A:LEU:H	12	6.49
(6,104)	1:43:A:ASP:HA	1:47:A:LEU:H	5	6.47
(2,94)	1:43:A:ASP:HA	1:47:A:LEU:H	5	6.47
(5,4)	1:23:A:LEU:N	1:19:A:ARG:O	2	6.46
(5,4)	1:23:A:LEU:N	1:19:A:ARG:O	12	6.46
(4,4)	1:23:A:LEU:N	1:19:A:ARG:O	2	6.46
(4,4)	1:23:A:LEU:N	1:19:A:ARG:O	12	6.46
(6,104)	1:43:A:ASP:HA	1:47:A:LEU:H	6	6.44
(5,4)	1:23:A:LEU:N	1:19:A:ARG:O	1	6.44
(4,4)	1:23:A:LEU:N	1:19:A:ARG:O	1	6.44
(2,94)	1:43:A:ASP:HA	1:47:A:LEU:H	6	6.44
(5,4)	1:23:A:LEU:N	1:19:A:ARG:O	15	6.38
(4,4)	1:23:A:LEU:N	1:19:A:ARG:O	15	6.38
(5,4)	1:23:A:LEU:N	1:19:A:ARG:O	5	6.35
(4,4)	1:23:A:LEU:N	1:19:A:ARG:O	5	6.35
(5,4)	1:23:A:LEU:N	1:19:A:ARG:O	14	6.31
(4,4)	1:23:A:LEU:N	1:19:A:ARG:O	14	6.31
(6,104)	1:43:A:ASP:HA	1:47:A:LEU:H	15	6.29
(2,94)	1:43:A:ASP:HA	1:47:A:LEU:H	15	6.29
(5,4)	1:23:A:LEU:N	1:19:A:ARG:O	13	6.28
(4,4)	1:23:A:LEU:N	1:19:A:ARG:O	13	6.28
(6,104)	1:43:A:ASP:HA	1:47:A:LEU:H	2	6.25
(2,94)	1:43:A:ASP:HA	1:47:A:LEU:H	2	6.25
(6,104)	1:43:A:ASP:HA	1:47:A:LEU:H	3	6.24
(6,104)	1:43:A:ASP:HA	1:47:A:LEU:H	13	6.24
(2,94)	1:43:A:ASP:HA	1:47:A:LEU:H	3	6.24
(2,94)	1:43:A:ASP:HA	1:47:A:LEU:H	13	6.24
(6,104)	1:43:A:ASP:HA	1:47:A:LEU:H	4	6.22
(2,94)	1:43:A:ASP:HA	1:47:A:LEU:H	4	6.22
(6,104)	1:43:A:ASP:HA	1:47:A:LEU:H	1	6.21
(2,94)	1:43:A:ASP:HA	1:47:A:LEU:H	1	6.21
(5,4)	1:23:A:LEU:N	1:19:A:ARG:O	4	6.17
(5,4)	1:23:A:LEU:N	1:19:A:ARG:O	11	6.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,4)	1:23:A:LEU:N	1:19:A:ARG:O	4	6.17
(4,4)	1:23:A:LEU:N	1:19:A:ARG:O	11	6.17
(6,104)	1:43:A:ASP:HA	1:47:A:LEU:H	14	6.08
(2,94)	1:43:A:ASP:HA	1:47:A:LEU:H	14	6.08
(6,104)	1:43:A:ASP:HA	1:47:A:LEU:H	11	6.03
(2,94)	1:43:A:ASP:HA	1:47:A:LEU:H	11	6.03
(5,4)	1:23:A:LEU:N	1:19:A:ARG:O	8	5.98
(5,4)	1:23:A:LEU:N	1:19:A:ARG:O	9	5.98
(4,4)	1:23:A:LEU:N	1:19:A:ARG:O	8	5.98
(4,4)	1:23:A:LEU:N	1:19:A:ARG:O	9	5.98
(5,4)	1:23:A:LEU:N	1:19:A:ARG:O	6	5.97
(4,4)	1:23:A:LEU:N	1:19:A:ARG:O	6	5.97
(5,4)	1:23:A:LEU:N	1:19:A:ARG:O	10	5.88
(4,4)	1:23:A:LEU:N	1:19:A:ARG:O	10	5.88
(5,17)	1:85:A:LEU:H	1:81:A:GLY:O	3	5.81
(4,17)	1:85:A:LEU:H	1:81:A:GLY:O	3	5.81
(5,17)	1:85:A:LEU:H	1:81:A:GLY:O	6	5.78
(4,17)	1:85:A:LEU:H	1:81:A:GLY:O	6	5.78
(5,17)	1:85:A:LEU:H	1:81:A:GLY:O	5	5.73
(5,17)	1:85:A:LEU:H	1:81:A:GLY:O	9	5.73
(5,17)	1:85:A:LEU:H	1:81:A:GLY:O	10	5.73
(4,17)	1:85:A:LEU:H	1:81:A:GLY:O	5	5.73
(4,17)	1:85:A:LEU:H	1:81:A:GLY:O	9	5.73
(4,17)	1:85:A:LEU:H	1:81:A:GLY:O	10	5.73
(5,17)	1:85:A:LEU:H	1:81:A:GLY:O	4	5.7
(4,17)	1:85:A:LEU:H	1:81:A:GLY:O	4	5.7
(5,17)	1:85:A:LEU:H	1:81:A:GLY:O	2	5.67
(5,17)	1:85:A:LEU:H	1:81:A:GLY:O	12	5.67
(4,17)	1:85:A:LEU:H	1:81:A:GLY:O	2	5.67
(4,17)	1:85:A:LEU:H	1:81:A:GLY:O	12	5.67
(5,17)	1:85:A:LEU:H	1:81:A:GLY:O	8	5.66
(4,17)	1:85:A:LEU:H	1:81:A:GLY:O	8	5.66
(6,68)	1:31:A:ILE:HD11	1:38:A:VAL:HB	4	5.63
(6,68)	1:31:A:ILE:HD12	1:38:A:VAL:HB	4	5.63
(6,68)	1:31:A:ILE:HD13	1:38:A:VAL:HB	4	5.63
(2,61)	1:31:A:ILE:HD11	1:38:A:VAL:HB	4	5.63
(2,61)	1:31:A:ILE:HD12	1:38:A:VAL:HB	4	5.63
(2,61)	1:31:A:ILE:HD13	1:38:A:VAL:HB	4	5.63
(6,68)	1:31:A:ILE:HD11	1:38:A:VAL:HB	5	5.62
(6,68)	1:31:A:ILE:HD12	1:38:A:VAL:HB	5	5.62
(6,68)	1:31:A:ILE:HD13	1:38:A:VAL:HB	5	5.62
(5,17)	1:85:A:LEU:H	1:81:A:GLY:O	1	5.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,17)	1:85:A:LEU:H	1:81:A:GLY:O	1	5.62
(2,61)	1:31:A:ILE:HD11	1:38:A:VAL:HB	5	5.62
(2,61)	1:31:A:ILE:HD12	1:38:A:VAL:HB	5	5.62
(2,61)	1:31:A:ILE:HD13	1:38:A:VAL:HB	5	5.62
(5,17)	1:85:A:LEU:H	1:81:A:GLY:O	7	5.6
(4,17)	1:85:A:LEU:H	1:81:A:GLY:O	7	5.6
(6,68)	1:31:A:ILE:HD11	1:38:A:VAL:HB	2	5.54
(6,68)	1:31:A:ILE:HD12	1:38:A:VAL:HB	2	5.54
(6,68)	1:31:A:ILE:HD13	1:38:A:VAL:HB	2	5.54
(2,61)	1:31:A:ILE:HD11	1:38:A:VAL:HB	2	5.54
(2,61)	1:31:A:ILE:HD12	1:38:A:VAL:HB	2	5.54
(2,61)	1:31:A:ILE:HD13	1:38:A:VAL:HB	2	5.54
(6,68)	1:31:A:ILE:HD11	1:38:A:VAL:HB	8	5.52
(6,68)	1:31:A:ILE:HD12	1:38:A:VAL:HB	8	5.52
(6,68)	1:31:A:ILE:HD13	1:38:A:VAL:HB	8	5.52
(2,61)	1:31:A:ILE:HD11	1:38:A:VAL:HB	8	5.52
(2,61)	1:31:A:ILE:HD12	1:38:A:VAL:HB	8	5.52
(2,61)	1:31:A:ILE:HD13	1:38:A:VAL:HB	8	5.52
(5,17)	1:85:A:LEU:H	1:81:A:GLY:O	15	5.51
(4,17)	1:85:A:LEU:H	1:81:A:GLY:O	15	5.51
(6,68)	1:31:A:ILE:HD11	1:38:A:VAL:HB	1	5.5
(6,68)	1:31:A:ILE:HD12	1:38:A:VAL:HB	1	5.5
(6,68)	1:31:A:ILE:HD13	1:38:A:VAL:HB	1	5.5
(2,61)	1:31:A:ILE:HD11	1:38:A:VAL:HB	1	5.5
(2,61)	1:31:A:ILE:HD12	1:38:A:VAL:HB	1	5.5
(2,61)	1:31:A:ILE:HD13	1:38:A:VAL:HB	1	5.5
(5,17)	1:85:A:LEU:H	1:81:A:GLY:O	13	5.49
(4,17)	1:85:A:LEU:H	1:81:A:GLY:O	13	5.49
(6,68)	1:31:A:ILE:HD11	1:38:A:VAL:HB	6	5.44
(6,68)	1:31:A:ILE:HD12	1:38:A:VAL:HB	6	5.44
(6,68)	1:31:A:ILE:HD13	1:38:A:VAL:HB	6	5.44
(2,61)	1:31:A:ILE:HD11	1:38:A:VAL:HB	6	5.44
(2,61)	1:31:A:ILE:HD12	1:38:A:VAL:HB	6	5.44
(2,61)	1:31:A:ILE:HD13	1:38:A:VAL:HB	6	5.44
(6,68)	1:31:A:ILE:HD11	1:38:A:VAL:HB	10	5.43
(6,68)	1:31:A:ILE:HD12	1:38:A:VAL:HB	10	5.43
(6,68)	1:31:A:ILE:HD13	1:38:A:VAL:HB	10	5.43
(2,61)	1:31:A:ILE:HD11	1:38:A:VAL:HB	10	5.43
(2,61)	1:31:A:ILE:HD12	1:38:A:VAL:HB	10	5.43
(2,61)	1:31:A:ILE:HD13	1:38:A:VAL:HB	10	5.43
(5,17)	1:85:A:LEU:H	1:81:A:GLY:O	14	5.42
(4,17)	1:85:A:LEU:H	1:81:A:GLY:O	14	5.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(5,17)	1:85:A:LEU:H	1:81:A:GLY:O	11	5.4
(4,17)	1:85:A:LEU:H	1:81:A:GLY:O	11	5.4
(6,68)	1:31:A:ILE:HD11	1:38:A:VAL:HB	9	5.39
(6,68)	1:31:A:ILE:HD12	1:38:A:VAL:HB	9	5.39
(6,68)	1:31:A:ILE:HD13	1:38:A:VAL:HB	9	5.39
(2,61)	1:31:A:ILE:HD11	1:38:A:VAL:HB	9	5.39
(2,61)	1:31:A:ILE:HD12	1:38:A:VAL:HB	9	5.39
(2,61)	1:31:A:ILE:HD13	1:38:A:VAL:HB	9	5.39
(6,68)	1:31:A:ILE:HD11	1:38:A:VAL:HB	3	5.36
(6,68)	1:31:A:ILE:HD12	1:38:A:VAL:HB	3	5.36
(6,68)	1:31:A:ILE:HD13	1:38:A:VAL:HB	3	5.36
(2,61)	1:31:A:ILE:HD11	1:38:A:VAL:HB	3	5.36
(2,61)	1:31:A:ILE:HD12	1:38:A:VAL:HB	3	5.36
(2,61)	1:31:A:ILE:HD13	1:38:A:VAL:HB	3	5.36
(6,68)	1:31:A:ILE:HD11	1:38:A:VAL:HB	7	5.34
(6,68)	1:31:A:ILE:HD12	1:38:A:VAL:HB	7	5.34
(6,68)	1:31:A:ILE:HD13	1:38:A:VAL:HB	7	5.34
(2,61)	1:31:A:ILE:HD11	1:38:A:VAL:HB	7	5.34
(2,61)	1:31:A:ILE:HD12	1:38:A:VAL:HB	7	5.34
(2,61)	1:31:A:ILE:HD13	1:38:A:VAL:HB	7	5.34
(6,68)	1:31:A:ILE:HD11	1:38:A:VAL:HB	15	5.32
(6,68)	1:31:A:ILE:HD12	1:38:A:VAL:HB	15	5.32
(6,68)	1:31:A:ILE:HD13	1:38:A:VAL:HB	15	5.32
(2,61)	1:31:A:ILE:HD11	1:38:A:VAL:HB	15	5.32
(2,61)	1:31:A:ILE:HD12	1:38:A:VAL:HB	15	5.32
(2,61)	1:31:A:ILE:HD13	1:38:A:VAL:HB	15	5.32
(5,18)	1:85:A:LEU:N	1:81:A:GLY:O	3	5.1
(5,18)	1:85:A:LEU:N	1:81:A:GLY:O	6	5.1
(4,18)	1:85:A:LEU:N	1:81:A:GLY:O	3	5.1
(4,18)	1:85:A:LEU:N	1:81:A:GLY:O	6	5.1
(5,18)	1:85:A:LEU:N	1:81:A:GLY:O	5	5.04
(4,18)	1:85:A:LEU:N	1:81:A:GLY:O	5	5.04
(5,18)	1:85:A:LEU:N	1:81:A:GLY:O	9	5.03
(5,18)	1:85:A:LEU:N	1:81:A:GLY:O	10	5.03
(4,18)	1:85:A:LEU:N	1:81:A:GLY:O	9	5.03
(4,18)	1:85:A:LEU:N	1:81:A:GLY:O	10	5.03
(5,18)	1:85:A:LEU:N	1:81:A:GLY:O	4	5.02
(4,18)	1:85:A:LEU:N	1:81:A:GLY:O	4	5.02
(5,18)	1:85:A:LEU:N	1:81:A:GLY:O	2	5.0
(4,18)	1:85:A:LEU:N	1:81:A:GLY:O	2	5.0
(5,18)	1:85:A:LEU:N	1:81:A:GLY:O	8	4.98
(4,18)	1:85:A:LEU:N	1:81:A:GLY:O	8	4.98

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(5,18)	1:85:A:LEU:N	1:81:A:GLY:O	1	4.97
(4,18)	1:85:A:LEU:N	1:81:A:GLY:O	1	4.97
(5,18)	1:85:A:LEU:N	1:81:A:GLY:O	12	4.92
(4,18)	1:85:A:LEU:N	1:81:A:GLY:O	12	4.92
(6,68)	1:31:A:ILE:HD11	1:38:A:VAL:HB	11	4.91
(6,68)	1:31:A:ILE:HD12	1:38:A:VAL:HB	11	4.91
(6,68)	1:31:A:ILE:HD13	1:38:A:VAL:HB	11	4.91
(5,18)	1:85:A:LEU:N	1:81:A:GLY:O	7	4.91
(4,18)	1:85:A:LEU:N	1:81:A:GLY:O	7	4.91
(2,61)	1:31:A:ILE:HD11	1:38:A:VAL:HB	11	4.91
(2,61)	1:31:A:ILE:HD12	1:38:A:VAL:HB	11	4.91
(2,61)	1:31:A:ILE:HD13	1:38:A:VAL:HB	11	4.91
(6,68)	1:31:A:ILE:HD11	1:38:A:VAL:HB	12	4.88
(6,68)	1:31:A:ILE:HD12	1:38:A:VAL:HB	12	4.88
(6,68)	1:31:A:ILE:HD13	1:38:A:VAL:HB	12	4.88
(6,68)	1:31:A:ILE:HD11	1:38:A:VAL:HB	14	4.88
(6,68)	1:31:A:ILE:HD12	1:38:A:VAL:HB	14	4.88
(6,68)	1:31:A:ILE:HD13	1:38:A:VAL:HB	14	4.88
(2,61)	1:31:A:ILE:HD11	1:38:A:VAL:HB	12	4.88
(2,61)	1:31:A:ILE:HD12	1:38:A:VAL:HB	12	4.88
(2,61)	1:31:A:ILE:HD13	1:38:A:VAL:HB	12	4.88
(2,61)	1:31:A:ILE:HD11	1:38:A:VAL:HB	14	4.88
(2,61)	1:31:A:ILE:HD12	1:38:A:VAL:HB	14	4.88
(2,61)	1:31:A:ILE:HD13	1:38:A:VAL:HB	14	4.88
(6,68)	1:31:A:ILE:HD11	1:38:A:VAL:HB	13	4.86
(6,68)	1:31:A:ILE:HD12	1:38:A:VAL:HB	13	4.86
(6,68)	1:31:A:ILE:HD13	1:38:A:VAL:HB	13	4.86
(2,61)	1:31:A:ILE:HD11	1:38:A:VAL:HB	13	4.86
(2,61)	1:31:A:ILE:HD12	1:38:A:VAL:HB	13	4.86
(2,61)	1:31:A:ILE:HD13	1:38:A:VAL:HB	13	4.86
(6,185)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD21	3	4.82
(6,185)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD22	3	4.82
(6,185)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD23	3	4.82
(5,18)	1:85:A:LEU:N	1:81:A:GLY:O	15	4.82
(4,18)	1:85:A:LEU:N	1:81:A:GLY:O	15	4.82
(2,164)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD21	3	4.82
(2,164)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD22	3	4.82
(2,164)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD23	3	4.82
(5,18)	1:85:A:LEU:N	1:81:A:GLY:O	13	4.8
(4,18)	1:85:A:LEU:N	1:81:A:GLY:O	13	4.8
(6,185)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD21	10	4.75
(6,185)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD22	10	4.75

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(6,185)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD23	10	4.75
(2,164)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD21	10	4.75
(2,164)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD22	10	4.75
(2,164)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD23	10	4.75
(6,185)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD21	12	4.73
(6,185)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD22	12	4.73
(6,185)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD23	12	4.73
(2,164)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD21	12	4.73
(2,164)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD22	12	4.73
(2,164)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD23	12	4.73
(6,185)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD21	9	4.72
(6,185)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD22	9	4.72
(6,185)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD23	9	4.72
(5,18)	1:85:A:LEU:N	1:81:A:GLY:O	14	4.72
(4,18)	1:85:A:LEU:N	1:81:A:GLY:O	14	4.72
(2,164)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD21	9	4.72
(2,164)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD22	9	4.72
(2,164)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD23	9	4.72
(6,185)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD21	2	4.71
(6,185)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD22	2	4.71
(6,185)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD23	2	4.71
(6,185)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD21	15	4.71
(6,185)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD22	15	4.71
(6,185)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD23	15	4.71
(5,18)	1:85:A:LEU:N	1:81:A:GLY:O	11	4.71
(4,18)	1:85:A:LEU:N	1:81:A:GLY:O	11	4.71
(2,164)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD21	2	4.71
(2,164)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD22	2	4.71
(2,164)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD23	2	4.71
(2,164)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD21	15	4.71
(2,164)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD22	15	4.71
(2,164)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD23	15	4.71
(6,185)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD21	7	4.7
(6,185)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD22	7	4.7
(6,185)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD23	7	4.7
(2,164)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD21	7	4.7
(2,164)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD22	7	4.7
(2,164)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD23	7	4.7
(6,185)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD21	8	4.67
(6,185)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD22	8	4.67
(6,185)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD23	8	4.67
(2,164)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD21	8	4.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,164)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD22	8	4.67
(2,164)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD23	8	4.67
(6,185)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD21	6	4.65
(6,185)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD22	6	4.65
(6,185)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD23	6	4.65
(2,164)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD21	6	4.65
(2,164)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD22	6	4.65
(2,164)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD23	6	4.65
(6,185)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD21	5	4.62
(6,185)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD22	5	4.62
(6,185)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD23	5	4.62
(2,164)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD21	5	4.62
(2,164)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD22	5	4.62
(2,164)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD23	5	4.62
(6,185)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD21	1	4.6
(6,185)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD22	1	4.6
(6,185)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD23	1	4.6
(6,185)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD21	4	4.6
(6,185)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD22	4	4.6
(6,185)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD23	4	4.6
(2,164)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD21	1	4.6
(2,164)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD22	1	4.6
(2,164)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD23	1	4.6
(2,164)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD21	4	4.6
(2,164)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD22	4	4.6
(2,164)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD23	4	4.6
(6,185)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD21	14	4.5
(6,185)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD22	14	4.5
(6,185)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD23	14	4.5
(2,164)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD21	14	4.5
(2,164)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD22	14	4.5
(2,164)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD23	14	4.5
(6,185)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD21	11	4.47
(6,185)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD22	11	4.47
(6,185)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD23	11	4.47
(2,164)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD21	11	4.47
(2,164)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD22	11	4.47
(2,164)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD23	11	4.47
(6,185)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD21	13	4.44
(6,185)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD22	13	4.44
(6,185)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD23	13	4.44
(2,164)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD21	13	4.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,164)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD22	13	4.44
(2,164)	1:82:A:ASP:HA	1:85:A:LEU:HD23	13	4.44
(6,105)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD11	11	4.28
(6,105)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD12	11	4.28
(6,105)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD13	11	4.28
(2,95)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD11	11	4.28
(2,95)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD12	11	4.28
(2,95)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD13	11	4.28
(6,105)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD11	13	4.27
(6,105)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD12	13	4.27
(6,105)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD13	13	4.27
(2,95)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD11	13	4.27
(2,95)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD12	13	4.27
(2,95)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD13	13	4.27
(6,105)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD11	15	4.25
(6,105)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD12	15	4.25
(6,105)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD13	15	4.25
(2,95)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD11	15	4.25
(2,95)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD12	15	4.25
(2,95)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD13	15	4.25
(6,105)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD11	14	4.11
(6,105)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD12	14	4.11
(6,105)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD13	14	4.11
(2,95)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD11	14	4.11
(2,95)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD12	14	4.11
(2,95)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD13	14	4.11
(6,105)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD11	12	3.96
(6,105)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD12	12	3.96
(6,105)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD13	12	3.96
(6,28)	1:9:A:ILE:HD11	1:11:A:LYS:HG2	11	3.96
(6,28)	1:9:A:ILE:HD12	1:11:A:LYS:HG2	11	3.96
(6,28)	1:9:A:ILE:HD13	1:11:A:LYS:HG2	11	3.96
(2,95)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD11	12	3.96
(2,95)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD12	12	3.96
(2,95)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD13	12	3.96
(2,27)	1:9:A:ILE:HD11	1:11:A:LYS:HG2	11	3.96
(2,27)	1:9:A:ILE:HD12	1:11:A:LYS:HG2	11	3.96
(2,27)	1:9:A:ILE:HD13	1:11:A:LYS:HG2	11	3.96
(6,28)	1:9:A:ILE:HD11	1:11:A:LYS:HG2	13	3.95
(6,28)	1:9:A:ILE:HD12	1:11:A:LYS:HG2	13	3.95
(6,28)	1:9:A:ILE:HD13	1:11:A:LYS:HG2	13	3.95
(2,27)	1:9:A:ILE:HD11	1:11:A:LYS:HG2	13	3.95

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,27)	1:9:A:ILE:HD12	1:11:A:LYS:HG2	13	3.95
(2,27)	1:9:A:ILE:HD13	1:11:A:LYS:HG2	13	3.95
(6,28)	1:9:A:ILE:HD11	1:11:A:LYS:HG2	12	3.94
(6,28)	1:9:A:ILE:HD12	1:11:A:LYS:HG2	12	3.94
(6,28)	1:9:A:ILE:HD13	1:11:A:LYS:HG2	12	3.94
(6,28)	1:9:A:ILE:HD11	1:11:A:LYS:HG2	14	3.94
(6,28)	1:9:A:ILE:HD12	1:11:A:LYS:HG2	14	3.94
(6,28)	1:9:A:ILE:HD13	1:11:A:LYS:HG2	14	3.94
(2,27)	1:9:A:ILE:HD11	1:11:A:LYS:HG2	12	3.94
(2,27)	1:9:A:ILE:HD12	1:11:A:LYS:HG2	12	3.94
(2,27)	1:9:A:ILE:HD13	1:11:A:LYS:HG2	12	3.94
(2,27)	1:9:A:ILE:HD11	1:11:A:LYS:HG2	14	3.94
(2,27)	1:9:A:ILE:HD12	1:11:A:LYS:HG2	14	3.94
(2,27)	1:9:A:ILE:HD13	1:11:A:LYS:HG2	14	3.94
(6,28)	1:9:A:ILE:HD11	1:11:A:LYS:HG2	15	3.92
(6,28)	1:9:A:ILE:HD12	1:11:A:LYS:HG2	15	3.92
(6,28)	1:9:A:ILE:HD13	1:11:A:LYS:HG2	15	3.92
(2,27)	1:9:A:ILE:HD11	1:11:A:LYS:HG2	15	3.92
(2,27)	1:9:A:ILE:HD12	1:11:A:LYS:HG2	15	3.92
(2,27)	1:9:A:ILE:HD13	1:11:A:LYS:HG2	15	3.92
(6,105)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD11	5	3.9
(6,105)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD12	5	3.9
(6,105)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD13	5	3.9
(6,67)	1:31:A:ILE:HD11	1:37:A:ARG:H	2	3.9
(6,67)	1:31:A:ILE:HD12	1:37:A:ARG:H	2	3.9
(6,67)	1:31:A:ILE:HD13	1:37:A:ARG:H	2	3.9
(2,95)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD11	5	3.9
(2,95)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD12	5	3.9
(2,95)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD13	5	3.9
(2,60)	1:31:A:ILE:HD11	1:37:A:ARG:H	2	3.9
(2,60)	1:31:A:ILE:HD12	1:37:A:ARG:H	2	3.9
(2,60)	1:31:A:ILE:HD13	1:37:A:ARG:H	2	3.9
(6,118)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD11	11	3.88
(6,118)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD12	11	3.88
(6,118)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD13	11	3.88
(6,28)	1:9:A:ILE:HD11	1:11:A:LYS:HG2	3	3.88
(6,28)	1:9:A:ILE:HD12	1:11:A:LYS:HG2	3	3.88
(6,28)	1:9:A:ILE:HD13	1:11:A:LYS:HG2	3	3.88
(3,8)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD11	11	3.88
(3,8)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD12	11	3.88
(3,8)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD13	11	3.88
(2,27)	1:9:A:ILE:HD11	1:11:A:LYS:HG2	3	3.88

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,27)	1:9:A:ILE:HD12	1:11:A:LYS:HG2	3	3.88
(2,27)	1:9:A:ILE:HD13	1:11:A:LYS:HG2	3	3.88
(6,28)	1:9:A:ILE:HD11	1:11:A:LYS:HG2	6	3.86
(6,28)	1:9:A:ILE:HD12	1:11:A:LYS:HG2	6	3.86
(6,28)	1:9:A:ILE:HD13	1:11:A:LYS:HG2	6	3.86
(2,27)	1:9:A:ILE:HD11	1:11:A:LYS:HG2	6	3.86
(2,27)	1:9:A:ILE:HD12	1:11:A:LYS:HG2	6	3.86
(2,27)	1:9:A:ILE:HD13	1:11:A:LYS:HG2	6	3.86
(6,28)	1:9:A:ILE:HD11	1:11:A:LYS:HG2	1	3.85
(6,28)	1:9:A:ILE:HD12	1:11:A:LYS:HG2	1	3.85
(6,28)	1:9:A:ILE:HD13	1:11:A:LYS:HG2	1	3.85
(6,28)	1:9:A:ILE:HD11	1:11:A:LYS:HG2	4	3.85
(6,28)	1:9:A:ILE:HD12	1:11:A:LYS:HG2	4	3.85
(6,28)	1:9:A:ILE:HD13	1:11:A:LYS:HG2	4	3.85
(6,28)	1:9:A:ILE:HD11	1:11:A:LYS:HG2	10	3.85
(6,28)	1:9:A:ILE:HD12	1:11:A:LYS:HG2	10	3.85
(6,28)	1:9:A:ILE:HD13	1:11:A:LYS:HG2	10	3.85
(2,27)	1:9:A:ILE:HD11	1:11:A:LYS:HG2	1	3.85
(2,27)	1:9:A:ILE:HD12	1:11:A:LYS:HG2	1	3.85
(2,27)	1:9:A:ILE:HD13	1:11:A:LYS:HG2	1	3.85
(2,27)	1:9:A:ILE:HD11	1:11:A:LYS:HG2	4	3.85
(2,27)	1:9:A:ILE:HD12	1:11:A:LYS:HG2	4	3.85
(2,27)	1:9:A:ILE:HD13	1:11:A:LYS:HG2	4	3.85
(2,27)	1:9:A:ILE:HD11	1:11:A:LYS:HG2	10	3.85
(2,27)	1:9:A:ILE:HD12	1:11:A:LYS:HG2	10	3.85
(2,27)	1:9:A:ILE:HD13	1:11:A:LYS:HG2	10	3.85
(6,28)	1:9:A:ILE:HD11	1:11:A:LYS:HG2	7	3.84
(6,28)	1:9:A:ILE:HD12	1:11:A:LYS:HG2	7	3.84
(6,28)	1:9:A:ILE:HD13	1:11:A:LYS:HG2	7	3.84
(6,28)	1:9:A:ILE:HD11	1:11:A:LYS:HG2	8	3.84
(6,28)	1:9:A:ILE:HD12	1:11:A:LYS:HG2	8	3.84
(6,28)	1:9:A:ILE:HD13	1:11:A:LYS:HG2	8	3.84
(2,27)	1:9:A:ILE:HD11	1:11:A:LYS:HG2	7	3.84
(2,27)	1:9:A:ILE:HD12	1:11:A:LYS:HG2	7	3.84
(2,27)	1:9:A:ILE:HD13	1:11:A:LYS:HG2	7	3.84
(2,27)	1:9:A:ILE:HD11	1:11:A:LYS:HG2	8	3.84
(2,27)	1:9:A:ILE:HD12	1:11:A:LYS:HG2	8	3.84
(2,27)	1:9:A:ILE:HD13	1:11:A:LYS:HG2	8	3.84
(6,28)	1:9:A:ILE:HD11	1:11:A:LYS:HG2	2	3.83
(6,28)	1:9:A:ILE:HD12	1:11:A:LYS:HG2	2	3.83
(6,28)	1:9:A:ILE:HD13	1:11:A:LYS:HG2	2	3.83
(6,28)	1:9:A:ILE:HD11	1:11:A:LYS:HG2	9	3.83

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(6,28)	1:9:A:ILE:HD12	1:11:A:LYS:HG2	9	3.83
(6,28)	1:9:A:ILE:HD13	1:11:A:LYS:HG2	9	3.83
(2,27)	1:9:A:ILE:HD11	1:11:A:LYS:HG2	2	3.83
(2,27)	1:9:A:ILE:HD12	1:11:A:LYS:HG2	2	3.83
(2,27)	1:9:A:ILE:HD13	1:11:A:LYS:HG2	2	3.83
(2,27)	1:9:A:ILE:HD11	1:11:A:LYS:HG2	9	3.83
(2,27)	1:9:A:ILE:HD12	1:11:A:LYS:HG2	9	3.83
(2,27)	1:9:A:ILE:HD13	1:11:A:LYS:HG2	9	3.83
(6,28)	1:9:A:ILE:HD11	1:11:A:LYS:HG2	5	3.82
(6,28)	1:9:A:ILE:HD12	1:11:A:LYS:HG2	5	3.82
(6,28)	1:9:A:ILE:HD13	1:11:A:LYS:HG2	5	3.82
(2,27)	1:9:A:ILE:HD11	1:11:A:LYS:HG2	5	3.82
(2,27)	1:9:A:ILE:HD12	1:11:A:LYS:HG2	5	3.82
(2,27)	1:9:A:ILE:HD13	1:11:A:LYS:HG2	5	3.82
(6,67)	1:31:A:ILE:HD11	1:37:A:ARG:H	3	3.8
(6,67)	1:31:A:ILE:HD12	1:37:A:ARG:H	3	3.8
(6,67)	1:31:A:ILE:HD13	1:37:A:ARG:H	3	3.8
(2,60)	1:31:A:ILE:HD11	1:37:A:ARG:H	3	3.8
(2,60)	1:31:A:ILE:HD12	1:37:A:ARG:H	3	3.8
(2,60)	1:31:A:ILE:HD13	1:37:A:ARG:H	3	3.8
(6,67)	1:31:A:ILE:HD11	1:37:A:ARG:H	4	3.78
(6,67)	1:31:A:ILE:HD12	1:37:A:ARG:H	4	3.78
(6,67)	1:31:A:ILE:HD13	1:37:A:ARG:H	4	3.78
(2,60)	1:31:A:ILE:HD11	1:37:A:ARG:H	4	3.78
(2,60)	1:31:A:ILE:HD12	1:37:A:ARG:H	4	3.78
(2,60)	1:31:A:ILE:HD13	1:37:A:ARG:H	4	3.78
(6,67)	1:31:A:ILE:HD11	1:37:A:ARG:H	11	3.77
(6,67)	1:31:A:ILE:HD12	1:37:A:ARG:H	11	3.77
(6,67)	1:31:A:ILE:HD13	1:37:A:ARG:H	11	3.77
(6,67)	1:31:A:ILE:HD11	1:37:A:ARG:H	14	3.77
(6,67)	1:31:A:ILE:HD12	1:37:A:ARG:H	14	3.77
(6,67)	1:31:A:ILE:HD13	1:37:A:ARG:H	14	3.77
(2,60)	1:31:A:ILE:HD11	1:37:A:ARG:H	11	3.77
(2,60)	1:31:A:ILE:HD12	1:37:A:ARG:H	11	3.77
(2,60)	1:31:A:ILE:HD13	1:37:A:ARG:H	11	3.77
(2,60)	1:31:A:ILE:HD11	1:37:A:ARG:H	14	3.77
(2,60)	1:31:A:ILE:HD12	1:37:A:ARG:H	14	3.77
(2,60)	1:31:A:ILE:HD13	1:37:A:ARG:H	14	3.77
(6,67)	1:31:A:ILE:HD11	1:37:A:ARG:H	5	3.75
(6,67)	1:31:A:ILE:HD12	1:37:A:ARG:H	5	3.75
(6,67)	1:31:A:ILE:HD13	1:37:A:ARG:H	5	3.75
(2,60)	1:31:A:ILE:HD11	1:37:A:ARG:H	5	3.75

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,60)	1:31:A:ILE:HD12	1:37:A:ARG:H	5	3.75
(2,60)	1:31:A:ILE:HD13	1:37:A:ARG:H	5	3.75
(6,67)	1:31:A:ILE:HD11	1:37:A:ARG:H	1	3.74
(6,67)	1:31:A:ILE:HD12	1:37:A:ARG:H	1	3.74
(6,67)	1:31:A:ILE:HD13	1:37:A:ARG:H	1	3.74
(6,67)	1:31:A:ILE:HD11	1:37:A:ARG:H	15	3.74
(6,67)	1:31:A:ILE:HD12	1:37:A:ARG:H	15	3.74
(6,67)	1:31:A:ILE:HD13	1:37:A:ARG:H	15	3.74
(2,60)	1:31:A:ILE:HD11	1:37:A:ARG:H	1	3.74
(2,60)	1:31:A:ILE:HD12	1:37:A:ARG:H	1	3.74
(2,60)	1:31:A:ILE:HD13	1:37:A:ARG:H	1	3.74
(2,60)	1:31:A:ILE:HD11	1:37:A:ARG:H	15	3.74
(2,60)	1:31:A:ILE:HD12	1:37:A:ARG:H	15	3.74
(2,60)	1:31:A:ILE:HD13	1:37:A:ARG:H	15	3.74
(6,67)	1:31:A:ILE:HD11	1:37:A:ARG:H	7	3.73
(6,67)	1:31:A:ILE:HD12	1:37:A:ARG:H	7	3.73
(6,67)	1:31:A:ILE:HD13	1:37:A:ARG:H	7	3.73
(2,60)	1:31:A:ILE:HD11	1:37:A:ARG:H	7	3.73
(2,60)	1:31:A:ILE:HD12	1:37:A:ARG:H	7	3.73
(2,60)	1:31:A:ILE:HD13	1:37:A:ARG:H	7	3.73
(6,67)	1:31:A:ILE:HD11	1:37:A:ARG:H	10	3.72
(6,67)	1:31:A:ILE:HD12	1:37:A:ARG:H	10	3.72
(6,67)	1:31:A:ILE:HD13	1:37:A:ARG:H	10	3.72
(6,67)	1:31:A:ILE:HD11	1:37:A:ARG:H	13	3.72
(6,67)	1:31:A:ILE:HD12	1:37:A:ARG:H	13	3.72
(6,67)	1:31:A:ILE:HD13	1:37:A:ARG:H	13	3.72
(2,60)	1:31:A:ILE:HD11	1:37:A:ARG:H	10	3.72
(2,60)	1:31:A:ILE:HD12	1:37:A:ARG:H	10	3.72
(2,60)	1:31:A:ILE:HD13	1:37:A:ARG:H	10	3.72
(2,60)	1:31:A:ILE:HD11	1:37:A:ARG:H	13	3.72
(2,60)	1:31:A:ILE:HD12	1:37:A:ARG:H	13	3.72
(2,60)	1:31:A:ILE:HD13	1:37:A:ARG:H	13	3.72
(6,118)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD11	14	3.7
(6,118)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD12	14	3.7
(6,118)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD13	14	3.7
(6,105)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD11	2	3.7
(6,105)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD12	2	3.7
(6,105)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD13	2	3.7
(3,8)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD11	14	3.7
(3,8)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD12	14	3.7
(3,8)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD13	14	3.7
(2,95)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD11	2	3.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,95)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD12	2	3.7
(2,95)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD13	2	3.7
(6,105)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD11	1	3.69
(6,105)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD12	1	3.69
(6,105)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD13	1	3.69
(6,67)	1:31:A:ILE:HD11	1:37:A:ARG:H	9	3.69
(6,67)	1:31:A:ILE:HD12	1:37:A:ARG:H	9	3.69
(6,67)	1:31:A:ILE:HD13	1:37:A:ARG:H	9	3.69
(2,95)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD11	1	3.69
(2,95)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD12	1	3.69
(2,95)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD13	1	3.69
(2,60)	1:31:A:ILE:HD11	1:37:A:ARG:H	9	3.69
(2,60)	1:31:A:ILE:HD12	1:37:A:ARG:H	9	3.69
(2,60)	1:31:A:ILE:HD13	1:37:A:ARG:H	9	3.69
(6,67)	1:31:A:ILE:HD11	1:37:A:ARG:H	6	3.68
(6,67)	1:31:A:ILE:HD12	1:37:A:ARG:H	6	3.68
(6,67)	1:31:A:ILE:HD13	1:37:A:ARG:H	6	3.68
(6,67)	1:31:A:ILE:HD11	1:37:A:ARG:H	8	3.68
(6,67)	1:31:A:ILE:HD12	1:37:A:ARG:H	8	3.68
(6,67)	1:31:A:ILE:HD13	1:37:A:ARG:H	8	3.68
(2,60)	1:31:A:ILE:HD11	1:37:A:ARG:H	6	3.68
(2,60)	1:31:A:ILE:HD12	1:37:A:ARG:H	6	3.68
(2,60)	1:31:A:ILE:HD13	1:37:A:ARG:H	6	3.68
(2,60)	1:31:A:ILE:HD11	1:37:A:ARG:H	8	3.68
(2,60)	1:31:A:ILE:HD12	1:37:A:ARG:H	8	3.68
(2,60)	1:31:A:ILE:HD13	1:37:A:ARG:H	8	3.68
(6,118)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD11	15	3.67
(6,118)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD12	15	3.67
(6,118)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD13	15	3.67
(6,67)	1:31:A:ILE:HD11	1:37:A:ARG:H	12	3.67
(6,67)	1:31:A:ILE:HD12	1:37:A:ARG:H	12	3.67
(6,67)	1:31:A:ILE:HD13	1:37:A:ARG:H	12	3.67
(3,8)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD11	15	3.67
(3,8)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD12	15	3.67
(3,8)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD13	15	3.67
(2,60)	1:31:A:ILE:HD11	1:37:A:ARG:H	12	3.67
(2,60)	1:31:A:ILE:HD12	1:37:A:ARG:H	12	3.67
(2,60)	1:31:A:ILE:HD13	1:37:A:ARG:H	12	3.67
(6,105)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD11	4	3.66
(6,105)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD12	4	3.66
(6,105)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD13	4	3.66
(2,95)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD11	4	3.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,95)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD12	4	3.66
(2,95)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD13	4	3.66
(6,118)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD11	13	3.65
(6,118)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD12	13	3.65
(6,118)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD13	13	3.65
(3,8)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD11	13	3.65
(3,8)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD12	13	3.65
(3,8)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD13	13	3.65
(6,105)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD11	3	3.64
(6,105)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD12	3	3.64
(6,105)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD13	3	3.64
(2,95)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD11	3	3.64
(2,95)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD12	3	3.64
(2,95)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD13	3	3.64
(6,118)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD11	12	3.6
(6,118)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD12	12	3.6
(6,118)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD13	12	3.6
(3,8)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD11	12	3.6
(3,8)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD12	12	3.6
(3,8)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD13	12	3.6
(6,5)	1:1:A:MET:HB2	1:3:A:THR:HG1	4	3.57
(2,5)	1:1:A:MET:HB2	1:3:A:THR:HG1	4	3.57
(6,161)	1:69:A:MET:HG2	1:71:A:GLU:H	2	3.5
(2,142)	1:69:A:MET:HG2	1:71:A:GLU:H	2	3.5
(6,161)	1:69:A:MET:HG2	1:71:A:GLU:H	4	3.48
(2,142)	1:69:A:MET:HG2	1:71:A:GLU:H	4	3.48
(6,161)	1:69:A:MET:HG2	1:71:A:GLU:H	5	3.46
(2,142)	1:69:A:MET:HG2	1:71:A:GLU:H	5	3.46
(6,161)	1:69:A:MET:HG2	1:71:A:GLU:H	1	3.44
(2,142)	1:69:A:MET:HG2	1:71:A:GLU:H	1	3.44
(6,161)	1:69:A:MET:HG2	1:71:A:GLU:H	3	3.43
(6,5)	1:1:A:MET:HB2	1:3:A:THR:HG1	7	3.43
(2,142)	1:69:A:MET:HG2	1:71:A:GLU:H	3	3.43
(2,5)	1:1:A:MET:HB2	1:3:A:THR:HG1	7	3.43
(6,5)	1:1:A:MET:HB2	1:3:A:THR:HG1	8	3.38
(2,5)	1:1:A:MET:HB2	1:3:A:THR:HG1	8	3.38
(6,5)	1:1:A:MET:HB2	1:3:A:THR:HG1	1	3.32
(2,5)	1:1:A:MET:HB2	1:3:A:THR:HG1	1	3.32
(6,161)	1:69:A:MET:HG2	1:71:A:GLU:H	13	3.3
(2,142)	1:69:A:MET:HG2	1:71:A:GLU:H	13	3.3
(6,161)	1:69:A:MET:HG2	1:71:A:GLU:H	11	3.27
(2,142)	1:69:A:MET:HG2	1:71:A:GLU:H	11	3.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,24)	1:33:A:ALA:O	1:114:A:VAL:N	13	3.22
(6,161)	1:69:A:MET:HG2	1:71:A:GLU:H	6	3.2
(6,161)	1:69:A:MET:HG2	1:71:A:GLU:H	8	3.2
(2,142)	1:69:A:MET:HG2	1:71:A:GLU:H	6	3.2
(2,142)	1:69:A:MET:HG2	1:71:A:GLU:H	8	3.2
(1,24)	1:33:A:ALA:O	1:114:A:VAL:N	14	3.2
(6,161)	1:69:A:MET:HG2	1:71:A:GLU:H	7	3.19
(6,161)	1:69:A:MET:HG2	1:71:A:GLU:H	10	3.19
(2,142)	1:69:A:MET:HG2	1:71:A:GLU:H	7	3.19
(2,142)	1:69:A:MET:HG2	1:71:A:GLU:H	10	3.19
(6,161)	1:69:A:MET:HG2	1:71:A:GLU:H	9	3.18
(2,142)	1:69:A:MET:HG2	1:71:A:GLU:H	9	3.18
(1,24)	1:33:A:ALA:O	1:114:A:VAL:N	12	3.18
(6,105)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD11	10	3.17
(6,105)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD12	10	3.17
(6,105)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD13	10	3.17
(2,95)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD11	10	3.17
(2,95)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD12	10	3.17
(2,95)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD13	10	3.17
(6,5)	1:1:A:MET:HB2	1:3:A:THR:HG1	10	3.16
(2,5)	1:1:A:MET:HB2	1:3:A:THR:HG1	10	3.16
(6,105)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD11	7	3.14
(6,105)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD12	7	3.14
(6,105)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD13	7	3.14
(2,95)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD11	7	3.14
(2,95)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD12	7	3.14
(2,95)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD13	7	3.14
(6,105)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD11	6	3.13
(6,105)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD12	6	3.13
(6,105)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD13	6	3.13
(6,5)	1:1:A:MET:HB2	1:3:A:THR:HG1	2	3.13
(6,5)	1:1:A:MET:HB2	1:3:A:THR:HG1	6	3.13
(2,95)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD11	6	3.13
(2,95)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD12	6	3.13
(2,95)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD13	6	3.13
(2,5)	1:1:A:MET:HB2	1:3:A:THR:HG1	2	3.13
(2,5)	1:1:A:MET:HB2	1:3:A:THR:HG1	6	3.13
(6,161)	1:69:A:MET:HG2	1:71:A:GLU:H	12	3.12
(2,142)	1:69:A:MET:HG2	1:71:A:GLU:H	12	3.12
(6,5)	1:1:A:MET:HB2	1:3:A:THR:HG1	3	3.11
(2,5)	1:1:A:MET:HB2	1:3:A:THR:HG1	3	3.11
(1,24)	1:33:A:ALA:O	1:114:A:VAL:N	11	3.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,24)	1:33:A:ALA:O	1:114:A:VAL:N	15	3.11
(6,72)	1:34:A:ARG:HG3	1:36:A:GLY:HA3	13	3.09
(2,65)	1:34:A:ARG:HG3	1:36:A:GLY:HA3	13	3.09
(6,72)	1:34:A:ARG:HG3	1:36:A:GLY:HA3	15	3.08
(2,65)	1:34:A:ARG:HG3	1:36:A:GLY:HA3	15	3.08
(6,161)	1:69:A:MET:HG2	1:71:A:GLU:H	14	3.06
(6,105)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD11	8	3.06
(6,105)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD12	8	3.06
(6,105)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD13	8	3.06
(6,72)	1:34:A:ARG:HG3	1:36:A:GLY:HA3	12	3.06
(2,142)	1:69:A:MET:HG2	1:71:A:GLU:H	14	3.06
(2,95)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD11	8	3.06
(2,95)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD12	8	3.06
(2,95)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD13	8	3.06
(2,65)	1:34:A:ARG:HG3	1:36:A:GLY:HA3	12	3.06
(6,72)	1:34:A:ARG:HG3	1:36:A:GLY:HA3	11	3.05
(2,65)	1:34:A:ARG:HG3	1:36:A:GLY:HA3	11	3.05
(6,72)	1:34:A:ARG:HG3	1:36:A:GLY:HA3	14	3.01
(6,5)	1:1:A:MET:HB2	1:3:A:THR:HG1	9	3.01
(2,65)	1:34:A:ARG:HG3	1:36:A:GLY:HA3	14	3.01
(2,5)	1:1:A:MET:HB2	1:3:A:THR:HG1	9	3.01
(6,105)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD11	9	3.0
(6,105)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD12	9	3.0
(6,105)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD13	9	3.0
(2,95)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD11	9	3.0
(2,95)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD12	9	3.0
(2,95)	1:44:A:ASP:HB2	1:47:A:LEU:HD13	9	3.0
(6,161)	1:69:A:MET:HG2	1:71:A:GLU:H	15	2.99
(6,72)	1:34:A:ARG:HG3	1:36:A:GLY:HA3	4	2.99
(2,142)	1:69:A:MET:HG2	1:71:A:GLU:H	15	2.99
(2,65)	1:34:A:ARG:HG3	1:36:A:GLY:HA3	4	2.99
(6,72)	1:34:A:ARG:HG3	1:36:A:GLY:HA3	1	2.98
(2,65)	1:34:A:ARG:HG3	1:36:A:GLY:HA3	1	2.98
(6,72)	1:34:A:ARG:HG3	1:36:A:GLY:HA3	2	2.97
(2,65)	1:34:A:ARG:HG3	1:36:A:GLY:HA3	2	2.97
(6,72)	1:34:A:ARG:HG3	1:36:A:GLY:HA3	3	2.96
(6,72)	1:34:A:ARG:HG3	1:36:A:GLY:HA3	5	2.96
(2,65)	1:34:A:ARG:HG3	1:36:A:GLY:HA3	3	2.96
(2,65)	1:34:A:ARG:HG3	1:36:A:GLY:HA3	5	2.96
(6,5)	1:1:A:MET:HB2	1:3:A:THR:HG1	5	2.94
(2,5)	1:1:A:MET:HB2	1:3:A:THR:HG1	5	2.94
(6,208)	1:99:A:ILE:HG13	1:101:A:GLU:H	13	2.92

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,184)	1:99:A:ILE:HG13	1:101:A:GLU:H	13	2.92
(6,208)	1:99:A:ILE:HG13	1:101:A:GLU:H	9	2.91
(2,184)	1:99:A:ILE:HG13	1:101:A:GLU:H	9	2.91
(6,208)	1:99:A:ILE:HG13	1:101:A:GLU:H	4	2.9
(2,184)	1:99:A:ILE:HG13	1:101:A:GLU:H	4	2.9
(6,208)	1:99:A:ILE:HG13	1:101:A:GLU:H	10	2.88
(6,208)	1:99:A:ILE:HG13	1:101:A:GLU:H	14	2.88
(2,184)	1:99:A:ILE:HG13	1:101:A:GLU:H	10	2.88
(2,184)	1:99:A:ILE:HG13	1:101:A:GLU:H	14	2.88
(6,208)	1:99:A:ILE:HG13	1:101:A:GLU:H	3	2.87
(6,208)	1:99:A:ILE:HG13	1:101:A:GLU:H	5	2.87
(6,208)	1:99:A:ILE:HG13	1:101:A:GLU:H	12	2.87
(6,208)	1:99:A:ILE:HG13	1:101:A:GLU:H	15	2.87
(2,184)	1:99:A:ILE:HG13	1:101:A:GLU:H	3	2.87
(2,184)	1:99:A:ILE:HG13	1:101:A:GLU:H	5	2.87
(2,184)	1:99:A:ILE:HG13	1:101:A:GLU:H	12	2.87
(2,184)	1:99:A:ILE:HG13	1:101:A:GLU:H	15	2.87
(6,223)	1:111:A:ALA:H	1:112:A:GLU:HG2	6	2.86
(6,208)	1:99:A:ILE:HG13	1:101:A:GLU:H	11	2.86
(2,198)	1:111:A:ALA:H	1:112:A:GLU:HG2	6	2.86
(2,184)	1:99:A:ILE:HG13	1:101:A:GLU:H	11	2.86
(6,223)	1:111:A:ALA:H	1:112:A:GLU:HG2	9	2.85
(2,198)	1:111:A:ALA:H	1:112:A:GLU:HG2	9	2.85
(6,223)	1:111:A:ALA:H	1:112:A:GLU:HG2	8	2.84
(6,208)	1:99:A:ILE:HG13	1:101:A:GLU:H	7	2.84
(6,208)	1:99:A:ILE:HG13	1:101:A:GLU:H	8	2.84
(2,198)	1:111:A:ALA:H	1:112:A:GLU:HG2	8	2.84
(2,184)	1:99:A:ILE:HG13	1:101:A:GLU:H	7	2.84
(2,184)	1:99:A:ILE:HG13	1:101:A:GLU:H	8	2.84
(6,208)	1:99:A:ILE:HG13	1:101:A:GLU:H	1	2.83
(6,208)	1:99:A:ILE:HG13	1:101:A:GLU:H	6	2.83
(2,184)	1:99:A:ILE:HG13	1:101:A:GLU:H	1	2.83
(2,184)	1:99:A:ILE:HG13	1:101:A:GLU:H	6	2.83
(6,208)	1:99:A:ILE:HG13	1:101:A:GLU:H	2	2.82
(2,184)	1:99:A:ILE:HG13	1:101:A:GLU:H	2	2.82
(6,223)	1:111:A:ALA:H	1:112:A:GLU:HG2	10	2.78
(2,198)	1:111:A:ALA:H	1:112:A:GLU:HG2	10	2.78
(6,223)	1:111:A:ALA:H	1:112:A:GLU:HG2	7	2.75
(2,198)	1:111:A:ALA:H	1:112:A:GLU:HG2	7	2.75
(6,133)	1:57:A:LEU:HG	1:58:A:GLU:HB3	2	2.68
(6,133)	1:57:A:LEU:HG	1:58:A:GLU:HB3	5	2.68
(2,116)	1:57:A:LEU:HG	1:58:A:GLU:HB3	2	2.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,116)	1:57:A:LEU:HG	1:58:A:GLU:HB3	5	2.68
(6,133)	1:57:A:LEU:HG	1:58:A:GLU:HB3	1	2.64
(2,116)	1:57:A:LEU:HG	1:58:A:GLU:HB3	1	2.64
(6,194)	1:92:A:TRP:HB2	1:94:A:ASP:H	9	2.63
(2,173)	1:92:A:TRP:HB2	1:94:A:ASP:H	9	2.63
(6,194)	1:92:A:TRP:HB2	1:94:A:ASP:H	10	2.62
(6,133)	1:57:A:LEU:HG	1:58:A:GLU:HB3	4	2.62
(2,173)	1:92:A:TRP:HB2	1:94:A:ASP:H	10	2.62
(2,116)	1:57:A:LEU:HG	1:58:A:GLU:HB3	4	2.62
(6,194)	1:92:A:TRP:HB2	1:94:A:ASP:H	7	2.6
(6,133)	1:57:A:LEU:HG	1:58:A:GLU:HB3	3	2.6
(6,133)	1:57:A:LEU:HG	1:58:A:GLU:HB3	7	2.6
(6,133)	1:57:A:LEU:HG	1:58:A:GLU:HB3	8	2.6
(2,173)	1:92:A:TRP:HB2	1:94:A:ASP:H	7	2.6
(2,116)	1:57:A:LEU:HG	1:58:A:GLU:HB3	3	2.6
(2,116)	1:57:A:LEU:HG	1:58:A:GLU:HB3	7	2.6
(2,116)	1:57:A:LEU:HG	1:58:A:GLU:HB3	8	2.6
(6,133)	1:57:A:LEU:HG	1:58:A:GLU:HB3	9	2.59
(2,116)	1:57:A:LEU:HG	1:58:A:GLU:HB3	9	2.59
(6,194)	1:92:A:TRP:HB2	1:94:A:ASP:H	6	2.58
(2,173)	1:92:A:TRP:HB2	1:94:A:ASP:H	6	2.58
(6,133)	1:57:A:LEU:HG	1:58:A:GLU:HB3	10	2.57
(2,116)	1:57:A:LEU:HG	1:58:A:GLU:HB3	10	2.57
(6,133)	1:57:A:LEU:HG	1:58:A:GLU:HB3	6	2.56
(2,116)	1:57:A:LEU:HG	1:58:A:GLU:HB3	6	2.56
(6,194)	1:92:A:TRP:HB2	1:94:A:ASP:H	2	2.53
(6,194)	1:92:A:TRP:HB2	1:94:A:ASP:H	8	2.53
(2,173)	1:92:A:TRP:HB2	1:94:A:ASP:H	2	2.53
(2,173)	1:92:A:TRP:HB2	1:94:A:ASP:H	8	2.53
(1,70)	1:140:A:PRO:O	1:143:A:ASP:N	13	2.53
(6,194)	1:92:A:TRP:HB2	1:94:A:ASP:H	3	2.52
(2,173)	1:92:A:TRP:HB2	1:94:A:ASP:H	3	2.52
(6,194)	1:92:A:TRP:HB2	1:94:A:ASP:H	1	2.45
(2,173)	1:92:A:TRP:HB2	1:94:A:ASP:H	1	2.45
(6,194)	1:92:A:TRP:HB2	1:94:A:ASP:H	4	2.44
(6,194)	1:92:A:TRP:HB2	1:94:A:ASP:H	5	2.44
(2,173)	1:92:A:TRP:HB2	1:94:A:ASP:H	4	2.44
(2,173)	1:92:A:TRP:HB2	1:94:A:ASP:H	5	2.44
(6,258)	1:144:A:TRP:HB3	1:146:A:THR:H	13	2.41
(2,229)	1:144:A:TRP:HB3	1:146:A:THR:H	13	2.41
(1,70)	1:140:A:PRO:O	1:143:A:ASP:N	11	2.4
(1,70)	1:140:A:PRO:O	1:143:A:ASP:N	15	2.38

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,70)	1:140:A:PRO:O	1:143:A:ASP:N	14	2.35
(6,5)	1:1:A:MET:HB2	1:3:A:THR:HG1	13	2.34
(2,5)	1:1:A:MET:HB2	1:3:A:THR:HG1	13	2.34
(6,5)	1:1:A:MET:HB2	1:3:A:THR:HG1	11	2.3
(2,5)	1:1:A:MET:HB2	1:3:A:THR:HG1	11	2.3
(1,70)	1:140:A:PRO:O	1:143:A:ASP:N	12	2.3
(6,207)	1:99:A:ILE:HD11	1:101:A:GLU:H	5	2.27
(6,207)	1:99:A:ILE:HD12	1:101:A:GLU:H	5	2.27
(6,207)	1:99:A:ILE:HD13	1:101:A:GLU:H	5	2.27
(6,160)	1:69:A:MET:HG3	1:70:A:GLU:HB2	2	2.27
(2,183)	1:99:A:ILE:HD11	1:101:A:GLU:H	5	2.27
(2,183)	1:99:A:ILE:HD12	1:101:A:GLU:H	5	2.27
(2,183)	1:99:A:ILE:HD13	1:101:A:GLU:H	5	2.27
(2,141)	1:69:A:MET:HG3	1:70:A:GLU:HB2	2	2.27
(6,207)	1:99:A:ILE:HD11	1:101:A:GLU:H	4	2.26
(6,207)	1:99:A:ILE:HD12	1:101:A:GLU:H	4	2.26
(6,207)	1:99:A:ILE:HD13	1:101:A:GLU:H	4	2.26
(6,207)	1:99:A:ILE:HD11	1:101:A:GLU:H	10	2.26
(6,207)	1:99:A:ILE:HD12	1:101:A:GLU:H	10	2.26
(6,207)	1:99:A:ILE:HD13	1:101:A:GLU:H	10	2.26
(2,183)	1:99:A:ILE:HD11	1:101:A:GLU:H	4	2.26
(2,183)	1:99:A:ILE:HD12	1:101:A:GLU:H	4	2.26
(2,183)	1:99:A:ILE:HD13	1:101:A:GLU:H	4	2.26
(2,183)	1:99:A:ILE:HD11	1:101:A:GLU:H	10	2.26
(2,183)	1:99:A:ILE:HD12	1:101:A:GLU:H	10	2.26
(2,183)	1:99:A:ILE:HD13	1:101:A:GLU:H	10	2.26
(6,207)	1:99:A:ILE:HD11	1:101:A:GLU:H	9	2.25
(6,207)	1:99:A:ILE:HD12	1:101:A:GLU:H	9	2.25
(6,207)	1:99:A:ILE:HD13	1:101:A:GLU:H	9	2.25
(2,183)	1:99:A:ILE:HD11	1:101:A:GLU:H	9	2.25
(2,183)	1:99:A:ILE:HD12	1:101:A:GLU:H	9	2.25
(2,183)	1:99:A:ILE:HD13	1:101:A:GLU:H	9	2.25
(6,209)	1:99:A:ILE:H	1:101:A:GLU:HA	4	2.23
(6,207)	1:99:A:ILE:HD11	1:101:A:GLU:H	1	2.23
(6,207)	1:99:A:ILE:HD12	1:101:A:GLU:H	1	2.23
(6,207)	1:99:A:ILE:HD13	1:101:A:GLU:H	1	2.23
(6,207)	1:99:A:ILE:HD11	1:101:A:GLU:H	3	2.23
(6,207)	1:99:A:ILE:HD12	1:101:A:GLU:H	3	2.23
(6,207)	1:99:A:ILE:HD13	1:101:A:GLU:H	3	2.23
(6,160)	1:69:A:MET:HG3	1:70:A:GLU:HB2	1	2.23
(2,185)	1:99:A:ILE:H	1:101:A:GLU:HA	4	2.23
(2,183)	1:99:A:ILE:HD11	1:101:A:GLU:H	1	2.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,183)	1:99:A:ILE:HD12	1:101:A:GLU:H	1	2.23
(2,183)	1:99:A:ILE:HD13	1:101:A:GLU:H	1	2.23
(2,183)	1:99:A:ILE:HD11	1:101:A:GLU:H	3	2.23
(2,183)	1:99:A:ILE:HD12	1:101:A:GLU:H	3	2.23
(2,183)	1:99:A:ILE:HD13	1:101:A:GLU:H	3	2.23
(2,141)	1:69:A:MET:HG3	1:70:A:GLU:HB2	1	2.23
(6,207)	1:99:A:ILE:HD11	1:101:A:GLU:H	2	2.22
(6,207)	1:99:A:ILE:HD12	1:101:A:GLU:H	2	2.22
(6,207)	1:99:A:ILE:HD13	1:101:A:GLU:H	2	2.22
(6,160)	1:69:A:MET:HG3	1:70:A:GLU:HB2	3	2.22
(2,183)	1:99:A:ILE:HD11	1:101:A:GLU:H	2	2.22
(2,183)	1:99:A:ILE:HD12	1:101:A:GLU:H	2	2.22
(2,183)	1:99:A:ILE:HD13	1:101:A:GLU:H	2	2.22
(2,141)	1:69:A:MET:HG3	1:70:A:GLU:HB2	3	2.22
(6,207)	1:99:A:ILE:HD11	1:101:A:GLU:H	7	2.21
(6,207)	1:99:A:ILE:HD12	1:101:A:GLU:H	7	2.21
(6,207)	1:99:A:ILE:HD13	1:101:A:GLU:H	7	2.21
(6,194)	1:92:A:TRP:HB2	1:94:A:ASP:H	15	2.21
(2,183)	1:99:A:ILE:HD11	1:101:A:GLU:H	7	2.21
(2,183)	1:99:A:ILE:HD12	1:101:A:GLU:H	7	2.21
(2,183)	1:99:A:ILE:HD13	1:101:A:GLU:H	7	2.21
(2,173)	1:92:A:TRP:HB2	1:94:A:ASP:H	15	2.21
(6,207)	1:99:A:ILE:HD11	1:101:A:GLU:H	8	2.2
(6,207)	1:99:A:ILE:HD12	1:101:A:GLU:H	8	2.2
(6,207)	1:99:A:ILE:HD13	1:101:A:GLU:H	8	2.2
(2,183)	1:99:A:ILE:HD11	1:101:A:GLU:H	8	2.2
(2,183)	1:99:A:ILE:HD12	1:101:A:GLU:H	8	2.2
(2,183)	1:99:A:ILE:HD13	1:101:A:GLU:H	8	2.2
(6,207)	1:99:A:ILE:HD11	1:101:A:GLU:H	6	2.19
(6,207)	1:99:A:ILE:HD12	1:101:A:GLU:H	6	2.19
(6,207)	1:99:A:ILE:HD13	1:101:A:GLU:H	6	2.19
(2,183)	1:99:A:ILE:HD11	1:101:A:GLU:H	6	2.19
(2,183)	1:99:A:ILE:HD12	1:101:A:GLU:H	6	2.19
(2,183)	1:99:A:ILE:HD13	1:101:A:GLU:H	6	2.19
(6,194)	1:92:A:TRP:HB2	1:94:A:ASP:H	11	2.18
(2,173)	1:92:A:TRP:HB2	1:94:A:ASP:H	11	2.18
(6,209)	1:99:A:ILE:H	1:101:A:GLU:HA	3	2.16
(6,209)	1:99:A:ILE:H	1:101:A:GLU:HA	12	2.16
(6,209)	1:99:A:ILE:H	1:101:A:GLU:HA	14	2.16
(6,209)	1:99:A:ILE:H	1:101:A:GLU:HA	15	2.16
(2,185)	1:99:A:ILE:H	1:101:A:GLU:HA	3	2.16
(2,185)	1:99:A:ILE:H	1:101:A:GLU:HA	12	2.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,185)	1:99:A:ILE:H	1:101:A:GLU:HA	14	2.16
(2,185)	1:99:A:ILE:H	1:101:A:GLU:HA	15	2.16
(6,209)	1:99:A:ILE:H	1:101:A:GLU:HA	1	2.14
(6,209)	1:99:A:ILE:H	1:101:A:GLU:HA	13	2.14
(6,188)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD21	3	2.14
(6,188)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD22	3	2.14
(6,188)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD23	3	2.14
(2,185)	1:99:A:ILE:H	1:101:A:GLU:HA	1	2.14
(2,185)	1:99:A:ILE:H	1:101:A:GLU:HA	13	2.14
(2,167)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD21	3	2.14
(2,167)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD22	3	2.14
(2,167)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD23	3	2.14
(6,194)	1:92:A:TRP:HB2	1:94:A:ASP:H	14	2.13
(2,173)	1:92:A:TRP:HB2	1:94:A:ASP:H	14	2.13
(6,209)	1:99:A:ILE:H	1:101:A:GLU:HA	5	2.12
(6,53)	1:27:A:GLY:H	1:29:A:TRP:HA	15	2.12
(2,185)	1:99:A:ILE:H	1:101:A:GLU:HA	5	2.12
(2,51)	1:27:A:GLY:H	1:29:A:TRP:HA	15	2.12
(6,5)	1:1:A:MET:HB2	1:3:A:THR:HG1	14	2.11
(2,5)	1:1:A:MET:HB2	1:3:A:THR:HG1	14	2.11
(6,209)	1:99:A:ILE:H	1:101:A:GLU:HA	11	2.1
(6,207)	1:99:A:ILE:HD11	1:101:A:GLU:H	13	2.1
(6,207)	1:99:A:ILE:HD12	1:101:A:GLU:H	13	2.1
(6,207)	1:99:A:ILE:HD13	1:101:A:GLU:H	13	2.1
(2,185)	1:99:A:ILE:H	1:101:A:GLU:HA	11	2.1
(2,183)	1:99:A:ILE:HD11	1:101:A:GLU:H	13	2.1
(2,183)	1:99:A:ILE:HD12	1:101:A:GLU:H	13	2.1
(2,183)	1:99:A:ILE:HD13	1:101:A:GLU:H	13	2.1
(6,188)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD21	1	2.09
(6,188)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD22	1	2.09
(6,188)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD23	1	2.09
(2,167)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD21	1	2.09
(2,167)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD22	1	2.09
(2,167)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD23	1	2.09
(6,209)	1:99:A:ILE:H	1:101:A:GLU:HA	2	2.07
(6,207)	1:99:A:ILE:HD11	1:101:A:GLU:H	11	2.07
(6,207)	1:99:A:ILE:HD12	1:101:A:GLU:H	11	2.07
(6,207)	1:99:A:ILE:HD13	1:101:A:GLU:H	11	2.07
(6,207)	1:99:A:ILE:HD11	1:101:A:GLU:H	14	2.07
(6,207)	1:99:A:ILE:HD12	1:101:A:GLU:H	14	2.07
(6,207)	1:99:A:ILE:HD13	1:101:A:GLU:H	14	2.07
(6,5)	1:1:A:MET:HB2	1:3:A:THR:HG1	15	2.07

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,185)	1:99:A:ILE:H	1:101:A:GLU:HA	2	2.07
(2,183)	1:99:A:ILE:HD11	1:101:A:GLU:H	11	2.07
(2,183)	1:99:A:ILE:HD12	1:101:A:GLU:H	11	2.07
(2,183)	1:99:A:ILE:HD13	1:101:A:GLU:H	11	2.07
(2,183)	1:99:A:ILE:HD11	1:101:A:GLU:H	14	2.07
(2,183)	1:99:A:ILE:HD12	1:101:A:GLU:H	14	2.07
(2,183)	1:99:A:ILE:HD13	1:101:A:GLU:H	14	2.07
(2,5)	1:1:A:MET:HB2	1:3:A:THR:HG1	15	2.07
(6,207)	1:99:A:ILE:HD11	1:101:A:GLU:H	12	2.06
(6,207)	1:99:A:ILE:HD12	1:101:A:GLU:H	12	2.06
(6,207)	1:99:A:ILE:HD13	1:101:A:GLU:H	12	2.06
(6,5)	1:1:A:MET:HB2	1:3:A:THR:HG1	12	2.06
(2,183)	1:99:A:ILE:HD11	1:101:A:GLU:H	12	2.06
(2,183)	1:99:A:ILE:HD12	1:101:A:GLU:H	12	2.06
(2,183)	1:99:A:ILE:HD13	1:101:A:GLU:H	12	2.06
(2,5)	1:1:A:MET:HB2	1:3:A:THR:HG1	12	2.06
(6,209)	1:99:A:ILE:H	1:101:A:GLU:HA	9	2.04
(6,209)	1:99:A:ILE:H	1:101:A:GLU:HA	10	2.04
(6,207)	1:99:A:ILE:HD11	1:101:A:GLU:H	15	2.04
(6,207)	1:99:A:ILE:HD12	1:101:A:GLU:H	15	2.04
(6,207)	1:99:A:ILE:HD13	1:101:A:GLU:H	15	2.04
(6,188)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD21	2	2.04
(6,188)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD22	2	2.04
(6,188)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD23	2	2.04
(2,185)	1:99:A:ILE:H	1:101:A:GLU:HA	9	2.04
(2,185)	1:99:A:ILE:H	1:101:A:GLU:HA	10	2.04
(2,183)	1:99:A:ILE:HD11	1:101:A:GLU:H	15	2.04
(2,183)	1:99:A:ILE:HD12	1:101:A:GLU:H	15	2.04
(2,183)	1:99:A:ILE:HD13	1:101:A:GLU:H	15	2.04
(2,167)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD21	2	2.04
(2,167)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD22	2	2.04
(2,167)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD23	2	2.04
(6,188)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD21	5	2.03
(6,188)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD22	5	2.03
(6,188)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD23	5	2.03
(2,167)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD21	5	2.03
(2,167)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD22	5	2.03
(2,167)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD23	5	2.03
(6,209)	1:99:A:ILE:H	1:101:A:GLU:HA	8	2.02
(6,188)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD21	8	2.02
(6,188)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD22	8	2.02
(6,188)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD23	8	2.02

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(6,188)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD21	9	2.02
(6,188)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD22	9	2.02
(6,188)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD23	9	2.02
(2,185)	1:99:A:ILE:H	1:101:A:GLU:HA	8	2.02
(2,167)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD21	8	2.02
(2,167)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD22	8	2.02
(2,167)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD23	8	2.02
(2,167)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD21	9	2.02
(2,167)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD22	9	2.02
(2,167)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD23	9	2.02
(6,209)	1:99:A:ILE:H	1:101:A:GLU:HA	7	2.01
(6,188)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD21	7	2.01
(6,188)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD22	7	2.01
(6,188)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD23	7	2.01
(6,53)	1:27:A:GLY:H	1:29:A:TRP:HA	12	2.01
(2,185)	1:99:A:ILE:H	1:101:A:GLU:HA	7	2.01
(2,167)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD21	7	2.01
(2,167)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD22	7	2.01
(2,167)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD23	7	2.01
(2,51)	1:27:A:GLY:H	1:29:A:TRP:HA	12	2.01
(6,194)	1:92:A:TRP:HB2	1:94:A:ASP:H	13	2.0
(6,188)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD21	4	2.0
(6,188)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD22	4	2.0
(6,188)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD23	4	2.0
(6,188)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD21	10	2.0
(6,188)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD22	10	2.0
(6,188)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD23	10	2.0
(2,173)	1:92:A:TRP:HB2	1:94:A:ASP:H	13	2.0
(2,167)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD21	4	2.0
(2,167)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD22	4	2.0
(2,167)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD23	4	2.0
(2,167)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD21	10	2.0
(2,167)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD22	10	2.0
(2,167)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD23	10	2.0
(6,188)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD21	15	1.98
(6,188)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD22	15	1.98
(6,188)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD23	15	1.98
(6,53)	1:27:A:GLY:H	1:29:A:TRP:HA	13	1.98
(2,167)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD21	15	1.98
(2,167)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD22	15	1.98
(2,167)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD23	15	1.98
(2,51)	1:27:A:GLY:H	1:29:A:TRP:HA	13	1.98

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(6,188)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD21	6	1.97
(6,188)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD22	6	1.97
(6,188)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD23	6	1.97
(2,167)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD21	6	1.97
(2,167)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD22	6	1.97
(2,167)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD23	6	1.97
(6,53)	1:27:A:GLY:H	1:29:A:TRP:HA	14	1.96
(2,51)	1:27:A:GLY:H	1:29:A:TRP:HA	14	1.96
(6,209)	1:99:A:ILE:H	1:101:A:GLU:HA	6	1.95
(2,185)	1:99:A:ILE:H	1:101:A:GLU:HA	6	1.95
(6,188)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD21	12	1.93
(6,188)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD22	12	1.93
(6,188)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD23	12	1.93
(2,167)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD21	12	1.93
(2,167)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD22	12	1.93
(2,167)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD23	12	1.93
(6,33)	1:11:A:LYS:HE2	1:12:A:ILE:H	11	1.9
(6,33)	1:11:A:LYS:HE2	1:12:A:ILE:H	14	1.9
(2,32)	1:11:A:LYS:HE2	1:12:A:ILE:H	11	1.9
(2,32)	1:11:A:LYS:HE2	1:12:A:ILE:H	14	1.9
(6,33)	1:11:A:LYS:HE2	1:12:A:ILE:H	3	1.89
(6,33)	1:11:A:LYS:HE2	1:12:A:ILE:H	13	1.89
(2,32)	1:11:A:LYS:HE2	1:12:A:ILE:H	3	1.89
(2,32)	1:11:A:LYS:HE2	1:12:A:ILE:H	13	1.89
(6,33)	1:11:A:LYS:HE2	1:12:A:ILE:H	1	1.88
(6,33)	1:11:A:LYS:HE2	1:12:A:ILE:H	12	1.88
(6,33)	1:11:A:LYS:HE2	1:12:A:ILE:H	15	1.88
(2,32)	1:11:A:LYS:HE2	1:12:A:ILE:H	1	1.88
(2,32)	1:11:A:LYS:HE2	1:12:A:ILE:H	12	1.88
(2,32)	1:11:A:LYS:HE2	1:12:A:ILE:H	15	1.88
(6,33)	1:11:A:LYS:HE2	1:12:A:ILE:H	4	1.87
(6,33)	1:11:A:LYS:HE2	1:12:A:ILE:H	10	1.87
(2,32)	1:11:A:LYS:HE2	1:12:A:ILE:H	4	1.87
(2,32)	1:11:A:LYS:HE2	1:12:A:ILE:H	10	1.87
(6,33)	1:11:A:LYS:HE2	1:12:A:ILE:H	2	1.86
(6,33)	1:11:A:LYS:HE2	1:12:A:ILE:H	5	1.86
(2,32)	1:11:A:LYS:HE2	1:12:A:ILE:H	2	1.86
(2,32)	1:11:A:LYS:HE2	1:12:A:ILE:H	5	1.86
(6,188)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD21	14	1.85
(6,188)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD22	14	1.85
(6,188)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD23	14	1.85
(2,167)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD21	14	1.85

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,167)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD22	14	1.85
(2,167)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD23	14	1.85
(6,167)	1:71:A:GLU:H	1:72:A:LEU:HB3	14	1.82
(2,146)	1:71:A:GLU:H	1:72:A:LEU:HB3	14	1.82
(6,53)	1:27:A:GLY:H	1:29:A:TRP:HA	11	1.78
(2,51)	1:27:A:GLY:H	1:29:A:TRP:HA	11	1.78
(6,167)	1:71:A:GLU:H	1:72:A:LEU:HB3	13	1.77
(2,146)	1:71:A:GLU:H	1:72:A:LEU:HB3	13	1.77
(6,167)	1:71:A:GLU:H	1:72:A:LEU:HB3	11	1.76
(6,167)	1:71:A:GLU:H	1:72:A:LEU:HB3	12	1.76
(6,53)	1:27:A:GLY:H	1:29:A:TRP:HA	1	1.76
(2,146)	1:71:A:GLU:H	1:72:A:LEU:HB3	11	1.76
(2,146)	1:71:A:GLU:H	1:72:A:LEU:HB3	12	1.76
(2,51)	1:27:A:GLY:H	1:29:A:TRP:HA	1	1.76
(6,72)	1:34:A:ARG:HG3	1:36:A:GLY:HA3	6	1.75
(6,53)	1:27:A:GLY:H	1:29:A:TRP:HA	2	1.75
(6,53)	1:27:A:GLY:H	1:29:A:TRP:HA	8	1.75
(2,65)	1:34:A:ARG:HG3	1:36:A:GLY:HA3	6	1.75
(2,51)	1:27:A:GLY:H	1:29:A:TRP:HA	2	1.75
(2,51)	1:27:A:GLY:H	1:29:A:TRP:HA	8	1.75
(6,53)	1:27:A:GLY:H	1:29:A:TRP:HA	7	1.74
(2,51)	1:27:A:GLY:H	1:29:A:TRP:HA	7	1.74
(6,72)	1:34:A:ARG:HG3	1:36:A:GLY:HA3	8	1.73
(6,53)	1:27:A:GLY:H	1:29:A:TRP:HA	5	1.73
(6,53)	1:27:A:GLY:H	1:29:A:TRP:HA	6	1.73
(2,65)	1:34:A:ARG:HG3	1:36:A:GLY:HA3	8	1.73
(2,51)	1:27:A:GLY:H	1:29:A:TRP:HA	5	1.73
(2,51)	1:27:A:GLY:H	1:29:A:TRP:HA	6	1.73
(6,72)	1:34:A:ARG:HG3	1:36:A:GLY:HA3	9	1.72
(6,72)	1:34:A:ARG:HG3	1:36:A:GLY:HA3	10	1.72
(6,53)	1:27:A:GLY:H	1:29:A:TRP:HA	10	1.72
(2,65)	1:34:A:ARG:HG3	1:36:A:GLY:HA3	9	1.72
(2,65)	1:34:A:ARG:HG3	1:36:A:GLY:HA3	10	1.72
(2,51)	1:27:A:GLY:H	1:29:A:TRP:HA	10	1.72
(6,188)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD21	13	1.71
(6,188)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD22	13	1.71
(6,188)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD23	13	1.71
(6,72)	1:34:A:ARG:HG3	1:36:A:GLY:HA3	7	1.71
(2,167)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD21	13	1.71
(2,167)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD22	13	1.71
(2,167)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD23	13	1.71
(2,65)	1:34:A:ARG:HG3	1:36:A:GLY:HA3	7	1.71

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(6,53)	1:27:A:GLY:H	1:29:A:TRP:HA	4	1.7
(6,53)	1:27:A:GLY:H	1:29:A:TRP:HA	9	1.7
(2,51)	1:27:A:GLY:H	1:29:A:TRP:HA	4	1.7
(2,51)	1:27:A:GLY:H	1:29:A:TRP:HA	9	1.7
(6,256)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG11	5	1.69
(6,256)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG12	5	1.69
(6,256)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG13	5	1.69
(2,227)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG11	5	1.69
(2,227)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG12	5	1.69
(2,227)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG13	5	1.69
(6,256)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG11	2	1.68
(6,256)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG12	2	1.68
(6,256)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG13	2	1.68
(2,227)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG11	2	1.68
(2,227)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG12	2	1.68
(2,227)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG13	2	1.68
(6,167)	1:71:A:GLU:H	1:72:A:LEU:HB3	15	1.67
(2,146)	1:71:A:GLU:H	1:72:A:LEU:HB3	15	1.67
(6,256)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG11	3	1.66
(6,256)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG12	3	1.66
(6,256)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG13	3	1.66
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD11	9	1.66
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD12	9	1.66
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD13	9	1.66
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD21	9	1.66
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD22	9	1.66
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD23	9	1.66
(2,227)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG11	3	1.66
(2,227)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG12	3	1.66
(2,227)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG13	3	1.66
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD11	9	1.66
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD12	9	1.66
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD13	9	1.66
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD21	9	1.66
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD22	9	1.66
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD23	9	1.66
(6,188)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD21	11	1.64
(6,188)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD22	11	1.64
(6,188)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD23	11	1.64
(2,167)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD21	11	1.64
(2,167)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD22	11	1.64
(2,167)	1:84:A:LEU:H	1:85:A:LEU:HD23	11	1.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(6,256)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG11	12	1.61
(6,256)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG12	12	1.61
(6,256)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG13	12	1.61
(6,167)	1:71:A:GLU:H	1:72:A:LEU:HB3	10	1.61
(2,227)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG11	12	1.61
(2,227)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG12	12	1.61
(2,227)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG13	12	1.61
(2,146)	1:71:A:GLU:H	1:72:A:LEU:HB3	10	1.61
(6,53)	1:27:A:GLY:H	1:29:A:TRP:HA	3	1.59
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD11	6	1.59
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD12	6	1.59
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD13	6	1.59
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD21	6	1.59
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD22	6	1.59
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD23	6	1.59
(2,51)	1:27:A:GLY:H	1:29:A:TRP:HA	3	1.59
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD11	6	1.59
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD12	6	1.59
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD13	6	1.59
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD21	6	1.59
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD22	6	1.59
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD23	6	1.59
(6,256)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG11	11	1.58
(6,256)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG12	11	1.58
(6,256)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG13	11	1.58
(6,167)	1:71:A:GLU:H	1:72:A:LEU:HB3	6	1.58
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD11	3	1.58
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD12	3	1.58
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD13	3	1.58
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD21	3	1.58
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD22	3	1.58
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD23	3	1.58
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD11	8	1.58
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD12	8	1.58
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD13	8	1.58
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD21	8	1.58
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD22	8	1.58
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD23	8	1.58
(2,227)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG11	11	1.58
(2,227)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG12	11	1.58
(2,227)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG13	11	1.58
(2,146)	1:71:A:GLU:H	1:72:A:LEU:HB3	6	1.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD11	3	1.58
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD12	3	1.58
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD13	3	1.58
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD21	3	1.58
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD22	3	1.58
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD23	3	1.58
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD11	8	1.58
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD12	8	1.58
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD13	8	1.58
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD21	8	1.58
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD22	8	1.58
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD23	8	1.58
(6,167)	1:71:A:GLU:H	1:72:A:LEU:HB3	8	1.56
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD11	10	1.56
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD12	10	1.56
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD13	10	1.56
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD21	10	1.56
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD22	10	1.56
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD23	10	1.56
(2,146)	1:71:A:GLU:H	1:72:A:LEU:HB3	8	1.56
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD11	10	1.56
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD12	10	1.56
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD13	10	1.56
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD21	10	1.56
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD22	10	1.56
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD23	10	1.56
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD11	4	1.55
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD12	4	1.55
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD13	4	1.55
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD21	4	1.55
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD22	4	1.55
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD23	4	1.55
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD11	7	1.55
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD12	7	1.55
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD13	7	1.55
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD21	7	1.55
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD22	7	1.55
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD23	7	1.55
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD11	4	1.55
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD12	4	1.55
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD13	4	1.55
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD21	4	1.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD22	4	1.55
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD23	4	1.55
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD11	7	1.55
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD12	7	1.55
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD13	7	1.55
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD21	7	1.55
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD22	7	1.55
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD23	7	1.55
(6,167)	1:71:A:GLU:H	1:72:A:LEU:HB3	7	1.54
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD11	1	1.54
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD12	1	1.54
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD13	1	1.54
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD21	1	1.54
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD22	1	1.54
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD23	1	1.54
(2,146)	1:71:A:GLU:H	1:72:A:LEU:HB3	7	1.54
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD11	1	1.54
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD12	1	1.54
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD13	1	1.54
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD21	1	1.54
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD22	1	1.54
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD23	1	1.54
(6,167)	1:71:A:GLU:H	1:72:A:LEU:HB3	9	1.53
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD11	2	1.53
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD12	2	1.53
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD13	2	1.53
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD21	2	1.53
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD22	2	1.53
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD23	2	1.53
(2,146)	1:71:A:GLU:H	1:72:A:LEU:HB3	9	1.53
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD11	2	1.53
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD12	2	1.53
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD13	2	1.53
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD21	2	1.53
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD22	2	1.53
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD23	2	1.53
(6,2)	1:1:A:MET:HE1	1:2:A:ASP:H	4	1.51
(6,2)	1:1:A:MET:HE2	1:2:A:ASP:H	4	1.51
(6,2)	1:1:A:MET:HE3	1:2:A:ASP:H	4	1.51
(2,2)	1:1:A:MET:HE1	1:2:A:ASP:H	4	1.51
(2,2)	1:1:A:MET:HE2	1:2:A:ASP:H	4	1.51
(2,2)	1:1:A:MET:HE3	1:2:A:ASP:H	4	1.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(6,33)	1:11:A:LYS:HE2	1:12:A:ILE:H	6	1.5
(6,33)	1:11:A:LYS:HE2	1:12:A:ILE:H	8	1.5
(2,32)	1:11:A:LYS:HE2	1:12:A:ILE:H	6	1.5
(2,32)	1:11:A:LYS:HE2	1:12:A:ILE:H	8	1.5
(6,123)	1:54:A:ARG:HD3	1:55:A:GLY:HA2	7	1.49
(6,33)	1:11:A:LYS:HE2	1:12:A:ILE:H	7	1.49
(6,33)	1:11:A:LYS:HE2	1:12:A:ILE:H	9	1.49
(2,110)	1:54:A:ARG:HD3	1:55:A:GLY:HA2	7	1.49
(2,32)	1:11:A:LYS:HE2	1:12:A:ILE:H	7	1.49
(2,32)	1:11:A:LYS:HE2	1:12:A:ILE:H	9	1.49
(6,123)	1:54:A:ARG:HD3	1:55:A:GLY:HA2	3	1.47
(2,110)	1:54:A:ARG:HD3	1:55:A:GLY:HA2	3	1.47
(6,142)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG21	12	1.46
(6,142)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG22	12	1.46
(6,142)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG23	12	1.46
(6,77)	1:37:A:ARG:HG2	1:38:A:VAL:HA	1	1.46
(2,125)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG21	12	1.46
(2,125)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG22	12	1.46
(2,125)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG23	12	1.46
(2,70)	1:37:A:ARG:HG2	1:38:A:VAL:HA	1	1.46
(6,167)	1:71:A:GLU:H	1:72:A:LEU:HB3	2	1.45
(6,167)	1:71:A:GLU:H	1:72:A:LEU:HB3	4	1.45
(6,142)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG21	11	1.45
(6,142)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG22	11	1.45
(6,142)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG23	11	1.45
(6,142)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG21	13	1.45
(6,142)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG22	13	1.45
(6,142)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG23	13	1.45
(6,142)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG21	15	1.45
(6,142)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG22	15	1.45
(6,142)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG23	15	1.45
(6,123)	1:54:A:ARG:HD3	1:55:A:GLY:HA2	15	1.45
(2,146)	1:71:A:GLU:H	1:72:A:LEU:HB3	2	1.45
(2,146)	1:71:A:GLU:H	1:72:A:LEU:HB3	4	1.45
(2,125)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG21	11	1.45
(2,125)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG22	11	1.45
(2,125)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG23	11	1.45
(2,125)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG21	13	1.45
(2,125)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG22	13	1.45
(2,125)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG23	13	1.45
(2,125)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG21	15	1.45
(2,125)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG22	15	1.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,125)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG23	15	1.45
(2,110)	1:54:A:ARG:HD3	1:55:A:GLY:HA2	15	1.45
(6,194)	1:92:A:TRP:HB2	1:94:A:ASP:H	12	1.44
(6,167)	1:71:A:GLU:H	1:72:A:LEU:HB3	1	1.44
(6,142)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG21	14	1.44
(6,142)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG22	14	1.44
(6,142)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG23	14	1.44
(6,123)	1:54:A:ARG:HD3	1:55:A:GLY:HA2	9	1.44
(6,97)	1:42:A:HIS:HA	1:43:A:ASP:HB3	7	1.44
(6,97)	1:42:A:HIS:HA	1:43:A:ASP:HB3	9	1.44
(2,173)	1:92:A:TRP:HB2	1:94:A:ASP:H	12	1.44
(2,146)	1:71:A:GLU:H	1:72:A:LEU:HB3	1	1.44
(2,125)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG21	14	1.44
(2,125)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG22	14	1.44
(2,125)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG23	14	1.44
(2,110)	1:54:A:ARG:HD3	1:55:A:GLY:HA2	9	1.44
(2,87)	1:42:A:HIS:HA	1:43:A:ASP:HB3	7	1.44
(2,87)	1:42:A:HIS:HA	1:43:A:ASP:HB3	9	1.44
(6,256)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG11	13	1.43
(6,256)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG12	13	1.43
(6,256)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG13	13	1.43
(6,167)	1:71:A:GLU:H	1:72:A:LEU:HB3	5	1.43
(6,97)	1:42:A:HIS:HA	1:43:A:ASP:HB3	10	1.43
(2,227)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG11	13	1.43
(2,227)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG12	13	1.43
(2,227)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG13	13	1.43
(2,146)	1:71:A:GLU:H	1:72:A:LEU:HB3	5	1.43
(2,87)	1:42:A:HIS:HA	1:43:A:ASP:HB3	10	1.43
(6,256)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG11	6	1.42
(6,256)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG12	6	1.42
(6,256)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG13	6	1.42
(6,256)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG11	10	1.42
(6,256)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG12	10	1.42
(6,256)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG13	10	1.42
(6,123)	1:54:A:ARG:HD3	1:55:A:GLY:HA2	8	1.42
(6,123)	1:54:A:ARG:HD3	1:55:A:GLY:HA2	10	1.42
(2,227)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG11	6	1.42
(2,227)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG12	6	1.42
(2,227)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG13	6	1.42
(2,227)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG11	10	1.42
(2,227)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG12	10	1.42
(2,227)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG13	10	1.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,110)	1:54:A:ARG:HD3	1:55:A:GLY:HA2	8	1.42
(2,110)	1:54:A:ARG:HD3	1:55:A:GLY:HA2	10	1.42
(6,258)	1:144:A:TRP:HB3	1:146:A:THR:H	14	1.41
(6,256)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG11	7	1.41
(6,256)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG12	7	1.41
(6,256)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG13	7	1.41
(6,256)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG11	8	1.41
(6,256)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG12	8	1.41
(6,256)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG13	8	1.41
(2,229)	1:144:A:TRP:HB3	1:146:A:THR:H	14	1.41
(2,227)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG11	7	1.41
(2,227)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG12	7	1.41
(2,227)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG13	7	1.41
(2,227)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG11	8	1.41
(2,227)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG12	8	1.41
(2,227)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG13	8	1.41
(6,258)	1:144:A:TRP:HB3	1:146:A:THR:H	11	1.4
(6,256)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG11	4	1.4
(6,256)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG12	4	1.4
(6,256)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG13	4	1.4
(6,256)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG11	9	1.4
(6,256)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG12	9	1.4
(6,256)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG13	9	1.4
(6,221)	1:110:A:ALA:H	1:112:A:GLU:H	15	1.4
(6,142)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG21	10	1.4
(6,142)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG22	10	1.4
(6,142)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG23	10	1.4
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD11	14	1.4
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD12	14	1.4
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD13	14	1.4
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD21	14	1.4
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD22	14	1.4
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD23	14	1.4
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD11	15	1.4
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD12	15	1.4
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD13	15	1.4
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD21	15	1.4
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD22	15	1.4
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD23	15	1.4
(2,229)	1:144:A:TRP:HB3	1:146:A:THR:H	11	1.4
(2,227)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG11	4	1.4
(2,227)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG12	4	1.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,227)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG13	4	1.4
(2,227)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG11	9	1.4
(2,227)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG12	9	1.4
(2,227)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG13	9	1.4
(2,196)	1:110:A:ALA:H	1:112:A:GLU:H	15	1.4
(2,125)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG21	10	1.4
(2,125)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG22	10	1.4
(2,125)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG23	10	1.4
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD11	14	1.4
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD12	14	1.4
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD13	14	1.4
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD21	14	1.4
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD22	14	1.4
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD23	14	1.4
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD11	15	1.4
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD12	15	1.4
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD13	15	1.4
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD21	15	1.4
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD22	15	1.4
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD23	15	1.4
(6,258)	1:144:A:TRP:HB3	1:146:A:THR:H	15	1.39
(6,221)	1:110:A:ALA:H	1:112:A:GLU:H	11	1.39
(6,97)	1:42:A:HIS:HA	1:43:A:ASP:HB3	3	1.39
(6,77)	1:37:A:ARG:HG2	1:38:A:VAL:HA	5	1.39
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD11	11	1.39
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD12	11	1.39
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD13	11	1.39
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD21	11	1.39
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD22	11	1.39
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD23	11	1.39
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD11	12	1.39
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD12	12	1.39
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD13	12	1.39
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD21	12	1.39
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD22	12	1.39
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD23	12	1.39
(2,229)	1:144:A:TRP:HB3	1:146:A:THR:H	15	1.39
(2,196)	1:110:A:ALA:H	1:112:A:GLU:H	11	1.39
(2,87)	1:42:A:HIS:HA	1:43:A:ASP:HB3	3	1.39
(2,70)	1:37:A:ARG:HG2	1:38:A:VAL:HA	5	1.39
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD11	11	1.39
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD12	11	1.39

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD13	11	1.39
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD21	11	1.39
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD22	11	1.39
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD23	11	1.39
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD11	12	1.39
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD12	12	1.39
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD13	12	1.39
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD21	12	1.39
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD22	12	1.39
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD23	12	1.39
(6,237)	1:118:A:ARG:HD2	1:119:A:PRO:HG3	5	1.38
(6,97)	1:42:A:HIS:HA	1:43:A:ASP:HB3	1	1.38
(6,97)	1:42:A:HIS:HA	1:43:A:ASP:HB3	5	1.38
(6,97)	1:42:A:HIS:HA	1:43:A:ASP:HB3	8	1.38
(6,97)	1:42:A:HIS:HA	1:43:A:ASP:HB3	11	1.38
(6,97)	1:42:A:HIS:HA	1:43:A:ASP:HB3	14	1.38
(6,77)	1:37:A:ARG:HG2	1:38:A:VAL:HA	2	1.38
(3,20)	1:118:A:ARG:HD2	1:119:A:PRO:HG3	5	1.38
(2,87)	1:42:A:HIS:HA	1:43:A:ASP:HB3	1	1.38
(2,87)	1:42:A:HIS:HA	1:43:A:ASP:HB3	5	1.38
(2,87)	1:42:A:HIS:HA	1:43:A:ASP:HB3	8	1.38
(2,87)	1:42:A:HIS:HA	1:43:A:ASP:HB3	11	1.38
(2,87)	1:42:A:HIS:HA	1:43:A:ASP:HB3	14	1.38
(2,70)	1:37:A:ARG:HG2	1:38:A:VAL:HA	2	1.38
(6,221)	1:110:A:ALA:H	1:112:A:GLU:H	12	1.37
(6,221)	1:110:A:ALA:H	1:112:A:GLU:H	13	1.37
(6,167)	1:71:A:GLU:H	1:72:A:LEU:HB3	3	1.37
(6,97)	1:42:A:HIS:HA	1:43:A:ASP:HB3	2	1.37
(6,97)	1:42:A:HIS:HA	1:43:A:ASP:HB3	4	1.37
(6,97)	1:42:A:HIS:HA	1:43:A:ASP:HB3	12	1.37
(6,97)	1:42:A:HIS:HA	1:43:A:ASP:HB3	13	1.37
(6,97)	1:42:A:HIS:HA	1:43:A:ASP:HB3	15	1.37
(6,2)	1:1:A:MET:HE1	1:2:A:ASP:H	13	1.37
(6,2)	1:1:A:MET:HE2	1:2:A:ASP:H	13	1.37
(6,2)	1:1:A:MET:HE3	1:2:A:ASP:H	13	1.37
(2,196)	1:110:A:ALA:H	1:112:A:GLU:H	12	1.37
(2,196)	1:110:A:ALA:H	1:112:A:GLU:H	13	1.37
(2,146)	1:71:A:GLU:H	1:72:A:LEU:HB3	3	1.37
(2,87)	1:42:A:HIS:HA	1:43:A:ASP:HB3	2	1.37
(2,87)	1:42:A:HIS:HA	1:43:A:ASP:HB3	4	1.37
(2,87)	1:42:A:HIS:HA	1:43:A:ASP:HB3	12	1.37
(2,87)	1:42:A:HIS:HA	1:43:A:ASP:HB3	13	1.37

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,87)	1:42:A:HIS:HA	1:43:A:ASP:HB3	15	1.37
(2,2)	1:1:A:MET:HE1	1:2:A:ASP:H	13	1.37
(2,2)	1:1:A:MET:HE2	1:2:A:ASP:H	13	1.37
(2,2)	1:1:A:MET:HE3	1:2:A:ASP:H	13	1.37
(6,134)	1:57:A:LEU:HD21	1:58:A:GLU:HB2	8	1.36
(6,134)	1:57:A:LEU:HD22	1:58:A:GLU:HB2	8	1.36
(6,134)	1:57:A:LEU:HD23	1:58:A:GLU:HB2	8	1.36
(6,134)	1:57:A:LEU:HD21	1:58:A:GLU:HB2	9	1.36
(6,134)	1:57:A:LEU:HD22	1:58:A:GLU:HB2	9	1.36
(6,134)	1:57:A:LEU:HD23	1:58:A:GLU:HB2	9	1.36
(6,97)	1:42:A:HIS:HA	1:43:A:ASP:HB3	6	1.36
(2,117)	1:57:A:LEU:HD21	1:58:A:GLU:HB2	8	1.36
(2,117)	1:57:A:LEU:HD22	1:58:A:GLU:HB2	8	1.36
(2,117)	1:57:A:LEU:HD23	1:58:A:GLU:HB2	8	1.36
(2,117)	1:57:A:LEU:HD21	1:58:A:GLU:HB2	9	1.36
(2,117)	1:57:A:LEU:HD22	1:58:A:GLU:HB2	9	1.36
(2,117)	1:57:A:LEU:HD23	1:58:A:GLU:HB2	9	1.36
(2,87)	1:42:A:HIS:HA	1:43:A:ASP:HB3	6	1.36
(6,256)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG11	1	1.35
(6,256)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG12	1	1.35
(6,256)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG13	1	1.35
(6,134)	1:57:A:LEU:HD21	1:58:A:GLU:HB2	2	1.35
(6,134)	1:57:A:LEU:HD22	1:58:A:GLU:HB2	2	1.35
(6,134)	1:57:A:LEU:HD23	1:58:A:GLU:HB2	2	1.35
(6,123)	1:54:A:ARG:HD3	1:55:A:GLY:HA2	4	1.35
(2,227)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG11	1	1.35
(2,227)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG12	1	1.35
(2,227)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG13	1	1.35
(2,117)	1:57:A:LEU:HD21	1:58:A:GLU:HB2	2	1.35
(2,117)	1:57:A:LEU:HD22	1:58:A:GLU:HB2	2	1.35
(2,117)	1:57:A:LEU:HD23	1:58:A:GLU:HB2	2	1.35
(2,110)	1:54:A:ARG:HD3	1:55:A:GLY:HA2	4	1.35
(6,134)	1:57:A:LEU:HD21	1:58:A:GLU:HB2	1	1.34
(6,134)	1:57:A:LEU:HD22	1:58:A:GLU:HB2	1	1.34
(6,134)	1:57:A:LEU:HD23	1:58:A:GLU:HB2	1	1.34
(6,86)	1:40:A:ARG:HA	1:41:A:LYS:HE3	11	1.34
(3,5)	1:40:A:ARG:HA	1:41:A:LYS:HE3	11	1.34
(2,117)	1:57:A:LEU:HD21	1:58:A:GLU:HB2	1	1.34
(2,117)	1:57:A:LEU:HD22	1:58:A:GLU:HB2	1	1.34
(2,117)	1:57:A:LEU:HD23	1:58:A:GLU:HB2	1	1.34
(6,142)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG21	6	1.33
(6,142)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG22	6	1.33

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(6,142)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG23	6	1.33
(6,142)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG21	9	1.33
(6,142)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG22	9	1.33
(6,142)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG23	9	1.33
(6,134)	1:57:A:LEU:HD21	1:58:A:GLU:HB2	3	1.33
(6,134)	1:57:A:LEU:HD22	1:58:A:GLU:HB2	3	1.33
(6,134)	1:57:A:LEU:HD23	1:58:A:GLU:HB2	3	1.33
(6,134)	1:57:A:LEU:HD21	1:58:A:GLU:HB2	4	1.33
(6,134)	1:57:A:LEU:HD22	1:58:A:GLU:HB2	4	1.33
(6,134)	1:57:A:LEU:HD23	1:58:A:GLU:HB2	4	1.33
(6,134)	1:57:A:LEU:HD21	1:58:A:GLU:HB2	5	1.33
(6,134)	1:57:A:LEU:HD22	1:58:A:GLU:HB2	5	1.33
(6,134)	1:57:A:LEU:HD23	1:58:A:GLU:HB2	5	1.33
(6,134)	1:57:A:LEU:HD21	1:58:A:GLU:HB2	6	1.33
(6,134)	1:57:A:LEU:HD22	1:58:A:GLU:HB2	6	1.33
(6,134)	1:57:A:LEU:HD23	1:58:A:GLU:HB2	6	1.33
(6,134)	1:57:A:LEU:HD21	1:58:A:GLU:HB2	10	1.33
(6,134)	1:57:A:LEU:HD22	1:58:A:GLU:HB2	10	1.33
(6,134)	1:57:A:LEU:HD23	1:58:A:GLU:HB2	10	1.33
(6,2)	1:1:A:MET:HE1	1:2:A:ASP:H	11	1.33
(6,2)	1:1:A:MET:HE2	1:2:A:ASP:H	11	1.33
(6,2)	1:1:A:MET:HE3	1:2:A:ASP:H	11	1.33
(6,2)	1:1:A:MET:HE1	1:2:A:ASP:H	15	1.33
(6,2)	1:1:A:MET:HE2	1:2:A:ASP:H	15	1.33
(6,2)	1:1:A:MET:HE3	1:2:A:ASP:H	15	1.33
(2,125)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG21	6	1.33
(2,125)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG22	6	1.33
(2,125)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG23	6	1.33
(2,125)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG21	9	1.33
(2,125)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG22	9	1.33
(2,125)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG23	9	1.33
(2,117)	1:57:A:LEU:HD21	1:58:A:GLU:HB2	3	1.33
(2,117)	1:57:A:LEU:HD22	1:58:A:GLU:HB2	3	1.33
(2,117)	1:57:A:LEU:HD23	1:58:A:GLU:HB2	3	1.33
(2,117)	1:57:A:LEU:HD21	1:58:A:GLU:HB2	4	1.33
(2,117)	1:57:A:LEU:HD22	1:58:A:GLU:HB2	4	1.33
(2,117)	1:57:A:LEU:HD23	1:58:A:GLU:HB2	4	1.33
(2,117)	1:57:A:LEU:HD21	1:58:A:GLU:HB2	5	1.33
(2,117)	1:57:A:LEU:HD22	1:58:A:GLU:HB2	5	1.33
(2,117)	1:57:A:LEU:HD23	1:58:A:GLU:HB2	5	1.33
(2,117)	1:57:A:LEU:HD21	1:58:A:GLU:HB2	6	1.33
(2,117)	1:57:A:LEU:HD22	1:58:A:GLU:HB2	6	1.33

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,117)	1:57:A:LEU:HD23	1:58:A:GLU:HB2	6	1.33
(2,117)	1:57:A:LEU:HD21	1:58:A:GLU:HB2	10	1.33
(2,117)	1:57:A:LEU:HD22	1:58:A:GLU:HB2	10	1.33
(2,117)	1:57:A:LEU:HD23	1:58:A:GLU:HB2	10	1.33
(2,2)	1:1:A:MET:HE1	1:2:A:ASP:H	11	1.33
(2,2)	1:1:A:MET:HE2	1:2:A:ASP:H	11	1.33
(2,2)	1:1:A:MET:HE3	1:2:A:ASP:H	11	1.33
(2,2)	1:1:A:MET:HE1	1:2:A:ASP:H	15	1.33
(2,2)	1:1:A:MET:HE2	1:2:A:ASP:H	15	1.33
(2,2)	1:1:A:MET:HE3	1:2:A:ASP:H	15	1.33
(6,142)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG21	8	1.32
(6,142)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG22	8	1.32
(6,142)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG23	8	1.32
(6,134)	1:57:A:LEU:HD21	1:58:A:GLU:HB2	7	1.32
(6,134)	1:57:A:LEU:HD22	1:58:A:GLU:HB2	7	1.32
(6,134)	1:57:A:LEU:HD23	1:58:A:GLU:HB2	7	1.32
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD11	5	1.32
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD12	5	1.32
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD13	5	1.32
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD21	5	1.32
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD22	5	1.32
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD23	5	1.32
(2,125)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG21	8	1.32
(2,125)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG22	8	1.32
(2,125)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG23	8	1.32
(2,117)	1:57:A:LEU:HD21	1:58:A:GLU:HB2	7	1.32
(2,117)	1:57:A:LEU:HD22	1:58:A:GLU:HB2	7	1.32
(2,117)	1:57:A:LEU:HD23	1:58:A:GLU:HB2	7	1.32
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD11	5	1.32
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD12	5	1.32
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD13	5	1.32
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD21	5	1.32
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD22	5	1.32
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD23	5	1.32
(6,256)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG11	15	1.31
(6,256)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG12	15	1.31
(6,256)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG13	15	1.31
(6,221)	1:110:A:ALA:H	1:112:A:GLU:H	14	1.31
(2,227)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG11	15	1.31
(2,227)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG12	15	1.31
(2,227)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG13	15	1.31
(2,196)	1:110:A:ALA:H	1:112:A:GLU:H	14	1.31

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(6,142)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG21	7	1.3
(6,142)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG22	7	1.3
(6,142)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG23	7	1.3
(6,123)	1:54:A:ARG:HD3	1:55:A:GLY:HA2	5	1.3
(2,125)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG21	7	1.3
(2,125)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG22	7	1.3
(2,125)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG23	7	1.3
(2,110)	1:54:A:ARG:HD3	1:55:A:GLY:HA2	5	1.3
(6,142)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG21	2	1.29
(6,142)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG22	2	1.29
(6,142)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG23	2	1.29
(6,142)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG21	5	1.29
(6,142)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG22	5	1.29
(6,142)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG23	5	1.29
(6,86)	1:40:A:ARG:HA	1:41:A:LYS:HE3	14	1.29
(3,5)	1:40:A:ARG:HA	1:41:A:LYS:HE3	14	1.29
(2,125)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG21	2	1.29
(2,125)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG22	2	1.29
(2,125)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG23	2	1.29
(2,125)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG21	5	1.29
(2,125)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG22	5	1.29
(2,125)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG23	5	1.29
(6,277)	1:157:A:THR:HG1	1:158:A:SER:HB3	4	1.28
(6,277)	1:157:A:THR:HG1	1:158:A:SER:HB3	5	1.28
(6,277)	1:157:A:THR:HG1	1:158:A:SER:HB3	8	1.28
(6,77)	1:37:A:ARG:HG2	1:38:A:VAL:HA	13	1.28
(3,25)	1:157:A:THR:HG1	1:158:A:SER:HB3	4	1.28
(3,25)	1:157:A:THR:HG1	1:158:A:SER:HB3	5	1.28
(3,25)	1:157:A:THR:HG1	1:158:A:SER:HB3	8	1.28
(2,70)	1:37:A:ARG:HG2	1:38:A:VAL:HA	13	1.28
(6,277)	1:157:A:THR:HG1	1:158:A:SER:HB3	2	1.27
(6,277)	1:157:A:THR:HG1	1:158:A:SER:HB3	7	1.27
(6,277)	1:157:A:THR:HG1	1:158:A:SER:HB3	9	1.27
(6,237)	1:118:A:ARG:HD2	1:119:A:PRO:HG3	1	1.27
(6,142)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG21	1	1.27
(6,142)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG22	1	1.27
(6,142)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG23	1	1.27
(6,142)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG21	4	1.27
(6,142)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG22	4	1.27
(6,142)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG23	4	1.27
(6,123)	1:54:A:ARG:HD3	1:55:A:GLY:HA2	12	1.27
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD11	13	1.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD12	13	1.27
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD13	13	1.27
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD21	13	1.27
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD22	13	1.27
(6,48)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD23	13	1.27
(3,25)	1:157:A:THR:HG1	1:158:A:SER:HB3	2	1.27
(3,25)	1:157:A:THR:HG1	1:158:A:SER:HB3	7	1.27
(3,25)	1:157:A:THR:HG1	1:158:A:SER:HB3	9	1.27
(3,20)	1:118:A:ARG:HD2	1:119:A:PRO:HG3	1	1.27
(2,125)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG21	1	1.27
(2,125)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG22	1	1.27
(2,125)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG23	1	1.27
(2,125)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG21	4	1.27
(2,125)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG22	4	1.27
(2,125)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG23	4	1.27
(2,110)	1:54:A:ARG:HD3	1:55:A:GLY:HA2	12	1.27
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD11	13	1.27
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD12	13	1.27
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD13	13	1.27
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD21	13	1.27
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD22	13	1.27
(2,46)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HD23	13	1.27
(6,277)	1:157:A:THR:HG1	1:158:A:SER:HB3	1	1.26
(6,277)	1:157:A:THR:HG1	1:158:A:SER:HB3	6	1.26
(6,277)	1:157:A:THR:HG1	1:158:A:SER:HB3	10	1.26
(6,277)	1:157:A:THR:HG1	1:158:A:SER:HB3	15	1.26
(6,123)	1:54:A:ARG:HD3	1:55:A:GLY:HA2	1	1.26
(3,25)	1:157:A:THR:HG1	1:158:A:SER:HB3	1	1.26
(3,25)	1:157:A:THR:HG1	1:158:A:SER:HB3	6	1.26
(3,25)	1:157:A:THR:HG1	1:158:A:SER:HB3	10	1.26
(3,25)	1:157:A:THR:HG1	1:158:A:SER:HB3	15	1.26
(2,110)	1:54:A:ARG:HD3	1:55:A:GLY:HA2	1	1.26
(6,277)	1:157:A:THR:HG1	1:158:A:SER:HB3	3	1.25
(6,256)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG11	14	1.25
(6,256)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG12	14	1.25
(6,256)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG13	14	1.25
(3,25)	1:157:A:THR:HG1	1:158:A:SER:HB3	3	1.25
(2,227)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG11	14	1.25
(2,227)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG12	14	1.25
(2,227)	1:141:A:PRO:HB3	1:142:A:VAL:HG13	14	1.25
(6,277)	1:157:A:THR:HG1	1:158:A:SER:HB3	12	1.24
(6,277)	1:157:A:THR:HG1	1:158:A:SER:HB3	13	1.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(6,123)	1:54:A:ARG:HD3	1:55:A:GLY:HA2	2	1.24
(3,25)	1:157:A:THR:HG1	1:158:A:SER:HB3	12	1.24
(3,25)	1:157:A:THR:HG1	1:158:A:SER:HB3	13	1.24
(2,110)	1:54:A:ARG:HD3	1:55:A:GLY:HA2	2	1.24
(6,277)	1:157:A:THR:HG1	1:158:A:SER:HB3	14	1.23
(6,159)	1:69:A:MET:HB2	1:70:A:GLU:HG3	10	1.23
(6,123)	1:54:A:ARG:HD3	1:55:A:GLY:HA2	6	1.23
(6,86)	1:40:A:ARG:HA	1:41:A:LYS:HE3	12	1.23
(3,25)	1:157:A:THR:HG1	1:158:A:SER:HB3	14	1.23
(3,5)	1:40:A:ARG:HA	1:41:A:LYS:HE3	12	1.23
(2,140)	1:69:A:MET:HB2	1:70:A:GLU:HG3	10	1.23
(2,110)	1:54:A:ARG:HD3	1:55:A:GLY:HA2	6	1.23
(6,277)	1:157:A:THR:HG1	1:158:A:SER:HB3	11	1.22
(6,144)	1:61:A:VAL:HA	1:62:A:GLU:HB3	7	1.22
(6,144)	1:61:A:VAL:HA	1:62:A:GLU:HB3	8	1.22
(6,144)	1:61:A:VAL:HA	1:62:A:GLU:HB3	10	1.22
(6,86)	1:40:A:ARG:HA	1:41:A:LYS:HE3	15	1.22
(3,25)	1:157:A:THR:HG1	1:158:A:SER:HB3	11	1.22
(3,5)	1:40:A:ARG:HA	1:41:A:LYS:HE3	15	1.22
(2,127)	1:61:A:VAL:HA	1:62:A:GLU:HB3	7	1.22
(2,127)	1:61:A:VAL:HA	1:62:A:GLU:HB3	8	1.22
(2,127)	1:61:A:VAL:HA	1:62:A:GLU:HB3	10	1.22
(6,144)	1:61:A:VAL:HA	1:62:A:GLU:HB3	6	1.21
(6,144)	1:61:A:VAL:HA	1:62:A:GLU:HB3	9	1.21
(2,127)	1:61:A:VAL:HA	1:62:A:GLU:HB3	6	1.21
(2,127)	1:61:A:VAL:HA	1:62:A:GLU:HB3	9	1.21
(6,159)	1:69:A:MET:HB2	1:70:A:GLU:HG3	6	1.2
(6,156)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG11	6	1.2
(6,156)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG12	6	1.2
(6,156)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG13	6	1.2
(6,156)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG11	13	1.2
(6,156)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG12	13	1.2
(6,156)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG13	13	1.2
(6,144)	1:61:A:VAL:HA	1:62:A:GLU:HB3	2	1.2
(6,144)	1:61:A:VAL:HA	1:62:A:GLU:HB3	3	1.2
(6,77)	1:37:A:ARG:HG2	1:38:A:VAL:HA	3	1.2
(2,140)	1:69:A:MET:HB2	1:70:A:GLU:HG3	6	1.2
(2,137)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG11	6	1.2
(2,137)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG12	6	1.2
(2,137)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG13	6	1.2
(2,137)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG11	13	1.2
(2,137)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG12	13	1.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,137)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG13	13	1.2
(2,127)	1:61:A:VAL:HA	1:62:A:GLU:HB3	2	1.2
(2,127)	1:61:A:VAL:HA	1:62:A:GLU:HB3	3	1.2
(2,70)	1:37:A:ARG:HG2	1:38:A:VAL:HA	3	1.2
(6,250)	1:131:A:ASP:HA	1:132:A:TYR:HB3	6	1.19
(6,250)	1:131:A:ASP:HA	1:132:A:TYR:HB3	7	1.19
(6,250)	1:131:A:ASP:HA	1:132:A:TYR:HB3	8	1.19
(6,250)	1:131:A:ASP:HA	1:132:A:TYR:HB3	9	1.19
(6,250)	1:131:A:ASP:HA	1:132:A:TYR:HB3	10	1.19
(6,221)	1:110:A:ALA:H	1:112:A:GLU:H	9	1.19
(6,156)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG11	9	1.19
(6,156)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG12	9	1.19
(6,156)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG13	9	1.19
(6,156)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG11	10	1.19
(6,156)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG12	10	1.19
(6,156)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG13	10	1.19
(6,144)	1:61:A:VAL:HA	1:62:A:GLU:HB3	1	1.19
(6,144)	1:61:A:VAL:HA	1:62:A:GLU:HB3	4	1.19
(6,144)	1:61:A:VAL:HA	1:62:A:GLU:HB3	5	1.19
(6,144)	1:61:A:VAL:HA	1:62:A:GLU:HB3	11	1.19
(6,144)	1:61:A:VAL:HA	1:62:A:GLU:HB3	12	1.19
(6,144)	1:61:A:VAL:HA	1:62:A:GLU:HB3	13	1.19
(6,144)	1:61:A:VAL:HA	1:62:A:GLU:HB3	14	1.19
(6,144)	1:61:A:VAL:HA	1:62:A:GLU:HB3	15	1.19
(6,142)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG21	3	1.19
(6,142)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG22	3	1.19
(6,142)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG23	3	1.19
(2,221)	1:131:A:ASP:HA	1:132:A:TYR:HB3	6	1.19
(2,221)	1:131:A:ASP:HA	1:132:A:TYR:HB3	7	1.19
(2,221)	1:131:A:ASP:HA	1:132:A:TYR:HB3	8	1.19
(2,221)	1:131:A:ASP:HA	1:132:A:TYR:HB3	9	1.19
(2,221)	1:131:A:ASP:HA	1:132:A:TYR:HB3	10	1.19
(2,196)	1:110:A:ALA:H	1:112:A:GLU:H	9	1.19
(2,137)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG11	9	1.19
(2,137)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG12	9	1.19
(2,137)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG13	9	1.19
(2,137)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG11	10	1.19
(2,137)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG12	10	1.19
(2,137)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG13	10	1.19
(2,127)	1:61:A:VAL:HA	1:62:A:GLU:HB3	1	1.19
(2,127)	1:61:A:VAL:HA	1:62:A:GLU:HB3	4	1.19
(2,127)	1:61:A:VAL:HA	1:62:A:GLU:HB3	5	1.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,127)	1:61:A:VAL:HA	1:62:A:GLU:HB3	11	1.19
(2,127)	1:61:A:VAL:HA	1:62:A:GLU:HB3	12	1.19
(2,127)	1:61:A:VAL:HA	1:62:A:GLU:HB3	13	1.19
(2,127)	1:61:A:VAL:HA	1:62:A:GLU:HB3	14	1.19
(2,127)	1:61:A:VAL:HA	1:62:A:GLU:HB3	15	1.19
(2,125)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG21	3	1.19
(2,125)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG22	3	1.19
(2,125)	1:60:A:ILE:HG13	1:61:A:VAL:HG23	3	1.19
(6,250)	1:131:A:ASP:HA	1:132:A:TYR:HB3	2	1.18
(6,156)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG11	1	1.18
(6,156)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG12	1	1.18
(6,156)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG13	1	1.18
(6,156)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG11	7	1.18
(6,156)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG12	7	1.18
(6,156)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG13	7	1.18
(6,156)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG11	8	1.18
(6,156)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG12	8	1.18
(6,156)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG13	8	1.18
(6,156)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG11	11	1.18
(6,156)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG12	11	1.18
(6,156)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG13	11	1.18
(6,156)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG11	12	1.18
(6,156)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG12	12	1.18
(6,156)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG13	12	1.18
(6,156)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG11	14	1.18
(6,156)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG12	14	1.18
(6,156)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG13	14	1.18
(6,86)	1:40:A:ARG:HA	1:41:A:LYS:HE3	13	1.18
(3,5)	1:40:A:ARG:HA	1:41:A:LYS:HE3	13	1.18
(2,221)	1:131:A:ASP:HA	1:132:A:TYR:HB3	2	1.18
(2,137)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG11	1	1.18
(2,137)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG12	1	1.18
(2,137)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG13	1	1.18
(2,137)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG11	7	1.18
(2,137)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG12	7	1.18
(2,137)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG13	7	1.18
(2,137)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG11	8	1.18
(2,137)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG12	8	1.18
(2,137)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG13	8	1.18
(2,137)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG11	11	1.18
(2,137)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG12	11	1.18
(2,137)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG13	11	1.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,137)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG11	12	1.18
(2,137)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG12	12	1.18
(2,137)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG13	12	1.18
(2,137)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG11	14	1.18
(2,137)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG12	14	1.18
(2,137)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG13	14	1.18
(6,250)	1:131:A:ASP:HA	1:132:A:TYR:HB3	1	1.17
(6,156)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG11	2	1.17
(6,156)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG12	2	1.17
(6,156)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG13	2	1.17
(6,156)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG11	3	1.17
(6,156)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG12	3	1.17
(6,156)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG13	3	1.17
(6,156)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG11	4	1.17
(6,156)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG12	4	1.17
(6,156)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG13	4	1.17
(6,156)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG11	15	1.17
(6,156)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG12	15	1.17
(6,156)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG13	15	1.17
(2,221)	1:131:A:ASP:HA	1:132:A:TYR:HB3	1	1.17
(2,137)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG11	2	1.17
(2,137)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG12	2	1.17
(2,137)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG13	2	1.17
(2,137)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG11	3	1.17
(2,137)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG12	3	1.17
(2,137)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG13	3	1.17
(2,137)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG11	4	1.17
(2,137)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG12	4	1.17
(2,137)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG13	4	1.17
(2,137)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG11	15	1.17
(2,137)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG12	15	1.17
(2,137)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG13	15	1.17
(6,250)	1:131:A:ASP:HA	1:132:A:TYR:HB3	3	1.16
(6,250)	1:131:A:ASP:HA	1:132:A:TYR:HB3	5	1.16
(6,159)	1:69:A:MET:HB2	1:70:A:GLU:HG3	7	1.16
(6,159)	1:69:A:MET:HB2	1:70:A:GLU:HG3	8	1.16
(6,156)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG11	5	1.16
(6,156)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG12	5	1.16
(6,156)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG13	5	1.16
(2,221)	1:131:A:ASP:HA	1:132:A:TYR:HB3	3	1.16
(2,221)	1:131:A:ASP:HA	1:132:A:TYR:HB3	5	1.16
(2,140)	1:69:A:MET:HB2	1:70:A:GLU:HG3	7	1.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,140)	1:69:A:MET:HB2	1:70:A:GLU:HG3	8	1.16
(2,137)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG11	5	1.16
(2,137)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG12	5	1.16
(2,137)	1:67:A:ARG:H	1:68:A:VAL:HG13	5	1.16
(6,266)	1:149:A:ILE:HG12	1:150:A:GLU:HA	9	1.15
(6,266)	1:149:A:ILE:HG12	1:150:A:GLU:HA	10	1.15
(2,235)	1:149:A:ILE:HG12	1:150:A:GLU:HA	9	1.15
(2,235)	1:149:A:ILE:HG12	1:150:A:GLU:HA	10	1.15
(6,237)	1:118:A:ARG:HD2	1:119:A:PRO:HG3	6	1.14
(6,41)	1:19:A:ARG:H	1:20:A:ASN:HB3	3	1.14
(3,20)	1:118:A:ARG:HD2	1:119:A:PRO:HG3	6	1.14
(2,39)	1:19:A:ARG:H	1:20:A:ASN:HB3	3	1.14
(6,41)	1:19:A:ARG:H	1:20:A:ASN:HB3	7	1.13
(2,39)	1:19:A:ARG:H	1:20:A:ASN:HB3	7	1.13
(6,266)	1:149:A:ILE:HG12	1:150:A:GLU:HA	8	1.12
(6,199)	1:94:A:ASP:HB3	1:95:A:GLU:HB3	11	1.12
(6,160)	1:69:A:MET:HG3	1:70:A:GLU:HB2	12	1.12
(6,159)	1:69:A:MET:HB2	1:70:A:GLU:HG3	4	1.12
(6,159)	1:69:A:MET:HB2	1:70:A:GLU:HG3	9	1.12
(2,235)	1:149:A:ILE:HG12	1:150:A:GLU:HA	8	1.12
(2,141)	1:69:A:MET:HG3	1:70:A:GLU:HB2	12	1.12
(2,140)	1:69:A:MET:HB2	1:70:A:GLU:HG3	4	1.12
(2,140)	1:69:A:MET:HB2	1:70:A:GLU:HG3	9	1.12
(6,266)	1:149:A:ILE:HG12	1:150:A:GLU:HA	1	1.11
(6,266)	1:149:A:ILE:HG12	1:150:A:GLU:HA	6	1.11
(6,221)	1:110:A:ALA:H	1:112:A:GLU:H	8	1.11
(6,160)	1:69:A:MET:HG3	1:70:A:GLU:HB2	5	1.11
(6,41)	1:19:A:ARG:H	1:20:A:ASN:HB3	1	1.11
(6,41)	1:19:A:ARG:H	1:20:A:ASN:HB3	6	1.11
(6,41)	1:19:A:ARG:H	1:20:A:ASN:HB3	15	1.11
(2,235)	1:149:A:ILE:HG12	1:150:A:GLU:HA	1	1.11
(2,235)	1:149:A:ILE:HG12	1:150:A:GLU:HA	6	1.11
(2,196)	1:110:A:ALA:H	1:112:A:GLU:H	8	1.11
(2,141)	1:69:A:MET:HG3	1:70:A:GLU:HB2	5	1.11
(2,39)	1:19:A:ARG:H	1:20:A:ASN:HB3	1	1.11
(2,39)	1:19:A:ARG:H	1:20:A:ASN:HB3	6	1.11
(2,39)	1:19:A:ARG:H	1:20:A:ASN:HB3	15	1.11
(6,266)	1:149:A:ILE:HG12	1:150:A:GLU:HA	4	1.1
(6,266)	1:149:A:ILE:HG12	1:150:A:GLU:HA	5	1.1
(6,266)	1:149:A:ILE:HG12	1:150:A:GLU:HA	7	1.1
(6,266)	1:149:A:ILE:HG12	1:150:A:GLU:HA	11	1.1
(6,266)	1:149:A:ILE:HG12	1:150:A:GLU:HA	13	1.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(6,266)	1:149:A:ILE:HG12	1:150:A:GLU:HA	15	1.1
(6,41)	1:19:A:ARG:H	1:20:A:ASN:HB3	5	1.1
(6,41)	1:19:A:ARG:H	1:20:A:ASN:HB3	12	1.1
(6,23)	1:7:A:THR:HB	1:11:A:LYS:HG2	11	1.1
(2,235)	1:149:A:ILE:HG12	1:150:A:GLU:HA	4	1.1
(2,235)	1:149:A:ILE:HG12	1:150:A:GLU:HA	5	1.1
(2,235)	1:149:A:ILE:HG12	1:150:A:GLU:HA	7	1.1
(2,235)	1:149:A:ILE:HG12	1:150:A:GLU:HA	11	1.1
(2,235)	1:149:A:ILE:HG12	1:150:A:GLU:HA	13	1.1
(2,235)	1:149:A:ILE:HG12	1:150:A:GLU:HA	15	1.1
(2,39)	1:19:A:ARG:H	1:20:A:ASN:HB3	5	1.1
(2,39)	1:19:A:ARG:H	1:20:A:ASN:HB3	12	1.1
(2,23)	1:7:A:THR:HB	1:11:A:LYS:HG2	11	1.1
(6,266)	1:149:A:ILE:HG12	1:150:A:GLU:HA	3	1.09
(6,266)	1:149:A:ILE:HG12	1:150:A:GLU:HA	12	1.09
(6,202)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB1	1	1.09
(6,202)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB2	1	1.09
(6,202)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB3	1	1.09
(6,160)	1:69:A:MET:HG3	1:70:A:GLU:HB2	4	1.09
(6,41)	1:19:A:ARG:H	1:20:A:ASN:HB3	2	1.09
(6,41)	1:19:A:ARG:H	1:20:A:ASN:HB3	4	1.09
(6,41)	1:19:A:ARG:H	1:20:A:ASN:HB3	10	1.09
(2,235)	1:149:A:ILE:HG12	1:150:A:GLU:HA	3	1.09
(2,235)	1:149:A:ILE:HG12	1:150:A:GLU:HA	12	1.09
(2,179)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB1	1	1.09
(2,179)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB2	1	1.09
(2,179)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB3	1	1.09
(2,141)	1:69:A:MET:HG3	1:70:A:GLU:HB2	4	1.09
(2,39)	1:19:A:ARG:H	1:20:A:ASN:HB3	2	1.09
(2,39)	1:19:A:ARG:H	1:20:A:ASN:HB3	4	1.09
(2,39)	1:19:A:ARG:H	1:20:A:ASN:HB3	10	1.09
(6,266)	1:149:A:ILE:HG12	1:150:A:GLU:HA	2	1.08
(6,266)	1:149:A:ILE:HG12	1:150:A:GLU:HA	14	1.08
(6,202)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB1	3	1.08
(6,202)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB2	3	1.08
(6,202)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB3	3	1.08
(6,202)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB1	4	1.08
(6,202)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB2	4	1.08
(6,202)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB3	4	1.08
(6,199)	1:94:A:ASP:HB3	1:95:A:GLU:HB3	15	1.08
(6,41)	1:19:A:ARG:H	1:20:A:ASN:HB3	9	1.08
(6,41)	1:19:A:ARG:H	1:20:A:ASN:HB3	11	1.08

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(6,41)	1:19:A:ARG:H	1:20:A:ASN:HB3	13	1.08
(6,41)	1:19:A:ARG:H	1:20:A:ASN:HB3	14	1.08
(2,235)	1:149:A:ILE:HG12	1:150:A:GLU:HA	2	1.08
(2,235)	1:149:A:ILE:HG12	1:150:A:GLU:HA	14	1.08
(2,179)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB1	3	1.08
(2,179)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB2	3	1.08
(2,179)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB3	3	1.08
(2,179)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB1	4	1.08
(2,179)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB2	4	1.08
(2,179)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB3	4	1.08
(2,39)	1:19:A:ARG:H	1:20:A:ASN:HB3	9	1.08
(2,39)	1:19:A:ARG:H	1:20:A:ASN:HB3	11	1.08
(2,39)	1:19:A:ARG:H	1:20:A:ASN:HB3	13	1.08
(2,39)	1:19:A:ARG:H	1:20:A:ASN:HB3	14	1.08
(6,258)	1:144:A:TRP:HB3	1:146:A:THR:H	12	1.07
(6,202)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB1	2	1.07
(6,202)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB2	2	1.07
(6,202)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB3	2	1.07
(6,41)	1:19:A:ARG:H	1:20:A:ASN:HB3	8	1.07
(2,229)	1:144:A:TRP:HB3	1:146:A:THR:H	12	1.07
(2,179)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB1	2	1.07
(2,179)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB2	2	1.07
(2,179)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB3	2	1.07
(2,39)	1:19:A:ARG:H	1:20:A:ASN:HB3	8	1.07
(6,23)	1:7:A:THR:HB	1:11:A:LYS:HG2	13	1.06
(2,23)	1:7:A:THR:HB	1:11:A:LYS:HG2	13	1.06
(1,52)	1:87:A:CYS:O	1:76:A:PHE:N	12	1.06
(6,23)	1:7:A:THR:HB	1:11:A:LYS:HG2	14	1.05
(2,23)	1:7:A:THR:HB	1:11:A:LYS:HG2	14	1.05
(6,160)	1:69:A:MET:HG3	1:70:A:GLU:HB2	11	1.04
(6,23)	1:7:A:THR:HB	1:11:A:LYS:HG2	4	1.04
(6,23)	1:7:A:THR:HB	1:11:A:LYS:HG2	12	1.04
(6,23)	1:7:A:THR:HB	1:11:A:LYS:HG2	15	1.04
(2,141)	1:69:A:MET:HG3	1:70:A:GLU:HB2	11	1.04
(2,23)	1:7:A:THR:HB	1:11:A:LYS:HG2	4	1.04
(2,23)	1:7:A:THR:HB	1:11:A:LYS:HG2	12	1.04
(2,23)	1:7:A:THR:HB	1:11:A:LYS:HG2	15	1.04
(6,78)	1:37:A:ARG:HD2	1:38:A:VAL:H	3	1.03
(2,71)	1:37:A:ARG:HD2	1:38:A:VAL:H	3	1.03
(6,90)	1:41:A:LYS:HD3	1:42:A:HIS:H	3	1.02
(6,23)	1:7:A:THR:HB	1:11:A:LYS:HG2	3	1.02
(6,23)	1:7:A:THR:HB	1:11:A:LYS:HG2	5	1.02

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,81)	1:41:A:LYS:HD3	1:42:A:HIS:H	3	1.02
(2,23)	1:7:A:THR:HB	1:11:A:LYS:HG2	3	1.02
(2,23)	1:7:A:THR:HB	1:11:A:LYS:HG2	5	1.02
(6,283)	1:163:A:LYS:HD3	1:164:A:VAL:H	10	1.01
(6,202)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB1	6	1.01
(6,202)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB2	6	1.01
(6,202)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB3	6	1.01
(6,202)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB1	8	1.01
(6,202)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB2	8	1.01
(6,202)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB3	8	1.01
(6,202)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB1	9	1.01
(6,202)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB2	9	1.01
(6,202)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB3	9	1.01
(6,202)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB1	10	1.01
(6,202)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB2	10	1.01
(6,202)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB3	10	1.01
(6,160)	1:69:A:MET:HG3	1:70:A:GLU:HB2	15	1.01
(2,251)	1:163:A:LYS:HD3	1:164:A:VAL:H	10	1.01
(2,179)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB1	6	1.01
(2,179)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB2	6	1.01
(2,179)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB3	6	1.01
(2,179)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB1	8	1.01
(2,179)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB2	8	1.01
(2,179)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB3	8	1.01
(2,179)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB1	9	1.01
(2,179)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB2	9	1.01
(2,179)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB3	9	1.01
(2,179)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB1	10	1.01
(2,179)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB2	10	1.01
(2,179)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB3	10	1.01
(2,141)	1:69:A:MET:HG3	1:70:A:GLU:HB2	15	1.01
(6,237)	1:118:A:ARG:HD2	1:119:A:PRO:HG3	2	1.0
(6,202)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB1	7	1.0
(6,202)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB2	7	1.0
(6,202)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB3	7	1.0
(6,90)	1:41:A:LYS:HD3	1:42:A:HIS:H	1	1.0
(3,20)	1:118:A:ARG:HD2	1:119:A:PRO:HG3	2	1.0
(2,179)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB1	7	1.0
(2,179)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB2	7	1.0
(2,179)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB3	7	1.0
(2,81)	1:41:A:LYS:HD3	1:42:A:HIS:H	1	1.0
(6,159)	1:69:A:MET:HB2	1:70:A:GLU:HG3	5	0.99

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(6,159)	1:69:A:MET:HB2	1:70:A:GLU:HG3	11	0.99
(6,111)	1:47:A:LEU:H	1:48:A:THR:HB	9	0.99
(6,111)	1:47:A:LEU:H	1:48:A:THR:HB	10	0.99
(6,47)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HA	3	0.99
(6,23)	1:7:A:THR:HB	1:11:A:LYS:HG2	6	0.99
(2,140)	1:69:A:MET:HB2	1:70:A:GLU:HG3	5	0.99
(2,140)	1:69:A:MET:HB2	1:70:A:GLU:HG3	11	0.99
(2,101)	1:47:A:LEU:H	1:48:A:THR:HB	9	0.99
(2,101)	1:47:A:LEU:H	1:48:A:THR:HB	10	0.99
(2,45)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HA	3	0.99
(2,23)	1:7:A:THR:HB	1:11:A:LYS:HG2	6	0.99
(6,199)	1:94:A:ASP:HB3	1:95:A:GLU:HB3	12	0.98
(6,165)	1:70:A:GLU:H	1:72:A:LEU:H	4	0.98
(6,165)	1:70:A:GLU:H	1:72:A:LEU:H	12	0.98
(6,160)	1:69:A:MET:HG3	1:70:A:GLU:HB2	10	0.98
(6,111)	1:47:A:LEU:H	1:48:A:THR:HB	6	0.98
(6,107)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:H	9	0.98
(6,23)	1:7:A:THR:HB	1:11:A:LYS:HG2	1	0.98
(6,23)	1:7:A:THR:HB	1:11:A:LYS:HG2	8	0.98
(2,144)	1:70:A:GLU:H	1:72:A:LEU:H	4	0.98
(2,144)	1:70:A:GLU:H	1:72:A:LEU:H	12	0.98
(2,141)	1:69:A:MET:HG3	1:70:A:GLU:HB2	10	0.98
(2,101)	1:47:A:LEU:H	1:48:A:THR:HB	6	0.98
(2,97)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:H	9	0.98
(2,23)	1:7:A:THR:HB	1:11:A:LYS:HG2	1	0.98
(2,23)	1:7:A:THR:HB	1:11:A:LYS:HG2	8	0.98
(6,223)	1:111:A:ALA:H	1:112:A:GLU:HG2	12	0.97
(6,199)	1:94:A:ASP:HB3	1:95:A:GLU:HB3	14	0.97
(6,165)	1:70:A:GLU:H	1:72:A:LEU:H	1	0.97
(6,111)	1:47:A:LEU:H	1:48:A:THR:HB	3	0.97
(2,198)	1:111:A:ALA:H	1:112:A:GLU:HG2	12	0.97
(2,144)	1:70:A:GLU:H	1:72:A:LEU:H	1	0.97
(2,101)	1:47:A:LEU:H	1:48:A:THR:HB	3	0.97
(6,223)	1:111:A:ALA:H	1:112:A:GLU:HG2	11	0.96
(6,199)	1:94:A:ASP:HB3	1:95:A:GLU:HB3	13	0.96
(6,165)	1:70:A:GLU:H	1:72:A:LEU:H	2	0.96
(6,111)	1:47:A:LEU:H	1:48:A:THR:HB	7	0.96
(6,111)	1:47:A:LEU:H	1:48:A:THR:HB	8	0.96
(6,23)	1:7:A:THR:HB	1:11:A:LYS:HG2	10	0.96
(2,198)	1:111:A:ALA:H	1:112:A:GLU:HG2	11	0.96
(2,144)	1:70:A:GLU:H	1:72:A:LEU:H	2	0.96
(2,101)	1:47:A:LEU:H	1:48:A:THR:HB	7	0.96

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,101)	1:47:A:LEU:H	1:48:A:THR:HB	8	0.96
(2,23)	1:7:A:THR:HB	1:11:A:LYS:HG2	10	0.96
(6,264)	1:147:A:LYS:HD3	1:148:A:HIS:H	3	0.95
(6,160)	1:69:A:MET:HG3	1:70:A:GLU:HB2	6	0.95
(6,107)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:H	3	0.95
(6,23)	1:7:A:THR:HB	1:11:A:LYS:HG2	2	0.95
(6,23)	1:7:A:THR:HB	1:11:A:LYS:HG2	7	0.95
(2,234)	1:147:A:LYS:HD3	1:148:A:HIS:H	3	0.95
(2,141)	1:69:A:MET:HG3	1:70:A:GLU:HB2	6	0.95
(2,97)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:H	3	0.95
(2,23)	1:7:A:THR:HB	1:11:A:LYS:HG2	2	0.95
(2,23)	1:7:A:THR:HB	1:11:A:LYS:HG2	7	0.95
(6,107)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:H	7	0.94
(6,107)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:H	8	0.94
(6,47)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HA	1	0.94
(6,47)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HA	2	0.94
(6,23)	1:7:A:THR:HB	1:11:A:LYS:HG2	9	0.94
(2,97)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:H	7	0.94
(2,97)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:H	8	0.94
(2,45)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HA	1	0.94
(2,45)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HA	2	0.94
(2,23)	1:7:A:THR:HB	1:11:A:LYS:HG2	9	0.94
(6,165)	1:70:A:GLU:H	1:72:A:LEU:H	15	0.93
(6,111)	1:47:A:LEU:H	1:48:A:THR:HB	4	0.93
(2,144)	1:70:A:GLU:H	1:72:A:LEU:H	15	0.93
(2,101)	1:47:A:LEU:H	1:48:A:THR:HB	4	0.93
(6,107)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:H	10	0.92
(6,47)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HA	4	0.92
(2,97)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:H	10	0.92
(2,45)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HA	4	0.92
(6,165)	1:70:A:GLU:H	1:72:A:LEU:H	14	0.91
(6,107)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:H	6	0.91
(6,106)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD21	4	0.91
(6,106)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD22	4	0.91
(6,106)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD23	4	0.91
(2,144)	1:70:A:GLU:H	1:72:A:LEU:H	14	0.91
(2,97)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:H	6	0.91
(2,96)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD21	4	0.91
(2,96)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD22	4	0.91
(2,96)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD23	4	0.91
(6,202)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB1	5	0.9
(6,202)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB2	5	0.9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(6,202)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB3	5	0.9
(6,160)	1:69:A:MET:HG3	1:70:A:GLU:HB2	7	0.9
(6,160)	1:69:A:MET:HG3	1:70:A:GLU:HB2	13	0.9
(6,147)	1:62:A:GLU:HG3	1:63:A:MET:H	10	0.9
(6,107)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:H	2	0.9
(6,90)	1:41:A:LYS:HD3	1:42:A:HIS:H	4	0.9
(2,179)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB1	5	0.9
(2,179)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB2	5	0.9
(2,179)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB3	5	0.9
(2,141)	1:69:A:MET:HG3	1:70:A:GLU:HB2	7	0.9
(2,141)	1:69:A:MET:HG3	1:70:A:GLU:HB2	13	0.9
(2,130)	1:62:A:GLU:HG3	1:63:A:MET:H	10	0.9
(2,97)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:H	2	0.9
(2,81)	1:41:A:LYS:HD3	1:42:A:HIS:H	4	0.9
(6,237)	1:118:A:ARG:HD2	1:119:A:PRO:HG3	4	0.89
(6,165)	1:70:A:GLU:H	1:72:A:LEU:H	13	0.89
(6,147)	1:62:A:GLU:HG3	1:63:A:MET:H	8	0.89
(6,111)	1:47:A:LEU:H	1:48:A:THR:HB	1	0.89
(6,106)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD21	3	0.89
(6,106)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD22	3	0.89
(6,106)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD23	3	0.89
(3,20)	1:118:A:ARG:HD2	1:119:A:PRO:HG3	4	0.89
(2,144)	1:70:A:GLU:H	1:72:A:LEU:H	13	0.89
(2,130)	1:62:A:GLU:HG3	1:63:A:MET:H	8	0.89
(2,101)	1:47:A:LEU:H	1:48:A:THR:HB	1	0.89
(2,96)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD21	3	0.89
(2,96)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD22	3	0.89
(2,96)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD23	3	0.89
(1,52)	1:87:A:CYS:O	1:76:A:PHE:N	3	0.89
(6,160)	1:69:A:MET:HG3	1:70:A:GLU:HB2	8	0.88
(6,160)	1:69:A:MET:HG3	1:70:A:GLU:HB2	14	0.88
(6,159)	1:69:A:MET:HB2	1:70:A:GLU:HG3	14	0.88
(6,147)	1:62:A:GLU:HG3	1:63:A:MET:H	7	0.88
(6,111)	1:47:A:LEU:H	1:48:A:THR:HB	2	0.88
(6,111)	1:47:A:LEU:H	1:48:A:THR:HB	15	0.88
(6,47)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HA	9	0.88
(2,141)	1:69:A:MET:HG3	1:70:A:GLU:HB2	8	0.88
(2,141)	1:69:A:MET:HG3	1:70:A:GLU:HB2	14	0.88
(2,140)	1:69:A:MET:HB2	1:70:A:GLU:HG3	14	0.88
(2,130)	1:62:A:GLU:HG3	1:63:A:MET:H	7	0.88
(2,101)	1:47:A:LEU:H	1:48:A:THR:HB	2	0.88
(2,101)	1:47:A:LEU:H	1:48:A:THR:HB	15	0.88

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,45)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HA	9	0.88
(6,221)	1:110:A:ALA:H	1:112:A:GLU:H	6	0.87
(6,165)	1:70:A:GLU:H	1:72:A:LEU:H	11	0.87
(6,47)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HA	14	0.87
(2,196)	1:110:A:ALA:H	1:112:A:GLU:H	6	0.87
(2,144)	1:70:A:GLU:H	1:72:A:LEU:H	11	0.87
(2,45)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HA	14	0.87
(6,237)	1:118:A:ARG:HD2	1:119:A:PRO:HG3	3	0.86
(6,221)	1:110:A:ALA:H	1:112:A:GLU:H	10	0.86
(6,160)	1:69:A:MET:HG3	1:70:A:GLU:HB2	9	0.86
(6,159)	1:69:A:MET:HB2	1:70:A:GLU:HG3	13	0.86
(3,20)	1:118:A:ARG:HD2	1:119:A:PRO:HG3	3	0.86
(2,196)	1:110:A:ALA:H	1:112:A:GLU:H	10	0.86
(2,141)	1:69:A:MET:HG3	1:70:A:GLU:HB2	9	0.86
(2,140)	1:69:A:MET:HB2	1:70:A:GLU:HG3	13	0.86
(6,111)	1:47:A:LEU:H	1:48:A:THR:HB	5	0.85
(6,107)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:H	4	0.85
(6,107)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:H	5	0.85
(6,2)	1:1:A:MET:HE1	1:2:A:ASP:H	7	0.85
(6,2)	1:1:A:MET:HE2	1:2:A:ASP:H	7	0.85
(6,2)	1:1:A:MET:HE3	1:2:A:ASP:H	7	0.85
(6,2)	1:1:A:MET:HE1	1:2:A:ASP:H	8	0.85
(6,2)	1:1:A:MET:HE2	1:2:A:ASP:H	8	0.85
(6,2)	1:1:A:MET:HE3	1:2:A:ASP:H	8	0.85
(2,101)	1:47:A:LEU:H	1:48:A:THR:HB	5	0.85
(2,97)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:H	4	0.85
(2,97)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:H	5	0.85
(2,2)	1:1:A:MET:HE1	1:2:A:ASP:H	7	0.85
(2,2)	1:1:A:MET:HE2	1:2:A:ASP:H	7	0.85
(2,2)	1:1:A:MET:HE3	1:2:A:ASP:H	7	0.85
(2,2)	1:1:A:MET:HE1	1:2:A:ASP:H	8	0.85
(2,2)	1:1:A:MET:HE2	1:2:A:ASP:H	8	0.85
(2,2)	1:1:A:MET:HE3	1:2:A:ASP:H	8	0.85
(6,165)	1:70:A:GLU:H	1:72:A:LEU:H	5	0.84
(6,111)	1:47:A:LEU:H	1:48:A:THR:HB	11	0.84
(6,111)	1:47:A:LEU:H	1:48:A:THR:HB	14	0.84
(6,65)	1:31:A:ILE:H	1:32:A:ASP:HB3	6	0.84
(2,144)	1:70:A:GLU:H	1:72:A:LEU:H	5	0.84
(2,101)	1:47:A:LEU:H	1:48:A:THR:HB	11	0.84
(2,101)	1:47:A:LEU:H	1:48:A:THR:HB	14	0.84
(2,59)	1:31:A:ILE:H	1:32:A:ASP:HB3	6	0.84
(6,258)	1:144:A:TRP:HB3	1:146:A:THR:H	4	0.83

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(6,199)	1:94:A:ASP:HB3	1:95:A:GLU:HB3	2	0.83
(6,159)	1:69:A:MET:HB2	1:70:A:GLU:HG3	12	0.83
(6,65)	1:31:A:ILE:H	1:32:A:ASP:HB3	8	0.83
(6,46)	1:22:A:PRO:HD3	1:23:A:LEU:H	13	0.83
(2,229)	1:144:A:TRP:HB3	1:146:A:THR:H	4	0.83
(2,140)	1:69:A:MET:HB2	1:70:A:GLU:HG3	12	0.83
(2,59)	1:31:A:ILE:H	1:32:A:ASP:HB3	8	0.83
(2,44)	1:22:A:PRO:HD3	1:23:A:LEU:H	13	0.83
(6,114)	1:50:A:PRO:HG3	1:51:A:GLY:H	7	0.82
(6,106)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD21	2	0.82
(6,106)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD22	2	0.82
(6,106)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD23	2	0.82
(6,106)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD21	9	0.82
(6,106)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD22	9	0.82
(6,106)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD23	9	0.82
(6,69)	1:33:A:ALA:HB1	1:34:A:ARG:HD3	2	0.82
(6,69)	1:33:A:ALA:HB2	1:34:A:ARG:HD3	2	0.82
(6,69)	1:33:A:ALA:HB3	1:34:A:ARG:HD3	2	0.82
(6,65)	1:31:A:ILE:H	1:32:A:ASP:HB3	1	0.82
(6,65)	1:31:A:ILE:H	1:32:A:ASP:HB3	7	0.82
(6,65)	1:31:A:ILE:H	1:32:A:ASP:HB3	9	0.82
(6,65)	1:31:A:ILE:H	1:32:A:ASP:HB3	10	0.82
(6,65)	1:31:A:ILE:H	1:32:A:ASP:HB3	13	0.82
(6,47)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HA	15	0.82
(2,104)	1:50:A:PRO:HG3	1:51:A:GLY:H	7	0.82
(2,96)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD21	2	0.82
(2,96)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD22	2	0.82
(2,96)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD23	2	0.82
(2,96)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD21	9	0.82
(2,96)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD22	9	0.82
(2,96)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD23	9	0.82
(2,62)	1:33:A:ALA:HB1	1:34:A:ARG:HD3	2	0.82
(2,62)	1:33:A:ALA:HB2	1:34:A:ARG:HD3	2	0.82
(2,62)	1:33:A:ALA:HB3	1:34:A:ARG:HD3	2	0.82
(2,59)	1:31:A:ILE:H	1:32:A:ASP:HB3	1	0.82
(2,59)	1:31:A:ILE:H	1:32:A:ASP:HB3	7	0.82
(2,59)	1:31:A:ILE:H	1:32:A:ASP:HB3	9	0.82
(2,59)	1:31:A:ILE:H	1:32:A:ASP:HB3	10	0.82
(2,59)	1:31:A:ILE:H	1:32:A:ASP:HB3	13	0.82
(2,45)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HA	15	0.82
(6,134)	1:57:A:LEU:HD21	1:58:A:GLU:HB2	14	0.81
(6,134)	1:57:A:LEU:HD22	1:58:A:GLU:HB2	14	0.81

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(6,134)	1:57:A:LEU:HD23	1:58:A:GLU:HB2	14	0.81
(6,114)	1:50:A:PRO:HG3	1:51:A:GLY:H	10	0.81
(6,111)	1:47:A:LEU:H	1:48:A:THR:HB	12	0.81
(6,106)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD21	7	0.81
(6,106)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD22	7	0.81
(6,106)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD23	7	0.81
(6,106)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD21	10	0.81
(6,106)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD22	10	0.81
(6,106)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD23	10	0.81
(6,65)	1:31:A:ILE:H	1:32:A:ASP:HB3	12	0.81
(6,65)	1:31:A:ILE:H	1:32:A:ASP:HB3	15	0.81
(2,117)	1:57:A:LEU:HD21	1:58:A:GLU:HB2	14	0.81
(2,117)	1:57:A:LEU:HD22	1:58:A:GLU:HB2	14	0.81
(2,117)	1:57:A:LEU:HD23	1:58:A:GLU:HB2	14	0.81
(2,104)	1:50:A:PRO:HG3	1:51:A:GLY:H	10	0.81
(2,101)	1:47:A:LEU:H	1:48:A:THR:HB	12	0.81
(2,96)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD21	7	0.81
(2,96)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD22	7	0.81
(2,96)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD23	7	0.81
(2,96)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD21	10	0.81
(2,96)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD22	10	0.81
(2,96)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD23	10	0.81
(2,59)	1:31:A:ILE:H	1:32:A:ASP:HB3	12	0.81
(2,59)	1:31:A:ILE:H	1:32:A:ASP:HB3	15	0.81
(6,165)	1:70:A:GLU:H	1:72:A:LEU:H	3	0.8
(6,65)	1:31:A:ILE:H	1:32:A:ASP:HB3	5	0.8
(6,46)	1:22:A:PRO:HD3	1:23:A:LEU:H	5	0.8
(6,46)	1:22:A:PRO:HD3	1:23:A:LEU:H	6	0.8
(6,46)	1:22:A:PRO:HD3	1:23:A:LEU:H	7	0.8
(6,46)	1:22:A:PRO:HD3	1:23:A:LEU:H	8	0.8
(6,46)	1:22:A:PRO:HD3	1:23:A:LEU:H	10	0.8
(2,144)	1:70:A:GLU:H	1:72:A:LEU:H	3	0.8
(2,59)	1:31:A:ILE:H	1:32:A:ASP:HB3	5	0.8
(2,44)	1:22:A:PRO:HD3	1:23:A:LEU:H	5	0.8
(2,44)	1:22:A:PRO:HD3	1:23:A:LEU:H	6	0.8
(2,44)	1:22:A:PRO:HD3	1:23:A:LEU:H	7	0.8
(2,44)	1:22:A:PRO:HD3	1:23:A:LEU:H	8	0.8
(2,44)	1:22:A:PRO:HD3	1:23:A:LEU:H	10	0.8
(6,221)	1:110:A:ALA:H	1:112:A:GLU:H	7	0.79
(6,165)	1:70:A:GLU:H	1:72:A:LEU:H	9	0.79
(6,114)	1:50:A:PRO:HG3	1:51:A:GLY:H	9	0.79
(6,111)	1:47:A:LEU:H	1:48:A:THR:HB	13	0.79

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(6,65)	1:31:A:ILE:H	1:32:A:ASP:HB3	2	0.79
(6,65)	1:31:A:ILE:H	1:32:A:ASP:HB3	4	0.79
(6,65)	1:31:A:ILE:H	1:32:A:ASP:HB3	11	0.79
(6,65)	1:31:A:ILE:H	1:32:A:ASP:HB3	14	0.79
(6,47)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HA	12	0.79
(2,196)	1:110:A:ALA:H	1:112:A:GLU:H	7	0.79
(2,144)	1:70:A:GLU:H	1:72:A:LEU:H	9	0.79
(2,104)	1:50:A:PRO:HG3	1:51:A:GLY:H	9	0.79
(2,101)	1:47:A:LEU:H	1:48:A:THR:HB	13	0.79
(2,59)	1:31:A:ILE:H	1:32:A:ASP:HB3	2	0.79
(2,59)	1:31:A:ILE:H	1:32:A:ASP:HB3	4	0.79
(2,59)	1:31:A:ILE:H	1:32:A:ASP:HB3	11	0.79
(2,59)	1:31:A:ILE:H	1:32:A:ASP:HB3	14	0.79
(2,45)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HA	12	0.79
(6,107)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:H	15	0.78
(6,65)	1:31:A:ILE:H	1:32:A:ASP:HB3	3	0.78
(6,47)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HA	11	0.78
(2,97)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:H	15	0.78
(2,59)	1:31:A:ILE:H	1:32:A:ASP:HB3	3	0.78
(2,45)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HA	11	0.78
(6,69)	1:33:A:ALA:HB1	1:34:A:ARG:HD3	4	0.77
(6,69)	1:33:A:ALA:HB2	1:34:A:ARG:HD3	4	0.77
(6,69)	1:33:A:ALA:HB3	1:34:A:ARG:HD3	4	0.77
(2,62)	1:33:A:ALA:HB1	1:34:A:ARG:HD3	4	0.77
(2,62)	1:33:A:ALA:HB2	1:34:A:ARG:HD3	4	0.77
(2,62)	1:33:A:ALA:HB3	1:34:A:ARG:HD3	4	0.77
(6,165)	1:70:A:GLU:H	1:72:A:LEU:H	7	0.76
(6,106)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD21	1	0.76
(6,106)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD22	1	0.76
(6,106)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD23	1	0.76
(6,106)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD21	5	0.76
(6,106)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD22	5	0.76
(6,106)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD23	5	0.76
(6,69)	1:33:A:ALA:HB1	1:34:A:ARG:HD3	3	0.76
(6,69)	1:33:A:ALA:HB2	1:34:A:ARG:HD3	3	0.76
(6,69)	1:33:A:ALA:HB3	1:34:A:ARG:HD3	3	0.76
(6,69)	1:33:A:ALA:HB1	1:34:A:ARG:HD3	5	0.76
(6,69)	1:33:A:ALA:HB2	1:34:A:ARG:HD3	5	0.76
(6,69)	1:33:A:ALA:HB3	1:34:A:ARG:HD3	5	0.76
(2,144)	1:70:A:GLU:H	1:72:A:LEU:H	7	0.76
(2,96)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD21	1	0.76
(2,96)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD22	1	0.76

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,96)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD23	1	0.76
(2,96)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD21	5	0.76
(2,96)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD22	5	0.76
(2,96)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD23	5	0.76
(2,62)	1:33:A:ALA:HB1	1:34:A:ARG:HD3	3	0.76
(2,62)	1:33:A:ALA:HB2	1:34:A:ARG:HD3	3	0.76
(2,62)	1:33:A:ALA:HB3	1:34:A:ARG:HD3	3	0.76
(2,62)	1:33:A:ALA:HB1	1:34:A:ARG:HD3	5	0.76
(2,62)	1:33:A:ALA:HB2	1:34:A:ARG:HD3	5	0.76
(2,62)	1:33:A:ALA:HB3	1:34:A:ARG:HD3	5	0.76
(1,52)	1:87:A:CYS:O	1:76:A:PHE:N	7	0.76
(6,258)	1:144:A:TRP:HB3	1:146:A:THR:H	10	0.75
(6,107)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:H	1	0.75
(2,229)	1:144:A:TRP:HB3	1:146:A:THR:H	10	0.75
(2,97)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:H	1	0.75
(6,258)	1:144:A:TRP:HB3	1:146:A:THR:H	9	0.74
(6,165)	1:70:A:GLU:H	1:72:A:LEU:H	8	0.74
(6,165)	1:70:A:GLU:H	1:72:A:LEU:H	10	0.74
(6,147)	1:62:A:GLU:HG3	1:63:A:MET:H	6	0.74
(2,229)	1:144:A:TRP:HB3	1:146:A:THR:H	9	0.74
(2,144)	1:70:A:GLU:H	1:72:A:LEU:H	8	0.74
(2,144)	1:70:A:GLU:H	1:72:A:LEU:H	10	0.74
(2,130)	1:62:A:GLU:HG3	1:63:A:MET:H	6	0.74
(1,52)	1:87:A:CYS:O	1:76:A:PHE:N	2	0.74
(6,258)	1:144:A:TRP:HB3	1:146:A:THR:H	1	0.73
(6,258)	1:144:A:TRP:HB3	1:146:A:THR:H	5	0.73
(6,258)	1:144:A:TRP:HB3	1:146:A:THR:H	6	0.73
(6,258)	1:144:A:TRP:HB3	1:146:A:THR:H	7	0.73
(6,199)	1:94:A:ASP:HB3	1:95:A:GLU:HB3	1	0.73
(6,199)	1:94:A:ASP:HB3	1:95:A:GLU:HB3	9	0.73
(6,134)	1:57:A:LEU:HD21	1:58:A:GLU:HB2	11	0.73
(6,134)	1:57:A:LEU:HD22	1:58:A:GLU:HB2	11	0.73
(6,134)	1:57:A:LEU:HD23	1:58:A:GLU:HB2	11	0.73
(2,229)	1:144:A:TRP:HB3	1:146:A:THR:H	1	0.73
(2,229)	1:144:A:TRP:HB3	1:146:A:THR:H	5	0.73
(2,229)	1:144:A:TRP:HB3	1:146:A:THR:H	6	0.73
(2,229)	1:144:A:TRP:HB3	1:146:A:THR:H	7	0.73
(2,117)	1:57:A:LEU:HD21	1:58:A:GLU:HB2	11	0.73
(2,117)	1:57:A:LEU:HD22	1:58:A:GLU:HB2	11	0.73
(2,117)	1:57:A:LEU:HD23	1:58:A:GLU:HB2	11	0.73
(6,237)	1:118:A:ARG:HD2	1:119:A:PRO:HG3	8	0.72
(6,237)	1:118:A:ARG:HD2	1:119:A:PRO:HG3	9	0.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(6,147)	1:62:A:GLU:HG3	1:63:A:MET:H	9	0.72
(6,107)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:H	13	0.72
(6,106)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD21	6	0.72
(6,106)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD22	6	0.72
(6,106)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD23	6	0.72
(6,106)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD21	8	0.72
(6,106)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD22	8	0.72
(6,106)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD23	8	0.72
(3,20)	1:118:A:ARG:HD2	1:119:A:PRO:HG3	8	0.72
(3,20)	1:118:A:ARG:HD2	1:119:A:PRO:HG3	9	0.72
(2,130)	1:62:A:GLU:HG3	1:63:A:MET:H	9	0.72
(2,97)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:H	13	0.72
(2,96)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD21	6	0.72
(2,96)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD22	6	0.72
(2,96)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD23	6	0.72
(2,96)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD21	8	0.72
(2,96)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD22	8	0.72
(2,96)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD23	8	0.72
(6,213)	1:104:A:GLN:H	1:105:A:GLY:HA3	1	0.71
(6,213)	1:104:A:GLN:H	1:105:A:GLY:HA3	4	0.71
(6,199)	1:94:A:ASP:HB3	1:95:A:GLU:HB3	4	0.71
(2,189)	1:104:A:GLN:H	1:105:A:GLY:HA3	1	0.71
(2,189)	1:104:A:GLN:H	1:105:A:GLY:HA3	4	0.71
(6,258)	1:144:A:TRP:HB3	1:146:A:THR:H	8	0.7
(6,213)	1:104:A:GLN:H	1:105:A:GLY:HA3	5	0.7
(6,213)	1:104:A:GLN:H	1:105:A:GLY:HA3	11	0.7
(6,199)	1:94:A:ASP:HB3	1:95:A:GLU:HB3	8	0.7
(6,106)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD21	11	0.7
(6,106)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD22	11	0.7
(6,106)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD23	11	0.7
(6,106)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD21	14	0.7
(6,106)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD22	14	0.7
(6,106)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD23	14	0.7
(6,99)	1:42:A:HIS:H	1:44:A:ASP:H	12	0.7
(2,229)	1:144:A:TRP:HB3	1:146:A:THR:H	8	0.7
(2,189)	1:104:A:GLN:H	1:105:A:GLY:HA3	5	0.7
(2,189)	1:104:A:GLN:H	1:105:A:GLY:HA3	11	0.7
(2,96)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD21	11	0.7
(2,96)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD22	11	0.7
(2,96)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD23	11	0.7
(2,96)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD21	14	0.7
(2,96)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD22	14	0.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,96)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD23	14	0.7
(2,89)	1:42:A:HIS:H	1:44:A:ASP:H	12	0.7
(6,258)	1:144:A:TRP:HB3	1:146:A:THR:H	2	0.69
(6,221)	1:110:A:ALA:H	1:112:A:GLU:H	2	0.69
(6,213)	1:104:A:GLN:H	1:105:A:GLY:HA3	2	0.69
(6,213)	1:104:A:GLN:H	1:105:A:GLY:HA3	3	0.69
(6,213)	1:104:A:GLN:H	1:105:A:GLY:HA3	8	0.69
(6,213)	1:104:A:GLN:H	1:105:A:GLY:HA3	12	0.69
(6,213)	1:104:A:GLN:H	1:105:A:GLY:HA3	13	0.69
(6,213)	1:104:A:GLN:H	1:105:A:GLY:HA3	15	0.69
(6,165)	1:70:A:GLU:H	1:72:A:LEU:H	6	0.69
(6,134)	1:57:A:LEU:HD21	1:58:A:GLU:HB2	12	0.69
(6,134)	1:57:A:LEU:HD22	1:58:A:GLU:HB2	12	0.69
(6,134)	1:57:A:LEU:HD23	1:58:A:GLU:HB2	12	0.69
(2,229)	1:144:A:TRP:HB3	1:146:A:THR:H	2	0.69
(2,196)	1:110:A:ALA:H	1:112:A:GLU:H	2	0.69
(2,189)	1:104:A:GLN:H	1:105:A:GLY:HA3	2	0.69
(2,189)	1:104:A:GLN:H	1:105:A:GLY:HA3	3	0.69
(2,189)	1:104:A:GLN:H	1:105:A:GLY:HA3	8	0.69
(2,189)	1:104:A:GLN:H	1:105:A:GLY:HA3	12	0.69
(2,189)	1:104:A:GLN:H	1:105:A:GLY:HA3	13	0.69
(2,189)	1:104:A:GLN:H	1:105:A:GLY:HA3	15	0.69
(2,144)	1:70:A:GLU:H	1:72:A:LEU:H	6	0.69
(2,117)	1:57:A:LEU:HD21	1:58:A:GLU:HB2	12	0.69
(2,117)	1:57:A:LEU:HD22	1:58:A:GLU:HB2	12	0.69
(2,117)	1:57:A:LEU:HD23	1:58:A:GLU:HB2	12	0.69
(1,52)	1:87:A:CYS:O	1:76:A:PHE:N	8	0.69
(6,213)	1:104:A:GLN:H	1:105:A:GLY:HA3	14	0.68
(6,99)	1:42:A:HIS:H	1:44:A:ASP:H	13	0.68
(2,189)	1:104:A:GLN:H	1:105:A:GLY:HA3	14	0.68
(2,89)	1:42:A:HIS:H	1:44:A:ASP:H	13	0.68
(6,213)	1:104:A:GLN:H	1:105:A:GLY:HA3	6	0.67
(6,213)	1:104:A:GLN:H	1:105:A:GLY:HA3	7	0.67
(6,213)	1:104:A:GLN:H	1:105:A:GLY:HA3	10	0.67
(6,199)	1:94:A:ASP:HB3	1:95:A:GLU:HB3	3	0.67
(6,134)	1:57:A:LEU:HD21	1:58:A:GLU:HB2	13	0.67
(6,134)	1:57:A:LEU:HD22	1:58:A:GLU:HB2	13	0.67
(6,134)	1:57:A:LEU:HD23	1:58:A:GLU:HB2	13	0.67
(6,106)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD21	13	0.67
(6,106)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD22	13	0.67
(6,106)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD23	13	0.67
(6,106)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD21	15	0.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(6,106)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD22	15	0.67
(6,106)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD23	15	0.67
(2,189)	1:104:A:GLN:H	1:105:A:GLY:HA3	6	0.67
(2,189)	1:104:A:GLN:H	1:105:A:GLY:HA3	7	0.67
(2,189)	1:104:A:GLN:H	1:105:A:GLY:HA3	10	0.67
(2,117)	1:57:A:LEU:HD21	1:58:A:GLU:HB2	13	0.67
(2,117)	1:57:A:LEU:HD22	1:58:A:GLU:HB2	13	0.67
(2,117)	1:57:A:LEU:HD23	1:58:A:GLU:HB2	13	0.67
(2,96)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD21	13	0.67
(2,96)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD22	13	0.67
(2,96)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD23	13	0.67
(2,96)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD21	15	0.67
(2,96)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD22	15	0.67
(2,96)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD23	15	0.67
(6,258)	1:144:A:TRP:HB3	1:146:A:THR:H	3	0.66
(6,213)	1:104:A:GLN:H	1:105:A:GLY:HA3	9	0.66
(6,199)	1:94:A:ASP:HB3	1:95:A:GLU:HB3	5	0.66
(6,199)	1:94:A:ASP:HB3	1:95:A:GLU:HB3	10	0.66
(6,107)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:H	11	0.66
(2,229)	1:144:A:TRP:HB3	1:146:A:THR:H	3	0.66
(2,189)	1:104:A:GLN:H	1:105:A:GLY:HA3	9	0.66
(2,97)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:H	11	0.66
(6,237)	1:118:A:ARG:HD2	1:119:A:PRO:HG3	7	0.65
(6,199)	1:94:A:ASP:HB3	1:95:A:GLU:HB3	6	0.65
(6,199)	1:94:A:ASP:HB3	1:95:A:GLU:HB3	7	0.65
(6,99)	1:42:A:HIS:H	1:44:A:ASP:H	8	0.65
(6,47)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HA	7	0.65
(6,47)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HA	8	0.65
(3,20)	1:118:A:ARG:HD2	1:119:A:PRO:HG3	7	0.65
(2,89)	1:42:A:HIS:H	1:44:A:ASP:H	8	0.65
(2,45)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HA	7	0.65
(2,45)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HA	8	0.65
(6,99)	1:42:A:HIS:H	1:44:A:ASP:H	6	0.64
(2,89)	1:42:A:HIS:H	1:44:A:ASP:H	6	0.64
(6,47)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HA	6	0.63
(6,46)	1:22:A:PRO:HD3	1:23:A:LEU:H	11	0.63
(6,46)	1:22:A:PRO:HD3	1:23:A:LEU:H	12	0.63
(2,45)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HA	6	0.63
(2,44)	1:22:A:PRO:HD3	1:23:A:LEU:H	11	0.63
(2,44)	1:22:A:PRO:HD3	1:23:A:LEU:H	12	0.63
(1,30)	1:50:A:PRO:O	1:53:A:ARG:N	5	0.63
(6,237)	1:118:A:ARG:HD2	1:119:A:PRO:HG3	10	0.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(6,99)	1:42:A:HIS:H	1:44:A:ASP:H	11	0.62
(6,47)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HA	10	0.62
(6,46)	1:22:A:PRO:HD3	1:23:A:LEU:H	15	0.62
(6,2)	1:1:A:MET:HE1	1:2:A:ASP:H	10	0.62
(6,2)	1:1:A:MET:HE2	1:2:A:ASP:H	10	0.62
(6,2)	1:1:A:MET:HE3	1:2:A:ASP:H	10	0.62
(3,20)	1:118:A:ARG:HD2	1:119:A:PRO:HG3	10	0.62
(2,89)	1:42:A:HIS:H	1:44:A:ASP:H	11	0.62
(2,45)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HA	10	0.62
(2,44)	1:22:A:PRO:HD3	1:23:A:LEU:H	15	0.62
(2,2)	1:1:A:MET:HE1	1:2:A:ASP:H	10	0.62
(2,2)	1:1:A:MET:HE2	1:2:A:ASP:H	10	0.62
(2,2)	1:1:A:MET:HE3	1:2:A:ASP:H	10	0.62
(1,17)	1:27:A:GLY:O	1:31:A:ILE:N	15	0.61
(6,271)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD21	2	0.6
(6,271)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD22	2	0.6
(6,271)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD23	2	0.6
(6,271)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD21	4	0.6
(6,271)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD22	4	0.6
(6,271)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD23	4	0.6
(6,107)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:H	14	0.6
(6,47)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HA	5	0.6
(6,46)	1:22:A:PRO:HD3	1:23:A:LEU:H	14	0.6
(6,2)	1:1:A:MET:HE1	1:2:A:ASP:H	6	0.6
(6,2)	1:1:A:MET:HE2	1:2:A:ASP:H	6	0.6
(6,2)	1:1:A:MET:HE3	1:2:A:ASP:H	6	0.6
(2,240)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD21	2	0.6
(2,240)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD22	2	0.6
(2,240)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD23	2	0.6
(2,240)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD21	4	0.6
(2,240)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD22	4	0.6
(2,240)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD23	4	0.6
(2,97)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:H	14	0.6
(2,45)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HA	5	0.6
(2,44)	1:22:A:PRO:HD3	1:23:A:LEU:H	14	0.6
(2,2)	1:1:A:MET:HE1	1:2:A:ASP:H	6	0.6
(2,2)	1:1:A:MET:HE2	1:2:A:ASP:H	6	0.6
(2,2)	1:1:A:MET:HE3	1:2:A:ASP:H	6	0.6
(6,250)	1:131:A:ASP:HA	1:132:A:TYR:HB3	4	0.59
(6,106)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD21	12	0.59
(6,106)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD22	12	0.59
(6,106)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD23	12	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(6,46)	1:22:A:PRO:HD3	1:23:A:LEU:H	9	0.59
(6,2)	1:1:A:MET:HE1	1:2:A:ASP:H	3	0.59
(6,2)	1:1:A:MET:HE2	1:2:A:ASP:H	3	0.59
(6,2)	1:1:A:MET:HE3	1:2:A:ASP:H	3	0.59
(2,221)	1:131:A:ASP:HA	1:132:A:TYR:HB3	4	0.59
(2,96)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD21	12	0.59
(2,96)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD22	12	0.59
(2,96)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:HD23	12	0.59
(2,44)	1:22:A:PRO:HD3	1:23:A:LEU:H	9	0.59
(2,2)	1:1:A:MET:HE1	1:2:A:ASP:H	3	0.59
(2,2)	1:1:A:MET:HE2	1:2:A:ASP:H	3	0.59
(2,2)	1:1:A:MET:HE3	1:2:A:ASP:H	3	0.59
(6,271)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD21	9	0.58
(6,271)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD22	9	0.58
(6,271)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD23	9	0.58
(6,271)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD21	10	0.58
(6,271)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD22	10	0.58
(6,271)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD23	10	0.58
(6,221)	1:110:A:ALA:H	1:112:A:GLU:H	3	0.58
(6,99)	1:42:A:HIS:H	1:44:A:ASP:H	1	0.58
(2,240)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD21	9	0.58
(2,240)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD22	9	0.58
(2,240)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD23	9	0.58
(2,240)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD21	10	0.58
(2,240)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD22	10	0.58
(2,240)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD23	10	0.58
(2,196)	1:110:A:ALA:H	1:112:A:GLU:H	3	0.58
(2,89)	1:42:A:HIS:H	1:44:A:ASP:H	1	0.58
(1,30)	1:50:A:PRO:O	1:53:A:ARG:N	3	0.58
(6,107)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:H	12	0.57
(6,69)	1:33:A:ALA:HB1	1:34:A:ARG:HD3	11	0.57
(6,69)	1:33:A:ALA:HB2	1:34:A:ARG:HD3	11	0.57
(6,69)	1:33:A:ALA:HB3	1:34:A:ARG:HD3	11	0.57
(6,46)	1:22:A:PRO:HD3	1:23:A:LEU:H	1	0.57
(6,46)	1:22:A:PRO:HD3	1:23:A:LEU:H	2	0.57
(6,46)	1:22:A:PRO:HD3	1:23:A:LEU:H	4	0.57
(2,97)	1:45:A:ILE:H	1:47:A:LEU:H	12	0.57
(2,62)	1:33:A:ALA:HB1	1:34:A:ARG:HD3	11	0.57
(2,62)	1:33:A:ALA:HB2	1:34:A:ARG:HD3	11	0.57
(2,62)	1:33:A:ALA:HB3	1:34:A:ARG:HD3	11	0.57
(2,44)	1:22:A:PRO:HD3	1:23:A:LEU:H	1	0.57
(2,44)	1:22:A:PRO:HD3	1:23:A:LEU:H	2	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,44)	1:22:A:PRO:HD3	1:23:A:LEU:H	4	0.57
(6,183)	1:82:A:ASP:HB3	1:83:A:GLU:HA	9	0.56
(6,69)	1:33:A:ALA:HB1	1:34:A:ARG:HD3	14	0.56
(6,69)	1:33:A:ALA:HB2	1:34:A:ARG:HD3	14	0.56
(6,69)	1:33:A:ALA:HB3	1:34:A:ARG:HD3	14	0.56
(6,2)	1:1:A:MET:HE1	1:2:A:ASP:H	2	0.56
(6,2)	1:1:A:MET:HE2	1:2:A:ASP:H	2	0.56
(6,2)	1:1:A:MET:HE3	1:2:A:ASP:H	2	0.56
(2,162)	1:82:A:ASP:HB3	1:83:A:GLU:HA	9	0.56
(2,62)	1:33:A:ALA:HB1	1:34:A:ARG:HD3	14	0.56
(2,62)	1:33:A:ALA:HB2	1:34:A:ARG:HD3	14	0.56
(2,62)	1:33:A:ALA:HB3	1:34:A:ARG:HD3	14	0.56
(2,2)	1:1:A:MET:HE1	1:2:A:ASP:H	2	0.56
(2,2)	1:1:A:MET:HE2	1:2:A:ASP:H	2	0.56
(2,2)	1:1:A:MET:HE3	1:2:A:ASP:H	2	0.56
(6,271)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD21	8	0.55
(6,271)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD22	8	0.55
(6,271)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD23	8	0.55
(6,237)	1:118:A:ARG:HD2	1:119:A:PRO:HG3	11	0.55
(6,183)	1:82:A:ASP:HB3	1:83:A:GLU:HA	6	0.55
(6,99)	1:42:A:HIS:H	1:44:A:ASP:H	10	0.55
(6,99)	1:42:A:HIS:H	1:44:A:ASP:H	15	0.55
(6,46)	1:22:A:PRO:HD3	1:23:A:LEU:H	3	0.55
(3,20)	1:118:A:ARG:HD2	1:119:A:PRO:HG3	11	0.55
(2,240)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD21	8	0.55
(2,240)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD22	8	0.55
(2,240)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD23	8	0.55
(2,162)	1:82:A:ASP:HB3	1:83:A:GLU:HA	6	0.55
(2,89)	1:42:A:HIS:H	1:44:A:ASP:H	10	0.55
(2,89)	1:42:A:HIS:H	1:44:A:ASP:H	15	0.55
(2,44)	1:22:A:PRO:HD3	1:23:A:LEU:H	3	0.55
(6,271)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD21	7	0.54
(6,271)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD22	7	0.54
(6,271)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD23	7	0.54
(6,183)	1:82:A:ASP:HB3	1:83:A:GLU:HA	8	0.54
(6,99)	1:42:A:HIS:H	1:44:A:ASP:H	7	0.54
(6,99)	1:42:A:HIS:H	1:44:A:ASP:H	14	0.54
(6,69)	1:33:A:ALA:HB1	1:34:A:ARG:HD3	7	0.54
(6,69)	1:33:A:ALA:HB2	1:34:A:ARG:HD3	7	0.54
(6,69)	1:33:A:ALA:HB3	1:34:A:ARG:HD3	7	0.54
(6,2)	1:1:A:MET:HE1	1:2:A:ASP:H	9	0.54
(6,2)	1:1:A:MET:HE2	1:2:A:ASP:H	9	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(6,2)	1:1:A:MET:HE3	1:2:A:ASP:H	9	0.54
(2,240)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD21	7	0.54
(2,240)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD22	7	0.54
(2,240)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD23	7	0.54
(2,162)	1:82:A:ASP:HB3	1:83:A:GLU:HA	8	0.54
(2,89)	1:42:A:HIS:H	1:44:A:ASP:H	7	0.54
(2,89)	1:42:A:HIS:H	1:44:A:ASP:H	14	0.54
(2,62)	1:33:A:ALA:HB1	1:34:A:ARG:HD3	7	0.54
(2,62)	1:33:A:ALA:HB2	1:34:A:ARG:HD3	7	0.54
(2,62)	1:33:A:ALA:HB3	1:34:A:ARG:HD3	7	0.54
(2,2)	1:1:A:MET:HE1	1:2:A:ASP:H	9	0.54
(2,2)	1:1:A:MET:HE2	1:2:A:ASP:H	9	0.54
(2,2)	1:1:A:MET:HE3	1:2:A:ASP:H	9	0.54
(6,271)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD21	1	0.53
(6,271)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD22	1	0.53
(6,271)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD23	1	0.53
(6,250)	1:131:A:ASP:HA	1:132:A:TYR:HB3	12	0.53
(6,183)	1:82:A:ASP:HB3	1:83:A:GLU:HA	7	0.53
(6,121)	1:54:A:ARG:HA	1:55:A:GLY:HA3	6	0.53
(6,99)	1:42:A:HIS:H	1:44:A:ASP:H	2	0.53
(2,240)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD21	1	0.53
(2,240)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD22	1	0.53
(2,240)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD23	1	0.53
(2,221)	1:131:A:ASP:HA	1:132:A:TYR:HB3	12	0.53
(2,162)	1:82:A:ASP:HB3	1:83:A:GLU:HA	7	0.53
(2,108)	1:54:A:ARG:HA	1:55:A:GLY:HA3	6	0.53
(2,89)	1:42:A:HIS:H	1:44:A:ASP:H	2	0.53
(6,237)	1:118:A:ARG:HD2	1:119:A:PRO:HG3	12	0.52
(6,223)	1:111:A:ALA:H	1:112:A:GLU:HG2	15	0.52
(6,221)	1:110:A:ALA:H	1:112:A:GLU:H	1	0.52
(6,184)	1:82:A:ASP:H	1:83:A:GLU:HB3	12	0.52
(6,134)	1:57:A:LEU:HD21	1:58:A:GLU:HB2	15	0.52
(6,134)	1:57:A:LEU:HD22	1:58:A:GLU:HB2	15	0.52
(6,134)	1:57:A:LEU:HD23	1:58:A:GLU:HB2	15	0.52
(6,121)	1:54:A:ARG:HA	1:55:A:GLY:HA3	1	0.52
(6,121)	1:54:A:ARG:HA	1:55:A:GLY:HA3	2	0.52
(6,121)	1:54:A:ARG:HA	1:55:A:GLY:HA3	4	0.52
(6,121)	1:54:A:ARG:HA	1:55:A:GLY:HA3	5	0.52
(6,121)	1:54:A:ARG:HA	1:55:A:GLY:HA3	8	0.52
(6,121)	1:54:A:ARG:HA	1:55:A:GLY:HA3	9	0.52
(6,121)	1:54:A:ARG:HA	1:55:A:GLY:HA3	11	0.52
(6,121)	1:54:A:ARG:HA	1:55:A:GLY:HA3	12	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(6,121)	1:54:A:ARG:HA	1:55:A:GLY:HA3	14	0.52
(6,99)	1:42:A:HIS:H	1:44:A:ASP:H	3	0.52
(6,99)	1:42:A:HIS:H	1:44:A:ASP:H	9	0.52
(6,47)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HA	13	0.52
(3,20)	1:118:A:ARG:HD2	1:119:A:PRO:HG3	12	0.52
(2,198)	1:111:A:ALA:H	1:112:A:GLU:HG2	15	0.52
(2,196)	1:110:A:ALA:H	1:112:A:GLU:H	1	0.52
(2,163)	1:82:A:ASP:H	1:83:A:GLU:HB3	12	0.52
(2,117)	1:57:A:LEU:HD21	1:58:A:GLU:HB2	15	0.52
(2,117)	1:57:A:LEU:HD22	1:58:A:GLU:HB2	15	0.52
(2,117)	1:57:A:LEU:HD23	1:58:A:GLU:HB2	15	0.52
(2,108)	1:54:A:ARG:HA	1:55:A:GLY:HA3	1	0.52
(2,108)	1:54:A:ARG:HA	1:55:A:GLY:HA3	2	0.52
(2,108)	1:54:A:ARG:HA	1:55:A:GLY:HA3	4	0.52
(2,108)	1:54:A:ARG:HA	1:55:A:GLY:HA3	5	0.52
(2,108)	1:54:A:ARG:HA	1:55:A:GLY:HA3	8	0.52
(2,108)	1:54:A:ARG:HA	1:55:A:GLY:HA3	9	0.52
(2,108)	1:54:A:ARG:HA	1:55:A:GLY:HA3	11	0.52
(2,108)	1:54:A:ARG:HA	1:55:A:GLY:HA3	12	0.52
(2,108)	1:54:A:ARG:HA	1:55:A:GLY:HA3	14	0.52
(2,89)	1:42:A:HIS:H	1:44:A:ASP:H	3	0.52
(2,89)	1:42:A:HIS:H	1:44:A:ASP:H	9	0.52
(2,45)	1:22:A:PRO:HD2	1:23:A:LEU:HA	13	0.52
(6,271)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD21	5	0.51
(6,271)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD22	5	0.51
(6,271)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD23	5	0.51
(6,121)	1:54:A:ARG:HA	1:55:A:GLY:HA3	3	0.51
(6,121)	1:54:A:ARG:HA	1:55:A:GLY:HA3	7	0.51
(6,121)	1:54:A:ARG:HA	1:55:A:GLY:HA3	10	0.51
(6,121)	1:54:A:ARG:HA	1:55:A:GLY:HA3	13	0.51
(6,99)	1:42:A:HIS:H	1:44:A:ASP:H	5	0.51
(6,69)	1:33:A:ALA:HB1	1:34:A:ARG:HD3	8	0.51
(6,69)	1:33:A:ALA:HB2	1:34:A:ARG:HD3	8	0.51
(6,69)	1:33:A:ALA:HB3	1:34:A:ARG:HD3	8	0.51
(6,69)	1:33:A:ALA:HB1	1:34:A:ARG:HD3	10	0.51
(6,69)	1:33:A:ALA:HB2	1:34:A:ARG:HD3	10	0.51
(6,69)	1:33:A:ALA:HB3	1:34:A:ARG:HD3	10	0.51
(2,240)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD21	5	0.51
(2,240)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD22	5	0.51
(2,240)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD23	5	0.51
(2,108)	1:54:A:ARG:HA	1:55:A:GLY:HA3	3	0.51
(2,108)	1:54:A:ARG:HA	1:55:A:GLY:HA3	7	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,108)	1:54:A:ARG:HA	1:55:A:GLY:HA3	10	0.51
(2,108)	1:54:A:ARG:HA	1:55:A:GLY:HA3	13	0.51
(2,89)	1:42:A:HIS:H	1:44:A:ASP:H	5	0.51
(2,62)	1:33:A:ALA:HB1	1:34:A:ARG:HD3	8	0.51
(2,62)	1:33:A:ALA:HB2	1:34:A:ARG:HD3	8	0.51
(2,62)	1:33:A:ALA:HB3	1:34:A:ARG:HD3	8	0.51
(2,62)	1:33:A:ALA:HB1	1:34:A:ARG:HD3	10	0.51
(2,62)	1:33:A:ALA:HB2	1:34:A:ARG:HD3	10	0.51
(2,62)	1:33:A:ALA:HB3	1:34:A:ARG:HD3	10	0.51
(1,52)	1:87:A:CYS:O	1:76:A:PHE:N	10	0.51
(6,271)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD21	3	0.5
(6,271)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD22	3	0.5
(6,271)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD23	3	0.5
(6,271)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD21	6	0.5
(6,271)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD22	6	0.5
(6,271)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD23	6	0.5
(6,271)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD21	11	0.5
(6,271)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD22	11	0.5
(6,271)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD23	11	0.5
(6,271)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD21	12	0.5
(6,271)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD22	12	0.5
(6,271)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD23	12	0.5
(6,271)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD21	14	0.5
(6,271)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD22	14	0.5
(6,271)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD23	14	0.5
(6,183)	1:82:A:ASP:HB3	1:83:A:GLU:HA	10	0.5
(6,121)	1:54:A:ARG:HA	1:55:A:GLY:HA3	15	0.5
(2,240)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD21	3	0.5
(2,240)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD22	3	0.5
(2,240)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD23	3	0.5
(2,240)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD21	6	0.5
(2,240)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD22	6	0.5
(2,240)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD23	6	0.5
(2,240)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD21	11	0.5
(2,240)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD22	11	0.5
(2,240)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD23	11	0.5
(2,240)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD21	12	0.5
(2,240)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD22	12	0.5
(2,240)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD23	12	0.5
(2,240)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD21	14	0.5
(2,240)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD22	14	0.5
(2,240)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD23	14	0.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,162)	1:82:A:ASP:HB3	1:83:A:GLU:HA	10	0.5
(2,108)	1:54:A:ARG:HA	1:55:A:GLY:HA3	15	0.5
(6,271)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD21	15	0.49
(6,271)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD22	15	0.49
(6,271)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD23	15	0.49
(6,237)	1:118:A:ARG:HD2	1:119:A:PRO:HG3	15	0.49
(6,184)	1:82:A:ASP:H	1:83:A:GLU:HB3	11	0.49
(6,184)	1:82:A:ASP:H	1:83:A:GLU:HB3	14	0.49
(6,184)	1:82:A:ASP:H	1:83:A:GLU:HB3	15	0.49
(6,118)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD11	7	0.49
(6,118)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD12	7	0.49
(6,118)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD13	7	0.49
(6,99)	1:42:A:HIS:H	1:44:A:ASP:H	4	0.49
(6,69)	1:33:A:ALA:HB1	1:34:A:ARG:HD3	6	0.49
(6,69)	1:33:A:ALA:HB2	1:34:A:ARG:HD3	6	0.49
(6,69)	1:33:A:ALA:HB3	1:34:A:ARG:HD3	6	0.49
(6,69)	1:33:A:ALA:HB1	1:34:A:ARG:HD3	9	0.49
(6,69)	1:33:A:ALA:HB2	1:34:A:ARG:HD3	9	0.49
(6,69)	1:33:A:ALA:HB3	1:34:A:ARG:HD3	9	0.49
(6,2)	1:1:A:MET:HE1	1:2:A:ASP:H	1	0.49
(6,2)	1:1:A:MET:HE2	1:2:A:ASP:H	1	0.49
(6,2)	1:1:A:MET:HE3	1:2:A:ASP:H	1	0.49
(3,20)	1:118:A:ARG:HD2	1:119:A:PRO:HG3	15	0.49
(3,8)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD11	7	0.49
(3,8)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD12	7	0.49
(3,8)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD13	7	0.49
(2,240)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD21	15	0.49
(2,240)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD22	15	0.49
(2,240)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD23	15	0.49
(2,163)	1:82:A:ASP:H	1:83:A:GLU:HB3	11	0.49
(2,163)	1:82:A:ASP:H	1:83:A:GLU:HB3	14	0.49
(2,163)	1:82:A:ASP:H	1:83:A:GLU:HB3	15	0.49
(2,89)	1:42:A:HIS:H	1:44:A:ASP:H	4	0.49
(2,62)	1:33:A:ALA:HB1	1:34:A:ARG:HD3	6	0.49
(2,62)	1:33:A:ALA:HB2	1:34:A:ARG:HD3	6	0.49
(2,62)	1:33:A:ALA:HB3	1:34:A:ARG:HD3	6	0.49
(2,62)	1:33:A:ALA:HB1	1:34:A:ARG:HD3	9	0.49
(2,62)	1:33:A:ALA:HB2	1:34:A:ARG:HD3	9	0.49
(2,62)	1:33:A:ALA:HB3	1:34:A:ARG:HD3	9	0.49
(2,2)	1:1:A:MET:HE1	1:2:A:ASP:H	1	0.49
(2,2)	1:1:A:MET:HE2	1:2:A:ASP:H	1	0.49
(2,2)	1:1:A:MET:HE3	1:2:A:ASP:H	1	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,52)	1:87:A:CYS:O	1:76:A:PHE:N	5	0.49
(1,52)	1:87:A:CYS:O	1:76:A:PHE:N	6	0.49
(6,283)	1:163:A:LYS:HD3	1:164:A:VAL:H	1	0.48
(6,283)	1:163:A:LYS:HD3	1:164:A:VAL:H	3	0.48
(6,283)	1:163:A:LYS:HD3	1:164:A:VAL:H	5	0.48
(6,250)	1:131:A:ASP:HA	1:132:A:TYR:HB3	15	0.48
(6,237)	1:118:A:ARG:HD2	1:119:A:PRO:HG3	13	0.48
(6,198)	1:94:A:ASP:HB3	1:95:A:GLU:HB2	11	0.48
(6,183)	1:82:A:ASP:HB3	1:83:A:GLU:HA	4	0.48
(6,118)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD11	9	0.48
(6,118)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD12	9	0.48
(6,118)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD13	9	0.48
(3,20)	1:118:A:ARG:HD2	1:119:A:PRO:HG3	13	0.48
(3,8)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD11	9	0.48
(3,8)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD12	9	0.48
(3,8)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD13	9	0.48
(2,251)	1:163:A:LYS:HD3	1:164:A:VAL:H	1	0.48
(2,251)	1:163:A:LYS:HD3	1:164:A:VAL:H	3	0.48
(2,251)	1:163:A:LYS:HD3	1:164:A:VAL:H	5	0.48
(2,221)	1:131:A:ASP:HA	1:132:A:TYR:HB3	15	0.48
(2,162)	1:82:A:ASP:HB3	1:83:A:GLU:HA	4	0.48
(1,30)	1:50:A:PRO:O	1:53:A:ARG:N	4	0.48
(6,283)	1:163:A:LYS:HD3	1:164:A:VAL:H	2	0.47
(6,283)	1:163:A:LYS:HD3	1:164:A:VAL:H	4	0.47
(6,283)	1:163:A:LYS:HD3	1:164:A:VAL:H	6	0.47
(6,283)	1:163:A:LYS:HD3	1:164:A:VAL:H	7	0.47
(6,283)	1:163:A:LYS:HD3	1:164:A:VAL:H	8	0.47
(6,283)	1:163:A:LYS:HD3	1:164:A:VAL:H	9	0.47
(6,271)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD21	13	0.47
(6,271)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD22	13	0.47
(6,271)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD23	13	0.47
(6,118)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD11	10	0.47
(6,118)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD12	10	0.47
(6,118)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD13	10	0.47
(3,8)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD11	10	0.47
(3,8)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD12	10	0.47
(3,8)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD13	10	0.47
(2,251)	1:163:A:LYS:HD3	1:164:A:VAL:H	2	0.47
(2,251)	1:163:A:LYS:HD3	1:164:A:VAL:H	4	0.47
(2,251)	1:163:A:LYS:HD3	1:164:A:VAL:H	6	0.47
(2,251)	1:163:A:LYS:HD3	1:164:A:VAL:H	7	0.47
(2,251)	1:163:A:LYS:HD3	1:164:A:VAL:H	8	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,251)	1:163:A:LYS:HD3	1:164:A:VAL:H	9	0.47
(2,240)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD21	13	0.47
(2,240)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD22	13	0.47
(2,240)	1:153:A:ARG:H	1:154:A:LEU:HD23	13	0.47
(1,52)	1:87:A:CYS:O	1:76:A:PHE:N	1	0.47
(1,52)	1:87:A:CYS:O	1:76:A:PHE:N	13	0.47
(6,250)	1:131:A:ASP:HA	1:132:A:TYR:HB3	14	0.46
(6,248)	1:126:A:GLU:HG2	1:127:A:ALA:H	10	0.46
(2,221)	1:131:A:ASP:HA	1:132:A:TYR:HB3	14	0.46
(2,219)	1:126:A:GLU:HG2	1:127:A:ALA:H	10	0.46
(6,248)	1:126:A:GLU:HG2	1:127:A:ALA:H	6	0.45
(6,248)	1:126:A:GLU:HG2	1:127:A:ALA:H	7	0.45
(2,219)	1:126:A:GLU:HG2	1:127:A:ALA:H	6	0.45
(2,219)	1:126:A:GLU:HG2	1:127:A:ALA:H	7	0.45
(1,52)	1:87:A:CYS:O	1:76:A:PHE:N	9	0.45
(1,17)	1:27:A:GLY:O	1:31:A:ILE:N	13	0.45
(6,264)	1:147:A:LYS:HD3	1:148:A:HIS:H	4	0.44
(6,250)	1:131:A:ASP:HA	1:132:A:TYR:HB3	11	0.44
(6,250)	1:131:A:ASP:HA	1:132:A:TYR:HB3	13	0.44
(6,248)	1:126:A:GLU:HG2	1:127:A:ALA:H	3	0.44
(6,248)	1:126:A:GLU:HG2	1:127:A:ALA:H	8	0.44
(6,248)	1:126:A:GLU:HG2	1:127:A:ALA:H	9	0.44
(6,223)	1:111:A:ALA:H	1:112:A:GLU:HG2	13	0.44
(6,184)	1:82:A:ASP:H	1:83:A:GLU:HB3	13	0.44
(6,118)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD11	8	0.44
(6,118)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD12	8	0.44
(6,118)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD13	8	0.44
(3,8)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD11	8	0.44
(3,8)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD12	8	0.44
(3,8)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD13	8	0.44
(2,234)	1:147:A:LYS:HD3	1:148:A:HIS:H	4	0.44
(2,221)	1:131:A:ASP:HA	1:132:A:TYR:HB3	11	0.44
(2,221)	1:131:A:ASP:HA	1:132:A:TYR:HB3	13	0.44
(2,219)	1:126:A:GLU:HG2	1:127:A:ALA:H	3	0.44
(2,219)	1:126:A:GLU:HG2	1:127:A:ALA:H	8	0.44
(2,219)	1:126:A:GLU:HG2	1:127:A:ALA:H	9	0.44
(2,198)	1:111:A:ALA:H	1:112:A:GLU:HG2	13	0.44
(2,163)	1:82:A:ASP:H	1:83:A:GLU:HB3	13	0.44
(6,248)	1:126:A:GLU:HG2	1:127:A:ALA:H	1	0.43
(6,248)	1:126:A:GLU:HG2	1:127:A:ALA:H	12	0.43
(6,248)	1:126:A:GLU:HG2	1:127:A:ALA:H	14	0.43
(2,219)	1:126:A:GLU:HG2	1:127:A:ALA:H	1	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,219)	1:126:A:GLU:HG2	1:127:A:ALA:H	12	0.43
(2,219)	1:126:A:GLU:HG2	1:127:A:ALA:H	14	0.43
(6,283)	1:163:A:LYS:HD3	1:164:A:VAL:H	11	0.42
(2,251)	1:163:A:LYS:HD3	1:164:A:VAL:H	11	0.42
(1,30)	1:50:A:PRO:O	1:53:A:ARG:N	6	0.42
(6,283)	1:163:A:LYS:HD3	1:164:A:VAL:H	12	0.41
(6,264)	1:147:A:LYS:HD3	1:148:A:HIS:H	8	0.41
(6,264)	1:147:A:LYS:HD3	1:148:A:HIS:H	9	0.41
(6,248)	1:126:A:GLU:HG2	1:127:A:ALA:H	4	0.41
(6,248)	1:126:A:GLU:HG2	1:127:A:ALA:H	5	0.41
(6,248)	1:126:A:GLU:HG2	1:127:A:ALA:H	15	0.41
(6,198)	1:94:A:ASP:HB3	1:95:A:GLU:HB2	15	0.41
(6,118)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD11	1	0.41
(6,118)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD12	1	0.41
(6,118)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD13	1	0.41
(6,118)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD11	2	0.41
(6,118)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD12	2	0.41
(6,118)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD13	2	0.41
(6,118)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD11	5	0.41
(6,118)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD12	5	0.41
(6,118)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD13	5	0.41
(6,89)	1:41:A:LYS:HB2	1:42:A:HIS:HA	15	0.41
(3,8)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD11	1	0.41
(3,8)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD12	1	0.41
(3,8)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD13	1	0.41
(3,8)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD11	2	0.41
(3,8)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD12	2	0.41
(3,8)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD13	2	0.41
(3,8)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD11	5	0.41
(3,8)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD12	5	0.41
(3,8)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD13	5	0.41
(2,251)	1:163:A:LYS:HD3	1:164:A:VAL:H	12	0.41
(2,234)	1:147:A:LYS:HD3	1:148:A:HIS:H	8	0.41
(2,234)	1:147:A:LYS:HD3	1:148:A:HIS:H	9	0.41
(2,219)	1:126:A:GLU:HG2	1:127:A:ALA:H	4	0.41
(2,219)	1:126:A:GLU:HG2	1:127:A:ALA:H	5	0.41
(2,219)	1:126:A:GLU:HG2	1:127:A:ALA:H	15	0.41
(2,80)	1:41:A:LYS:HB2	1:42:A:HIS:HA	15	0.41
(1,24)	1:33:A:ALA:O	1:114:A:VAL:N	1	0.41
(6,283)	1:163:A:LYS:HD3	1:164:A:VAL:H	15	0.4
(6,264)	1:147:A:LYS:HD3	1:148:A:HIS:H	10	0.4
(6,264)	1:147:A:LYS:HD3	1:148:A:HIS:H	14	0.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(6,118)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD11	6	0.4
(6,118)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD12	6	0.4
(6,118)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD13	6	0.4
(3,8)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD11	6	0.4
(3,8)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD12	6	0.4
(3,8)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD13	6	0.4
(2,251)	1:163:A:LYS:HD3	1:164:A:VAL:H	15	0.4
(2,234)	1:147:A:LYS:HD3	1:148:A:HIS:H	10	0.4
(2,234)	1:147:A:LYS:HD3	1:148:A:HIS:H	14	0.4
(1,30)	1:50:A:PRO:O	1:53:A:ARG:N	2	0.4
(6,264)	1:147:A:LYS:HD3	1:148:A:HIS:H	6	0.39
(6,264)	1:147:A:LYS:HD3	1:148:A:HIS:H	11	0.39
(6,264)	1:147:A:LYS:HD3	1:148:A:HIS:H	12	0.39
(6,264)	1:147:A:LYS:HD3	1:148:A:HIS:H	13	0.39
(6,264)	1:147:A:LYS:HD3	1:148:A:HIS:H	15	0.39
(6,239)	1:119:A:PRO:HG3	1:120:A:VAL:H	14	0.39
(6,89)	1:41:A:LYS:HB2	1:42:A:HIS:HA	12	0.39
(6,89)	1:41:A:LYS:HB2	1:42:A:HIS:HA	13	0.39
(6,89)	1:41:A:LYS:HB2	1:42:A:HIS:HA	14	0.39
(2,234)	1:147:A:LYS:HD3	1:148:A:HIS:H	6	0.39
(2,234)	1:147:A:LYS:HD3	1:148:A:HIS:H	11	0.39
(2,234)	1:147:A:LYS:HD3	1:148:A:HIS:H	12	0.39
(2,234)	1:147:A:LYS:HD3	1:148:A:HIS:H	13	0.39
(2,234)	1:147:A:LYS:HD3	1:148:A:HIS:H	15	0.39
(2,211)	1:119:A:PRO:HG3	1:120:A:VAL:H	14	0.39
(2,80)	1:41:A:LYS:HB2	1:42:A:HIS:HA	12	0.39
(2,80)	1:41:A:LYS:HB2	1:42:A:HIS:HA	13	0.39
(2,80)	1:41:A:LYS:HB2	1:42:A:HIS:HA	14	0.39
(1,54)	1:90:A:ALA:O	1:51:A:GLY:N	11	0.39
(1,17)	1:27:A:GLY:O	1:31:A:ILE:N	12	0.39
(6,283)	1:163:A:LYS:HD3	1:164:A:VAL:H	14	0.38
(6,257)	1:144:A:TRP:HB2	1:145:A:PRO:HD2	13	0.38
(6,239)	1:119:A:PRO:HG3	1:120:A:VAL:H	15	0.38
(6,221)	1:110:A:ALA:H	1:112:A:GLU:H	4	0.38
(6,133)	1:57:A:LEU:HG	1:58:A:GLU:HB3	14	0.38
(6,2)	1:1:A:MET:HE1	1:2:A:ASP:H	5	0.38
(6,2)	1:1:A:MET:HE2	1:2:A:ASP:H	5	0.38
(6,2)	1:1:A:MET:HE3	1:2:A:ASP:H	5	0.38
(2,251)	1:163:A:LYS:HD3	1:164:A:VAL:H	14	0.38
(2,228)	1:144:A:TRP:HB2	1:145:A:PRO:HD2	13	0.38
(2,211)	1:119:A:PRO:HG3	1:120:A:VAL:H	15	0.38
(2,196)	1:110:A:ALA:H	1:112:A:GLU:H	4	0.38

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,116)	1:57:A:LEU:HG	1:58:A:GLU:HB3	14	0.38
(2,2)	1:1:A:MET:HE1	1:2:A:ASP:H	5	0.38
(2,2)	1:1:A:MET:HE2	1:2:A:ASP:H	5	0.38
(2,2)	1:1:A:MET:HE3	1:2:A:ASP:H	5	0.38
(1,52)	1:87:A:CYS:O	1:76:A:PHE:N	14	0.38
(6,283)	1:163:A:LYS:HD3	1:164:A:VAL:H	13	0.37
(6,264)	1:147:A:LYS:HD3	1:148:A:HIS:H	7	0.37
(6,241)	1:119:A:PRO:HG2	1:120:A:VAL:H	1	0.37
(6,241)	1:119:A:PRO:HG2	1:120:A:VAL:H	6	0.37
(6,239)	1:119:A:PRO:HG3	1:120:A:VAL:H	11	0.37
(6,198)	1:94:A:ASP:HB3	1:95:A:GLU:HB2	12	0.37
(6,198)	1:94:A:ASP:HB3	1:95:A:GLU:HB2	14	0.37
(6,2)	1:1:A:MET:HE1	1:2:A:ASP:H	12	0.37
(6,2)	1:1:A:MET:HE2	1:2:A:ASP:H	12	0.37
(6,2)	1:1:A:MET:HE3	1:2:A:ASP:H	12	0.37
(2,251)	1:163:A:LYS:HD3	1:164:A:VAL:H	13	0.37
(2,234)	1:147:A:LYS:HD3	1:148:A:HIS:H	7	0.37
(2,213)	1:119:A:PRO:HG2	1:120:A:VAL:H	1	0.37
(2,213)	1:119:A:PRO:HG2	1:120:A:VAL:H	6	0.37
(2,211)	1:119:A:PRO:HG3	1:120:A:VAL:H	11	0.37
(2,2)	1:1:A:MET:HE1	1:2:A:ASP:H	12	0.37
(2,2)	1:1:A:MET:HE2	1:2:A:ASP:H	12	0.37
(2,2)	1:1:A:MET:HE3	1:2:A:ASP:H	12	0.37
(1,74)	1:148:A:HIS:O	1:152:A:TYR:N	4	0.37
(1,30)	1:50:A:PRO:O	1:53:A:ARG:N	1	0.37
(1,30)	1:50:A:PRO:O	1:53:A:ARG:N	8	0.37
(1,23)	1:32:A:ASP:O	1:37:A:ARG:N	2	0.37
(1,17)	1:27:A:GLY:O	1:31:A:ILE:N	11	0.37
(6,241)	1:119:A:PRO:HG2	1:120:A:VAL:H	5	0.36
(6,239)	1:119:A:PRO:HG3	1:120:A:VAL:H	12	0.36
(6,198)	1:94:A:ASP:HB3	1:95:A:GLU:HB2	13	0.36
(6,133)	1:57:A:LEU:HG	1:58:A:GLU:HB3	11	0.36
(6,2)	1:1:A:MET:HE1	1:2:A:ASP:H	14	0.36
(6,2)	1:1:A:MET:HE2	1:2:A:ASP:H	14	0.36
(6,2)	1:1:A:MET:HE3	1:2:A:ASP:H	14	0.36
(2,213)	1:119:A:PRO:HG2	1:120:A:VAL:H	5	0.36
(2,211)	1:119:A:PRO:HG3	1:120:A:VAL:H	12	0.36
(2,116)	1:57:A:LEU:HG	1:58:A:GLU:HB3	11	0.36
(2,2)	1:1:A:MET:HE1	1:2:A:ASP:H	14	0.36
(2,2)	1:1:A:MET:HE2	1:2:A:ASP:H	14	0.36
(2,2)	1:1:A:MET:HE3	1:2:A:ASP:H	14	0.36
(6,239)	1:119:A:PRO:HG3	1:120:A:VAL:H	7	0.35

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(6,239)	1:119:A:PRO:HG3	1:120:A:VAL:H	10	0.35
(6,239)	1:119:A:PRO:HG3	1:120:A:VAL:H	13	0.35
(6,231)	1:114:A:VAL:HG11	1:115:A:ILE:HG13	5	0.35
(6,231)	1:114:A:VAL:HG12	1:115:A:ILE:HG13	5	0.35
(6,231)	1:114:A:VAL:HG13	1:115:A:ILE:HG13	5	0.35
(6,108)	1:45:A:ILE:HB	1:47:A:LEU:H	9	0.35
(2,211)	1:119:A:PRO:HG3	1:120:A:VAL:H	7	0.35
(2,211)	1:119:A:PRO:HG3	1:120:A:VAL:H	10	0.35
(2,211)	1:119:A:PRO:HG3	1:120:A:VAL:H	13	0.35
(2,206)	1:114:A:VAL:HG11	1:115:A:ILE:HG13	5	0.35
(2,206)	1:114:A:VAL:HG12	1:115:A:ILE:HG13	5	0.35
(2,206)	1:114:A:VAL:HG13	1:115:A:ILE:HG13	5	0.35
(2,98)	1:45:A:ILE:HB	1:47:A:LEU:H	9	0.35
(1,54)	1:90:A:ALA:O	1:51:A:GLY:N	15	0.35
(1,31)	1:53:A:ARG:O	1:56:A:GLU:N	12	0.35
(6,239)	1:119:A:PRO:HG3	1:120:A:VAL:H	8	0.34
(6,239)	1:119:A:PRO:HG3	1:120:A:VAL:H	9	0.34
(6,118)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD11	3	0.34
(6,118)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD12	3	0.34
(6,118)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD13	3	0.34
(6,118)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD11	4	0.34
(6,118)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD12	4	0.34
(6,118)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD13	4	0.34
(6,108)	1:45:A:ILE:HB	1:47:A:LEU:H	3	0.34
(6,83)	1:39:A:THR:HB	1:40:A:ARG:HD3	9	0.34
(3,8)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD11	3	0.34
(3,8)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD12	3	0.34
(3,8)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD13	3	0.34
(3,8)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD11	4	0.34
(3,8)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD12	4	0.34
(3,8)	1:52:A:GLU:HB3	1:57:A:LEU:HD13	4	0.34
(2,211)	1:119:A:PRO:HG3	1:120:A:VAL:H	8	0.34
(2,211)	1:119:A:PRO:HG3	1:120:A:VAL:H	9	0.34
(2,98)	1:45:A:ILE:HB	1:47:A:LEU:H	3	0.34
(2,76)	1:39:A:THR:HB	1:40:A:ARG:HD3	9	0.34
(6,248)	1:126:A:GLU:HG2	1:127:A:ALA:H	2	0.33
(6,89)	1:41:A:LYS:HB2	1:42:A:HIS:HA	11	0.33
(2,219)	1:126:A:GLU:HG2	1:127:A:ALA:H	2	0.33
(2,80)	1:41:A:LYS:HB2	1:42:A:HIS:HA	11	0.33
(1,52)	1:87:A:CYS:O	1:76:A:PHE:N	11	0.33
(1,31)	1:53:A:ARG:O	1:56:A:GLU:N	5	0.33
(1,30)	1:50:A:PRO:O	1:53:A:ARG:N	10	0.33

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,23)	1:32:A:ASP:O	1:37:A:ARG:N	11	0.33
(1,23)	1:32:A:ASP:O	1:37:A:ARG:N	13	0.33
(1,17)	1:27:A:GLY:O	1:31:A:ILE:N	2	0.33
(6,264)	1:147:A:LYS:HD3	1:148:A:HIS:H	5	0.32
(6,239)	1:119:A:PRO:HG3	1:120:A:VAL:H	2	0.32
(6,108)	1:45:A:ILE:HB	1:47:A:LEU:H	8	0.32
(6,78)	1:37:A:ARG:HD2	1:38:A:VAL:H	4	0.32
(6,51)	1:25:A:ILE:HG13	1:26:A:GLY:H	6	0.32
(2,234)	1:147:A:LYS:HD3	1:148:A:HIS:H	5	0.32
(2,211)	1:119:A:PRO:HG3	1:120:A:VAL:H	2	0.32
(2,98)	1:45:A:ILE:HB	1:47:A:LEU:H	8	0.32
(2,71)	1:37:A:ARG:HD2	1:38:A:VAL:H	4	0.32
(2,49)	1:25:A:ILE:HG13	1:26:A:GLY:H	6	0.32
(1,52)	1:87:A:CYS:O	1:76:A:PHE:N	4	0.32
(1,30)	1:50:A:PRO:O	1:53:A:ARG:N	9	0.32
(1,17)	1:27:A:GLY:O	1:31:A:ILE:N	14	0.32
(6,264)	1:147:A:LYS:HD3	1:148:A:HIS:H	1	0.31
(6,239)	1:119:A:PRO:HG3	1:120:A:VAL:H	3	0.31
(6,239)	1:119:A:PRO:HG3	1:120:A:VAL:H	4	0.31
(6,237)	1:118:A:ARG:HD2	1:119:A:PRO:HG3	14	0.31
(6,231)	1:114:A:VAL:HG11	1:115:A:ILE:HG13	1	0.31
(6,231)	1:114:A:VAL:HG12	1:115:A:ILE:HG13	1	0.31
(6,231)	1:114:A:VAL:HG13	1:115:A:ILE:HG13	1	0.31
(6,223)	1:111:A:ALA:H	1:112:A:GLU:HG2	14	0.31
(6,51)	1:25:A:ILE:HG13	1:26:A:GLY:H	7	0.31
(6,51)	1:25:A:ILE:HG13	1:26:A:GLY:H	8	0.31
(3,20)	1:118:A:ARG:HD2	1:119:A:PRO:HG3	14	0.31
(2,234)	1:147:A:LYS:HD3	1:148:A:HIS:H	1	0.31
(2,211)	1:119:A:PRO:HG3	1:120:A:VAL:H	3	0.31
(2,211)	1:119:A:PRO:HG3	1:120:A:VAL:H	4	0.31
(2,206)	1:114:A:VAL:HG11	1:115:A:ILE:HG13	1	0.31
(2,206)	1:114:A:VAL:HG12	1:115:A:ILE:HG13	1	0.31
(2,206)	1:114:A:VAL:HG13	1:115:A:ILE:HG13	1	0.31
(2,198)	1:111:A:ALA:H	1:112:A:GLU:HG2	14	0.31
(2,49)	1:25:A:ILE:HG13	1:26:A:GLY:H	7	0.31
(2,49)	1:25:A:ILE:HG13	1:26:A:GLY:H	8	0.31
(1,58)	1:99:A:ILE:O	1:102:A:ALA:N	5	0.31
(1,43)	1:76:A:PHE:O	1:87:A:CYS:N	7	0.31
(1,30)	1:50:A:PRO:O	1:53:A:ARG:N	7	0.31
(1,23)	1:32:A:ASP:O	1:37:A:ARG:N	14	0.31
(6,231)	1:114:A:VAL:HG11	1:115:A:ILE:HG13	2	0.3
(6,231)	1:114:A:VAL:HG12	1:115:A:ILE:HG13	2	0.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(6,231)	1:114:A:VAL:HG13	1:115:A:ILE:HG13	2	0.3
(6,231)	1:114:A:VAL:HG11	1:115:A:ILE:HG13	4	0.3
(6,231)	1:114:A:VAL:HG12	1:115:A:ILE:HG13	4	0.3
(6,231)	1:114:A:VAL:HG13	1:115:A:ILE:HG13	4	0.3
(6,183)	1:82:A:ASP:HB3	1:83:A:GLU:HA	11	0.3
(6,183)	1:82:A:ASP:HB3	1:83:A:GLU:HA	12	0.3
(6,147)	1:62:A:GLU:HG3	1:63:A:MET:H	3	0.3
(6,147)	1:62:A:GLU:HG3	1:63:A:MET:H	15	0.3
(6,108)	1:45:A:ILE:HB	1:47:A:LEU:H	4	0.3
(2,206)	1:114:A:VAL:HG11	1:115:A:ILE:HG13	2	0.3
(2,206)	1:114:A:VAL:HG12	1:115:A:ILE:HG13	2	0.3
(2,206)	1:114:A:VAL:HG13	1:115:A:ILE:HG13	2	0.3
(2,206)	1:114:A:VAL:HG11	1:115:A:ILE:HG13	4	0.3
(2,206)	1:114:A:VAL:HG12	1:115:A:ILE:HG13	4	0.3
(2,206)	1:114:A:VAL:HG13	1:115:A:ILE:HG13	4	0.3
(2,162)	1:82:A:ASP:HB3	1:83:A:GLU:HA	11	0.3
(2,162)	1:82:A:ASP:HB3	1:83:A:GLU:HA	12	0.3
(2,130)	1:62:A:GLU:HG3	1:63:A:MET:H	3	0.3
(2,130)	1:62:A:GLU:HG3	1:63:A:MET:H	15	0.3
(2,98)	1:45:A:ILE:HB	1:47:A:LEU:H	4	0.3
(1,59)	1:106:A:SER:O	1:124:A:SER:N	12	0.3
(1,17)	1:27:A:GLY:O	1:31:A:ILE:N	5	0.3
(1,16)	1:25:A:ILE:O	1:123:A:ASN:N	14	0.3
(6,264)	1:147:A:LYS:HD3	1:148:A:HIS:H	2	0.29
(6,231)	1:114:A:VAL:HG11	1:115:A:ILE:HG13	3	0.29
(6,231)	1:114:A:VAL:HG12	1:115:A:ILE:HG13	3	0.29
(6,231)	1:114:A:VAL:HG13	1:115:A:ILE:HG13	3	0.29
(6,221)	1:110:A:ALA:H	1:112:A:GLU:H	5	0.29
(6,183)	1:82:A:ASP:HB3	1:83:A:GLU:HA	14	0.29
(6,183)	1:82:A:ASP:HB3	1:83:A:GLU:HA	15	0.29
(6,108)	1:45:A:ILE:HB	1:47:A:LEU:H	7	0.29
(2,234)	1:147:A:LYS:HD3	1:148:A:HIS:H	2	0.29
(2,206)	1:114:A:VAL:HG11	1:115:A:ILE:HG13	3	0.29
(2,206)	1:114:A:VAL:HG12	1:115:A:ILE:HG13	3	0.29
(2,206)	1:114:A:VAL:HG13	1:115:A:ILE:HG13	3	0.29
(2,196)	1:110:A:ALA:H	1:112:A:GLU:H	5	0.29
(2,162)	1:82:A:ASP:HB3	1:83:A:GLU:HA	14	0.29
(2,162)	1:82:A:ASP:HB3	1:83:A:GLU:HA	15	0.29
(2,98)	1:45:A:ILE:HB	1:47:A:LEU:H	7	0.29
(1,62)	1:120:A:VAL:O	1:113:A:GLY:N	11	0.29
(1,46)	1:79:A:GLU:O	1:67:A:ARG:N	13	0.29
(1,23)	1:32:A:ASP:O	1:37:A:ARG:N	15	0.29

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(6,114)	1:50:A:PRO:HG3	1:51:A:GLY:H	15	0.28
(6,108)	1:45:A:ILE:HB	1:47:A:LEU:H	6	0.28
(6,90)	1:41:A:LYS:HD3	1:42:A:HIS:H	7	0.28
(6,90)	1:41:A:LYS:HD3	1:42:A:HIS:H	8	0.28
(2,104)	1:50:A:PRO:HG3	1:51:A:GLY:H	15	0.28
(2,98)	1:45:A:ILE:HB	1:47:A:LEU:H	6	0.28
(2,81)	1:41:A:LYS:HD3	1:42:A:HIS:H	7	0.28
(2,81)	1:41:A:LYS:HD3	1:42:A:HIS:H	8	0.28
(1,69)	1:135:A:TYR:O	1:139:A:VAL:N	10	0.28
(1,58)	1:99:A:ILE:O	1:102:A:ALA:N	12	0.28
(1,58)	1:99:A:ILE:O	1:102:A:ALA:N	15	0.28
(1,43)	1:76:A:PHE:O	1:87:A:CYS:N	3	0.28
(1,31)	1:53:A:ARG:O	1:56:A:GLU:N	3	0.28
(1,23)	1:32:A:ASP:O	1:37:A:ARG:N	3	0.28
(1,16)	1:25:A:ILE:O	1:123:A:ASN:N	13	0.28
(6,231)	1:114:A:VAL:HG11	1:115:A:ILE:HG13	10	0.27
(6,231)	1:114:A:VAL:HG12	1:115:A:ILE:HG13	10	0.27
(6,231)	1:114:A:VAL:HG13	1:115:A:ILE:HG13	10	0.27
(6,147)	1:62:A:GLU:HG3	1:63:A:MET:H	12	0.27
(6,147)	1:62:A:GLU:HG3	1:63:A:MET:H	14	0.27
(6,133)	1:57:A:LEU:HG	1:58:A:GLU:HB3	12	0.27
(2,206)	1:114:A:VAL:HG11	1:115:A:ILE:HG13	10	0.27
(2,206)	1:114:A:VAL:HG12	1:115:A:ILE:HG13	10	0.27
(2,206)	1:114:A:VAL:HG13	1:115:A:ILE:HG13	10	0.27
(2,130)	1:62:A:GLU:HG3	1:63:A:MET:H	12	0.27
(2,130)	1:62:A:GLU:HG3	1:63:A:MET:H	14	0.27
(2,116)	1:57:A:LEU:HG	1:58:A:GLU:HB3	12	0.27
(1,53)	1:88:A:GLU:O	1:49:A:PHE:N	11	0.27
(1,39)	1:61:A:VAL:O	1:66:A:GLY:N	13	0.27
(1,30)	1:50:A:PRO:O	1:53:A:ARG:N	14	0.27
(1,23)	1:32:A:ASP:O	1:37:A:ARG:N	12	0.27
(6,231)	1:114:A:VAL:HG11	1:115:A:ILE:HG13	7	0.26
(6,231)	1:114:A:VAL:HG12	1:115:A:ILE:HG13	7	0.26
(6,231)	1:114:A:VAL:HG13	1:115:A:ILE:HG13	7	0.26
(6,147)	1:62:A:GLU:HG3	1:63:A:MET:H	1	0.26
(6,147)	1:62:A:GLU:HG3	1:63:A:MET:H	4	0.26
(6,133)	1:57:A:LEU:HG	1:58:A:GLU:HB3	13	0.26
(6,114)	1:50:A:PRO:HG3	1:51:A:GLY:H	11	0.26
(6,69)	1:33:A:ALA:HB1	1:34:A:ARG:HD3	13	0.26
(6,69)	1:33:A:ALA:HB2	1:34:A:ARG:HD3	13	0.26
(6,69)	1:33:A:ALA:HB3	1:34:A:ARG:HD3	13	0.26
(6,51)	1:25:A:ILE:HG13	1:26:A:GLY:H	9	0.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,206)	1:114:A:VAL:HG11	1:115:A:ILE:HG13	7	0.26
(2,206)	1:114:A:VAL:HG12	1:115:A:ILE:HG13	7	0.26
(2,206)	1:114:A:VAL:HG13	1:115:A:ILE:HG13	7	0.26
(2,130)	1:62:A:GLU:HG3	1:63:A:MET:H	1	0.26
(2,130)	1:62:A:GLU:HG3	1:63:A:MET:H	4	0.26
(2,116)	1:57:A:LEU:HG	1:58:A:GLU:HB3	13	0.26
(2,104)	1:50:A:PRO:HG3	1:51:A:GLY:H	11	0.26
(2,62)	1:33:A:ALA:HB1	1:34:A:ARG:HD3	13	0.26
(2,62)	1:33:A:ALA:HB2	1:34:A:ARG:HD3	13	0.26
(2,62)	1:33:A:ALA:HB3	1:34:A:ARG:HD3	13	0.26
(2,49)	1:25:A:ILE:HG13	1:26:A:GLY:H	9	0.26
(1,69)	1:135:A:TYR:O	1:139:A:VAL:N	7	0.26
(1,69)	1:135:A:TYR:O	1:139:A:VAL:N	8	0.26
(1,58)	1:99:A:ILE:O	1:102:A:ALA:N	4	0.26
(1,58)	1:99:A:ILE:O	1:102:A:ALA:N	11	0.26
(1,58)	1:99:A:ILE:O	1:102:A:ALA:N	14	0.26
(1,53)	1:88:A:GLU:O	1:49:A:PHE:N	15	0.26
(1,46)	1:79:A:GLU:O	1:67:A:ARG:N	15	0.26
(1,42)	1:75:A:GLY:O	1:72:A:LEU:N	15	0.26
(1,31)	1:53:A:ARG:O	1:56:A:GLU:N	7	0.26
(1,17)	1:27:A:GLY:O	1:31:A:ILE:N	1	0.26
(1,17)	1:27:A:GLY:O	1:31:A:ILE:N	3	0.26
(1,16)	1:25:A:ILE:O	1:123:A:ASN:N	12	0.26
(1,3)	1:5:A:GLN:O	1:9:A:ILE:N	6	0.26
(6,231)	1:114:A:VAL:HG11	1:115:A:ILE:HG13	9	0.25
(6,231)	1:114:A:VAL:HG12	1:115:A:ILE:HG13	9	0.25
(6,231)	1:114:A:VAL:HG13	1:115:A:ILE:HG13	9	0.25
(6,147)	1:62:A:GLU:HG3	1:63:A:MET:H	2	0.25
(6,147)	1:62:A:GLU:HG3	1:63:A:MET:H	13	0.25
(6,123)	1:54:A:ARG:HD3	1:55:A:GLY:HA2	13	0.25
(6,114)	1:50:A:PRO:HG3	1:51:A:GLY:H	6	0.25
(6,108)	1:45:A:ILE:HB	1:47:A:LEU:H	2	0.25
(6,69)	1:33:A:ALA:HB1	1:34:A:ARG:HD3	15	0.25
(6,69)	1:33:A:ALA:HB2	1:34:A:ARG:HD3	15	0.25
(6,69)	1:33:A:ALA:HB3	1:34:A:ARG:HD3	15	0.25
(2,206)	1:114:A:VAL:HG11	1:115:A:ILE:HG13	9	0.25
(2,206)	1:114:A:VAL:HG12	1:115:A:ILE:HG13	9	0.25
(2,206)	1:114:A:VAL:HG13	1:115:A:ILE:HG13	9	0.25
(2,130)	1:62:A:GLU:HG3	1:63:A:MET:H	2	0.25
(2,130)	1:62:A:GLU:HG3	1:63:A:MET:H	13	0.25
(2,110)	1:54:A:ARG:HD3	1:55:A:GLY:HA2	13	0.25
(2,104)	1:50:A:PRO:HG3	1:51:A:GLY:H	6	0.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,98)	1:45:A:ILE:HB	1:47:A:LEU:H	2	0.25
(2,62)	1:33:A:ALA:HB1	1:34:A:ARG:HD3	15	0.25
(2,62)	1:33:A:ALA:HB2	1:34:A:ARG:HD3	15	0.25
(2,62)	1:33:A:ALA:HB3	1:34:A:ARG:HD3	15	0.25
(1,69)	1:135:A:TYR:O	1:139:A:VAL:N	6	0.25
(1,69)	1:135:A:TYR:O	1:139:A:VAL:N	9	0.25
(1,67)	1:131:A:ASP:O	1:135:A:TYR:N	13	0.25
(1,51)	1:86:A:ASP:O	1:47:A:LEU:N	5	0.25
(1,43)	1:76:A:PHE:O	1:87:A:CYS:N	2	0.25
(1,31)	1:53:A:ARG:O	1:56:A:GLU:N	14	0.25
(1,28)	1:48:A:THR:O	1:24:A:TRP:N	11	0.25
(1,23)	1:32:A:ASP:O	1:37:A:ARG:N	8	0.25
(6,231)	1:114:A:VAL:HG11	1:115:A:ILE:HG13	6	0.24
(6,231)	1:114:A:VAL:HG12	1:115:A:ILE:HG13	6	0.24
(6,231)	1:114:A:VAL:HG13	1:115:A:ILE:HG13	6	0.24
(6,231)	1:114:A:VAL:HG11	1:115:A:ILE:HG13	8	0.24
(6,231)	1:114:A:VAL:HG12	1:115:A:ILE:HG13	8	0.24
(6,231)	1:114:A:VAL:HG13	1:115:A:ILE:HG13	8	0.24
(6,231)	1:114:A:VAL:HG11	1:115:A:ILE:HG13	14	0.24
(6,231)	1:114:A:VAL:HG12	1:115:A:ILE:HG13	14	0.24
(6,231)	1:114:A:VAL:HG13	1:115:A:ILE:HG13	14	0.24
(6,231)	1:114:A:VAL:HG11	1:115:A:ILE:HG13	15	0.24
(6,231)	1:114:A:VAL:HG12	1:115:A:ILE:HG13	15	0.24
(6,231)	1:114:A:VAL:HG13	1:115:A:ILE:HG13	15	0.24
(6,147)	1:62:A:GLU:HG3	1:63:A:MET:H	11	0.24
(6,114)	1:50:A:PRO:HG3	1:51:A:GLY:H	8	0.24
(6,114)	1:50:A:PRO:HG3	1:51:A:GLY:H	14	0.24
(6,90)	1:41:A:LYS:HD3	1:42:A:HIS:H	6	0.24
(6,69)	1:33:A:ALA:HB1	1:34:A:ARG:HD3	12	0.24
(6,69)	1:33:A:ALA:HB2	1:34:A:ARG:HD3	12	0.24
(6,69)	1:33:A:ALA:HB3	1:34:A:ARG:HD3	12	0.24
(6,59)	1:29:A:TRP:HB3	1:29:A:TRP:HB2	1	0.24
(6,59)	1:29:A:TRP:HB3	1:29:A:TRP:HB2	2	0.24
(6,59)	1:29:A:TRP:HB3	1:29:A:TRP:HB2	3	0.24
(6,59)	1:29:A:TRP:HB3	1:29:A:TRP:HB2	4	0.24
(6,59)	1:29:A:TRP:HB3	1:29:A:TRP:HB2	5	0.24
(6,59)	1:29:A:TRP:HB3	1:29:A:TRP:HB2	6	0.24
(6,59)	1:29:A:TRP:HB3	1:29:A:TRP:HB2	7	0.24
(6,59)	1:29:A:TRP:HB3	1:29:A:TRP:HB2	8	0.24
(6,59)	1:29:A:TRP:HB3	1:29:A:TRP:HB2	9	0.24
(6,59)	1:29:A:TRP:HB3	1:29:A:TRP:HB2	10	0.24
(6,59)	1:29:A:TRP:HB3	1:29:A:TRP:HB2	11	0.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(6,59)	1:29:A:TRP:HB3	1:29:A:TRP:HB2	12	0.24
(6,59)	1:29:A:TRP:HB3	1:29:A:TRP:HB2	13	0.24
(6,59)	1:29:A:TRP:HB3	1:29:A:TRP:HB2	14	0.24
(6,59)	1:29:A:TRP:HB3	1:29:A:TRP:HB2	15	0.24
(2,206)	1:114:A:VAL:HG11	1:115:A:ILE:HG13	6	0.24
(2,206)	1:114:A:VAL:HG12	1:115:A:ILE:HG13	6	0.24
(2,206)	1:114:A:VAL:HG13	1:115:A:ILE:HG13	6	0.24
(2,206)	1:114:A:VAL:HG11	1:115:A:ILE:HG13	8	0.24
(2,206)	1:114:A:VAL:HG12	1:115:A:ILE:HG13	8	0.24
(2,206)	1:114:A:VAL:HG13	1:115:A:ILE:HG13	8	0.24
(2,206)	1:114:A:VAL:HG11	1:115:A:ILE:HG13	14	0.24
(2,206)	1:114:A:VAL:HG12	1:115:A:ILE:HG13	14	0.24
(2,206)	1:114:A:VAL:HG13	1:115:A:ILE:HG13	14	0.24
(2,206)	1:114:A:VAL:HG11	1:115:A:ILE:HG13	15	0.24
(2,206)	1:114:A:VAL:HG12	1:115:A:ILE:HG13	15	0.24
(2,206)	1:114:A:VAL:HG13	1:115:A:ILE:HG13	15	0.24
(2,130)	1:62:A:GLU:HG3	1:63:A:MET:H	11	0.24
(2,104)	1:50:A:PRO:HG3	1:51:A:GLY:H	8	0.24
(2,104)	1:50:A:PRO:HG3	1:51:A:GLY:H	14	0.24
(2,81)	1:41:A:LYS:HD3	1:42:A:HIS:H	6	0.24
(2,62)	1:33:A:ALA:HB1	1:34:A:ARG:HD3	12	0.24
(2,62)	1:33:A:ALA:HB2	1:34:A:ARG:HD3	12	0.24
(2,62)	1:33:A:ALA:HB3	1:34:A:ARG:HD3	12	0.24
(1,71)	1:145:A:PRO:O	1:148:A:HIS:N	5	0.24
(1,59)	1:106:A:SER:O	1:124:A:SER:N	11	0.24
(1,49)	1:84:A:LEU:O	1:45:A:ILE:N	14	0.24
(1,43)	1:76:A:PHE:O	1:87:A:CYS:N	8	0.24
(1,36)	1:58:A:GLU:O	1:62:A:GLU:N	7	0.24
(1,30)	1:50:A:PRO:O	1:53:A:ARG:N	13	0.24
(1,17)	1:27:A:GLY:O	1:31:A:ILE:N	4	0.24
(6,231)	1:114:A:VAL:HG11	1:115:A:ILE:HG13	13	0.23
(6,231)	1:114:A:VAL:HG12	1:115:A:ILE:HG13	13	0.23
(6,231)	1:114:A:VAL:HG13	1:115:A:ILE:HG13	13	0.23
(6,202)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB1	12	0.23
(6,202)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB2	12	0.23
(6,202)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB3	12	0.23
(6,147)	1:62:A:GLU:HG3	1:63:A:MET:H	5	0.23
(6,114)	1:50:A:PRO:HG3	1:51:A:GLY:H	2	0.23
(6,114)	1:50:A:PRO:HG3	1:51:A:GLY:H	5	0.23
(6,114)	1:50:A:PRO:HG3	1:51:A:GLY:H	12	0.23
(6,114)	1:50:A:PRO:HG3	1:51:A:GLY:H	13	0.23
(6,51)	1:25:A:ILE:HG13	1:26:A:GLY:H	10	0.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,206)	1:114:A:VAL:HG11	1:115:A:ILE:HG13	13	0.23
(2,206)	1:114:A:VAL:HG12	1:115:A:ILE:HG13	13	0.23
(2,206)	1:114:A:VAL:HG13	1:115:A:ILE:HG13	13	0.23
(2,179)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB1	12	0.23
(2,179)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB2	12	0.23
(2,179)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB3	12	0.23
(2,130)	1:62:A:GLU:HG3	1:63:A:MET:H	5	0.23
(2,104)	1:50:A:PRO:HG3	1:51:A:GLY:H	2	0.23
(2,104)	1:50:A:PRO:HG3	1:51:A:GLY:H	5	0.23
(2,104)	1:50:A:PRO:HG3	1:51:A:GLY:H	12	0.23
(2,104)	1:50:A:PRO:HG3	1:51:A:GLY:H	13	0.23
(2,49)	1:25:A:ILE:HG13	1:26:A:GLY:H	10	0.23
(1,71)	1:145:A:PRO:O	1:148:A:HIS:N	1	0.23
(1,71)	1:145:A:PRO:O	1:148:A:HIS:N	2	0.23
(1,36)	1:58:A:GLU:O	1:62:A:GLU:N	4	0.23
(1,36)	1:58:A:GLU:O	1:62:A:GLU:N	5	0.23
(1,36)	1:58:A:GLU:O	1:62:A:GLU:N	8	0.23
(1,33)	1:55:A:GLY:O	1:59:A:ALA:N	15	0.23
(1,31)	1:53:A:ARG:O	1:56:A:GLU:N	6	0.23
(1,31)	1:53:A:ARG:O	1:56:A:GLU:N	8	0.23
(1,31)	1:53:A:ARG:O	1:56:A:GLU:N	9	0.23
(1,31)	1:53:A:ARG:O	1:56:A:GLU:N	13	0.23
(1,30)	1:50:A:PRO:O	1:53:A:ARG:N	12	0.23
(1,28)	1:48:A:THR:O	1:24:A:TRP:N	15	0.23
(1,27)	1:47:A:LEU:O	1:88:A:GLU:N	15	0.23
(1,23)	1:32:A:ASP:O	1:37:A:ARG:N	1	0.23
(1,23)	1:32:A:ASP:O	1:37:A:ARG:N	4	0.23
(1,23)	1:32:A:ASP:O	1:37:A:ARG:N	6	0.23
(1,23)	1:32:A:ASP:O	1:37:A:ARG:N	7	0.23
(1,23)	1:32:A:ASP:O	1:37:A:ARG:N	9	0.23
(1,23)	1:32:A:ASP:O	1:37:A:ARG:N	10	0.23
(1,16)	1:25:A:ILE:O	1:123:A:ASN:N	15	0.23
(1,12)	1:14:A:ALA:O	1:18:A:GLU:N	15	0.23
(1,11)	1:13:A:LEU:O	1:17:A:ASP:N	15	0.23
(6,202)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB1	13	0.22
(6,202)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB2	13	0.22
(6,202)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB3	13	0.22
(6,123)	1:54:A:ARG:HD3	1:55:A:GLY:HA2	11	0.22
(6,123)	1:54:A:ARG:HD3	1:55:A:GLY:HA2	14	0.22
(6,83)	1:39:A:THR:HB	1:40:A:ARG:HD3	4	0.22
(2,179)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB1	13	0.22
(2,179)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB2	13	0.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,179)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB3	13	0.22
(2,110)	1:54:A:ARG:HD3	1:55:A:GLY:HA2	11	0.22
(2,110)	1:54:A:ARG:HD3	1:55:A:GLY:HA2	14	0.22
(2,76)	1:39:A:THR:HB	1:40:A:ARG:HD3	4	0.22
(1,83)	1:160:A:GLY:O	1:164:A:VAL:N	1	0.22
(1,83)	1:160:A:GLY:O	1:164:A:VAL:N	3	0.22
(1,83)	1:160:A:GLY:O	1:164:A:VAL:N	5	0.22
(1,83)	1:160:A:GLY:O	1:164:A:VAL:N	9	0.22
(1,83)	1:160:A:GLY:O	1:164:A:VAL:N	10	0.22
(1,67)	1:131:A:ASP:O	1:135:A:TYR:N	8	0.22
(1,62)	1:120:A:VAL:O	1:113:A:GLY:N	13	0.22
(1,58)	1:99:A:ILE:O	1:102:A:ALA:N	13	0.22
(1,53)	1:88:A:GLU:O	1:49:A:PHE:N	12	0.22
(1,49)	1:84:A:LEU:O	1:45:A:ILE:N	11	0.22
(1,49)	1:84:A:LEU:O	1:45:A:ILE:N	15	0.22
(1,42)	1:75:A:GLY:O	1:72:A:LEU:N	11	0.22
(1,23)	1:32:A:ASP:O	1:37:A:ARG:N	5	0.22
(1,16)	1:25:A:ILE:O	1:123:A:ASN:N	11	0.22
(1,12)	1:14:A:ALA:O	1:18:A:GLU:N	7	0.22
(1,11)	1:13:A:LEU:O	1:17:A:ASP:N	13	0.22
(1,10)	1:12:A:ILE:O	1:16:A:ALA:N	13	0.22
(1,3)	1:5:A:GLN:O	1:9:A:ILE:N	2	0.22
(1,3)	1:5:A:GLN:O	1:9:A:ILE:N	9	0.22
(1,3)	1:5:A:GLN:O	1:9:A:ILE:N	11	0.22
(6,231)	1:114:A:VAL:HG11	1:115:A:ILE:HG13	11	0.21
(6,231)	1:114:A:VAL:HG12	1:115:A:ILE:HG13	11	0.21
(6,231)	1:114:A:VAL:HG13	1:115:A:ILE:HG13	11	0.21
(6,231)	1:114:A:VAL:HG11	1:115:A:ILE:HG13	12	0.21
(6,231)	1:114:A:VAL:HG12	1:115:A:ILE:HG13	12	0.21
(6,231)	1:114:A:VAL:HG13	1:115:A:ILE:HG13	12	0.21
(6,222)	1:110:A:ALA:HB1	1:112:A:GLU:H	15	0.21
(6,222)	1:110:A:ALA:HB2	1:112:A:GLU:H	15	0.21
(6,222)	1:110:A:ALA:HB3	1:112:A:GLU:H	15	0.21
(6,202)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB1	14	0.21
(6,202)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB2	14	0.21
(6,202)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB3	14	0.21
(6,114)	1:50:A:PRO:HG3	1:51:A:GLY:H	1	0.21
(2,206)	1:114:A:VAL:HG11	1:115:A:ILE:HG13	11	0.21
(2,206)	1:114:A:VAL:HG12	1:115:A:ILE:HG13	11	0.21
(2,206)	1:114:A:VAL:HG13	1:115:A:ILE:HG13	11	0.21
(2,206)	1:114:A:VAL:HG11	1:115:A:ILE:HG13	12	0.21
(2,206)	1:114:A:VAL:HG12	1:115:A:ILE:HG13	12	0.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,206)	1:114:A:VAL:HG13	1:115:A:ILE:HG13	12	0.21
(2,197)	1:110:A:ALA:HB1	1:112:A:GLU:H	15	0.21
(2,197)	1:110:A:ALA:HB2	1:112:A:GLU:H	15	0.21
(2,197)	1:110:A:ALA:HB3	1:112:A:GLU:H	15	0.21
(2,179)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB1	14	0.21
(2,179)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB2	14	0.21
(2,179)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB3	14	0.21
(2,104)	1:50:A:PRO:HG3	1:51:A:GLY:H	1	0.21
(1,93)	1:170:A:ALA:O	1:174:A:ARG:N	13	0.21
(1,83)	1:160:A:GLY:O	1:164:A:VAL:N	7	0.21
(1,67)	1:131:A:ASP:O	1:135:A:TYR:N	6	0.21
(1,67)	1:131:A:ASP:O	1:135:A:TYR:N	7	0.21
(1,67)	1:131:A:ASP:O	1:135:A:TYR:N	10	0.21
(1,59)	1:106:A:SER:O	1:124:A:SER:N	15	0.21
(1,58)	1:99:A:ILE:O	1:102:A:ALA:N	8	0.21
(1,55)	1:91:A:TRP:O	1:98:A:GLU:N	4	0.21
(1,51)	1:86:A:ASP:O	1:47:A:LEU:N	12	0.21
(1,43)	1:76:A:PHE:O	1:87:A:CYS:N	1	0.21
(1,43)	1:76:A:PHE:O	1:87:A:CYS:N	15	0.21
(1,42)	1:75:A:GLY:O	1:72:A:LEU:N	12	0.21
(1,36)	1:58:A:GLU:O	1:62:A:GLU:N	10	0.21
(1,33)	1:55:A:GLY:O	1:59:A:ALA:N	2	0.21
(1,31)	1:53:A:ARG:O	1:56:A:GLU:N	4	0.21
(1,31)	1:53:A:ARG:O	1:56:A:GLU:N	10	0.21
(1,28)	1:48:A:THR:O	1:24:A:TRP:N	12	0.21
(1,27)	1:47:A:LEU:O	1:88:A:GLU:N	14	0.21
(1,24)	1:33:A:ALA:O	1:114:A:VAL:N	5	0.21
(1,14)	1:16:A:ALA:O	1:21:A:LEU:N	14	0.21
(1,10)	1:12:A:ILE:O	1:16:A:ALA:N	11	0.21
(1,10)	1:12:A:ILE:O	1:16:A:ALA:N	12	0.21
(1,3)	1:5:A:GLN:O	1:9:A:ILE:N	4	0.21
(1,3)	1:5:A:GLN:O	1:9:A:ILE:N	7	0.21
(1,3)	1:5:A:GLN:O	1:9:A:ILE:N	8	0.21
(1,3)	1:5:A:GLN:O	1:9:A:ILE:N	10	0.21
(1,3)	1:5:A:GLN:O	1:9:A:ILE:N	14	0.21
(6,138)	1:58:A:GLU:HB2	1:60:A:ILE:H	5	0.2
(6,114)	1:50:A:PRO:HG3	1:51:A:GLY:H	3	0.2
(6,114)	1:50:A:PRO:HG3	1:51:A:GLY:H	4	0.2
(6,108)	1:45:A:ILE:HB	1:47:A:LEU:H	1	0.2
(6,108)	1:45:A:ILE:HB	1:47:A:LEU:H	5	0.2
(6,108)	1:45:A:ILE:HB	1:47:A:LEU:H	10	0.2
(6,108)	1:45:A:ILE:HB	1:47:A:LEU:H	13	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(6,90)	1:41:A:LYS:HD3	1:42:A:HIS:H	9	0.2
(2,121)	1:58:A:GLU:HB2	1:60:A:ILE:H	5	0.2
(2,104)	1:50:A:PRO:HG3	1:51:A:GLY:H	3	0.2
(2,104)	1:50:A:PRO:HG3	1:51:A:GLY:H	4	0.2
(2,98)	1:45:A:ILE:HB	1:47:A:LEU:H	1	0.2
(2,98)	1:45:A:ILE:HB	1:47:A:LEU:H	5	0.2
(2,98)	1:45:A:ILE:HB	1:47:A:LEU:H	10	0.2
(2,98)	1:45:A:ILE:HB	1:47:A:LEU:H	13	0.2
(2,81)	1:41:A:LYS:HD3	1:42:A:HIS:H	9	0.2
(1,83)	1:160:A:GLY:O	1:164:A:VAL:N	2	0.2
(1,83)	1:160:A:GLY:O	1:164:A:VAL:N	6	0.2
(1,83)	1:160:A:GLY:O	1:164:A:VAL:N	8	0.2
(1,69)	1:135:A:TYR:O	1:139:A:VAL:N	5	0.2
(1,58)	1:99:A:ILE:O	1:102:A:ALA:N	7	0.2
(1,53)	1:88:A:GLU:O	1:49:A:PHE:N	14	0.2
(1,49)	1:84:A:LEU:O	1:45:A:ILE:N	12	0.2
(1,39)	1:61:A:VAL:O	1:66:A:GLY:N	15	0.2
(1,36)	1:58:A:GLU:O	1:62:A:GLU:N	9	0.2
(1,12)	1:14:A:ALA:O	1:18:A:GLU:N	1	0.2
(1,11)	1:13:A:LEU:O	1:17:A:ASP:N	11	0.2
(1,11)	1:13:A:LEU:O	1:17:A:ASP:N	12	0.2
(1,3)	1:5:A:GLN:O	1:9:A:ILE:N	12	0.2
(6,184)	1:82:A:ASP:H	1:83:A:GLU:HB3	7	0.19
(6,138)	1:58:A:GLU:HB2	1:60:A:ILE:H	14	0.19
(6,108)	1:45:A:ILE:HB	1:47:A:LEU:H	15	0.19
(6,90)	1:41:A:LYS:HD3	1:42:A:HIS:H	10	0.19
(2,163)	1:82:A:ASP:H	1:83:A:GLU:HB3	7	0.19
(2,121)	1:58:A:GLU:HB2	1:60:A:ILE:H	14	0.19
(2,98)	1:45:A:ILE:HB	1:47:A:LEU:H	15	0.19
(2,81)	1:41:A:LYS:HD3	1:42:A:HIS:H	10	0.19
(1,83)	1:160:A:GLY:O	1:164:A:VAL:N	4	0.19
(1,66)	1:126:A:GLU:O	1:130:A:TRP:N	15	0.19
(1,58)	1:99:A:ILE:O	1:102:A:ALA:N	3	0.19
(1,58)	1:99:A:ILE:O	1:102:A:ALA:N	6	0.19
(1,53)	1:88:A:GLU:O	1:49:A:PHE:N	4	0.19
(1,51)	1:86:A:ASP:O	1:47:A:LEU:N	2	0.19
(1,46)	1:79:A:GLU:O	1:67:A:ARG:N	14	0.19
(1,43)	1:76:A:PHE:O	1:87:A:CYS:N	5	0.19
(1,43)	1:76:A:PHE:O	1:87:A:CYS:N	6	0.19
(1,43)	1:76:A:PHE:O	1:87:A:CYS:N	10	0.19
(1,43)	1:76:A:PHE:O	1:87:A:CYS:N	11	0.19
(1,33)	1:55:A:GLY:O	1:59:A:ALA:N	1	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,24)	1:33:A:ALA:O	1:114:A:VAL:N	2	0.19
(1,17)	1:27:A:GLY:O	1:31:A:ILE:N	6	0.19
(1,16)	1:25:A:ILE:O	1:123:A:ASN:N	8	0.19
(1,14)	1:16:A:ALA:O	1:21:A:LEU:N	15	0.19
(1,3)	1:5:A:GLN:O	1:9:A:ILE:N	13	0.19
(1,3)	1:5:A:GLN:O	1:9:A:ILE:N	15	0.19
(1,2)	1:4:A:THR:O	1:8:A:LEU:N	7	0.19
(1,2)	1:4:A:THR:O	1:8:A:LEU:N	8	0.19
(6,202)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB1	11	0.18
(6,202)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB2	11	0.18
(6,202)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB3	11	0.18
(6,183)	1:82:A:ASP:HB3	1:83:A:GLU:HA	13	0.18
(6,138)	1:58:A:GLU:HB2	1:60:A:ILE:H	6	0.18
(6,138)	1:58:A:GLU:HB2	1:60:A:ILE:H	13	0.18
(2,179)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB1	11	0.18
(2,179)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB2	11	0.18
(2,179)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB3	11	0.18
(2,162)	1:82:A:ASP:HB3	1:83:A:GLU:HA	13	0.18
(2,121)	1:58:A:GLU:HB2	1:60:A:ILE:H	6	0.18
(2,121)	1:58:A:GLU:HB2	1:60:A:ILE:H	13	0.18
(1,93)	1:170:A:ALA:O	1:174:A:ARG:N	12	0.18
(1,67)	1:131:A:ASP:O	1:135:A:TYR:N	9	0.18
(1,62)	1:120:A:VAL:O	1:113:A:GLY:N	12	0.18
(1,58)	1:99:A:ILE:O	1:102:A:ALA:N	9	0.18
(1,58)	1:99:A:ILE:O	1:102:A:ALA:N	10	0.18
(1,54)	1:90:A:ALA:O	1:51:A:GLY:N	13	0.18
(1,53)	1:88:A:GLU:O	1:49:A:PHE:N	13	0.18
(1,52)	1:87:A:CYS:O	1:76:A:PHE:N	15	0.18
(1,45)	1:78:A:ALA:O	1:85:A:LEU:N	15	0.18
(1,43)	1:76:A:PHE:O	1:87:A:CYS:N	4	0.18
(1,43)	1:76:A:PHE:O	1:87:A:CYS:N	13	0.18
(1,42)	1:75:A:GLY:O	1:72:A:LEU:N	14	0.18
(1,36)	1:58:A:GLU:O	1:62:A:GLU:N	14	0.18
(1,32)	1:54:A:ARG:O	1:58:A:GLU:N	6	0.18
(1,30)	1:50:A:PRO:O	1:53:A:ARG:N	15	0.18
(1,28)	1:48:A:THR:O	1:24:A:TRP:N	14	0.18
(1,16)	1:25:A:ILE:O	1:123:A:ASN:N	2	0.18
(1,16)	1:25:A:ILE:O	1:123:A:ASN:N	5	0.18
(1,16)	1:25:A:ILE:O	1:123:A:ASN:N	7	0.18
(1,15)	1:24:A:TRP:O	1:48:A:THR:N	2	0.18
(1,14)	1:16:A:ALA:O	1:21:A:LEU:N	13	0.18
(1,10)	1:12:A:ILE:O	1:16:A:ALA:N	15	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(6,184)	1:82:A:ASP:H	1:83:A:GLU:HB3	8	0.17
(6,148)	1:63:A:MET:HG3	1:64:A:LEU:H	14	0.17
(6,138)	1:58:A:GLU:HB2	1:60:A:ILE:H	4	0.17
(6,138)	1:58:A:GLU:HB2	1:60:A:ILE:H	12	0.17
(2,163)	1:82:A:ASP:H	1:83:A:GLU:HB3	8	0.17
(2,131)	1:63:A:MET:HG3	1:64:A:LEU:H	14	0.17
(2,121)	1:58:A:GLU:HB2	1:60:A:ILE:H	4	0.17
(2,121)	1:58:A:GLU:HB2	1:60:A:ILE:H	12	0.17
(1,71)	1:145:A:PRO:O	1:148:A:HIS:N	13	0.17
(1,71)	1:145:A:PRO:O	1:148:A:HIS:N	14	0.17
(1,69)	1:135:A:TYR:O	1:139:A:VAL:N	2	0.17
(1,67)	1:131:A:ASP:O	1:135:A:TYR:N	11	0.17
(1,62)	1:120:A:VAL:O	1:113:A:GLY:N	14	0.17
(1,60)	1:113:A:GLY:O	1:120:A:VAL:N	15	0.17
(1,59)	1:106:A:SER:O	1:124:A:SER:N	13	0.17
(1,54)	1:90:A:ALA:O	1:51:A:GLY:N	14	0.17
(1,49)	1:84:A:LEU:O	1:45:A:ILE:N	9	0.17
(1,43)	1:76:A:PHE:O	1:87:A:CYS:N	12	0.17
(1,43)	1:76:A:PHE:O	1:87:A:CYS:N	14	0.17
(1,39)	1:61:A:VAL:O	1:66:A:GLY:N	11	0.17
(1,39)	1:61:A:VAL:O	1:66:A:GLY:N	12	0.17
(1,36)	1:58:A:GLU:O	1:62:A:GLU:N	6	0.17
(1,24)	1:33:A:ALA:O	1:114:A:VAL:N	4	0.17
(1,20)	1:30:A:ALA:O	1:34:A:ARG:N	11	0.17
(1,17)	1:27:A:GLY:O	1:31:A:ILE:N	7	0.17
(1,17)	1:27:A:GLY:O	1:31:A:ILE:N	8	0.17
(1,15)	1:24:A:TRP:O	1:48:A:THR:N	3	0.17
(1,12)	1:14:A:ALA:O	1:18:A:GLU:N	13	0.17
(6,138)	1:58:A:GLU:HB2	1:60:A:ILE:H	7	0.16
(6,138)	1:58:A:GLU:HB2	1:60:A:ILE:H	11	0.16
(6,138)	1:58:A:GLU:HB2	1:60:A:ILE:H	15	0.16
(6,133)	1:57:A:LEU:HG	1:58:A:GLU:HB3	15	0.16
(6,69)	1:33:A:ALA:HB1	1:34:A:ARG:HD3	1	0.16
(6,69)	1:33:A:ALA:HB2	1:34:A:ARG:HD3	1	0.16
(6,69)	1:33:A:ALA:HB3	1:34:A:ARG:HD3	1	0.16
(2,121)	1:58:A:GLU:HB2	1:60:A:ILE:H	7	0.16
(2,121)	1:58:A:GLU:HB2	1:60:A:ILE:H	11	0.16
(2,121)	1:58:A:GLU:HB2	1:60:A:ILE:H	15	0.16
(2,116)	1:57:A:LEU:HG	1:58:A:GLU:HB3	15	0.16
(2,62)	1:33:A:ALA:HB1	1:34:A:ARG:HD3	1	0.16
(2,62)	1:33:A:ALA:HB2	1:34:A:ARG:HD3	1	0.16
(2,62)	1:33:A:ALA:HB3	1:34:A:ARG:HD3	1	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,93)	1:170:A:ALA:O	1:174:A:ARG:N	6	0.16
(1,93)	1:170:A:ALA:O	1:174:A:ARG:N	8	0.16
(1,93)	1:170:A:ALA:O	1:174:A:ARG:N	15	0.16
(1,81)	1:155:A:ALA:O	1:159:A:LEU:N	10	0.16
(1,79)	1:153:A:ARG:O	1:157:A:THR:N	4	0.16
(1,71)	1:145:A:PRO:O	1:148:A:HIS:N	3	0.16
(1,71)	1:145:A:PRO:O	1:148:A:HIS:N	6	0.16
(1,71)	1:145:A:PRO:O	1:148:A:HIS:N	7	0.16
(1,71)	1:145:A:PRO:O	1:148:A:HIS:N	9	0.16
(1,71)	1:145:A:PRO:O	1:148:A:HIS:N	11	0.16
(1,67)	1:131:A:ASP:O	1:135:A:TYR:N	4	0.16
(1,66)	1:126:A:GLU:O	1:130:A:TRP:N	13	0.16
(1,60)	1:113:A:GLY:O	1:120:A:VAL:N	3	0.16
(1,60)	1:113:A:GLY:O	1:120:A:VAL:N	5	0.16
(1,60)	1:113:A:GLY:O	1:120:A:VAL:N	6	0.16
(1,60)	1:113:A:GLY:O	1:120:A:VAL:N	11	0.16
(1,55)	1:91:A:TRP:O	1:98:A:GLU:N	12	0.16
(1,53)	1:88:A:GLU:O	1:49:A:PHE:N	1	0.16
(1,46)	1:79:A:GLU:O	1:67:A:ARG:N	12	0.16
(1,39)	1:61:A:VAL:O	1:66:A:GLY:N	14	0.16
(1,36)	1:58:A:GLU:O	1:62:A:GLU:N	1	0.16
(1,36)	1:58:A:GLU:O	1:62:A:GLU:N	11	0.16
(1,35)	1:57:A:LEU:O	1:61:A:VAL:N	6	0.16
(1,35)	1:57:A:LEU:O	1:61:A:VAL:N	7	0.16
(1,35)	1:57:A:LEU:O	1:61:A:VAL:N	8	0.16
(1,33)	1:55:A:GLY:O	1:59:A:ALA:N	10	0.16
(1,32)	1:54:A:ARG:O	1:58:A:GLU:N	8	0.16
(1,32)	1:54:A:ARG:O	1:58:A:GLU:N	9	0.16
(1,30)	1:50:A:PRO:O	1:53:A:ARG:N	11	0.16
(1,28)	1:48:A:THR:O	1:24:A:TRP:N	9	0.16
(1,28)	1:48:A:THR:O	1:24:A:TRP:N	13	0.16
(1,17)	1:27:A:GLY:O	1:31:A:ILE:N	10	0.16
(1,12)	1:14:A:ALA:O	1:18:A:GLU:N	6	0.16
(1,12)	1:14:A:ALA:O	1:18:A:GLU:N	10	0.16
(1,12)	1:14:A:ALA:O	1:18:A:GLU:N	12	0.16
(1,3)	1:5:A:GLN:O	1:9:A:ILE:N	1	0.16
(6,157)	1:68:A:VAL:HG21	1:69:A:MET:H	14	0.15
(6,157)	1:68:A:VAL:HG22	1:69:A:MET:H	14	0.15
(6,157)	1:68:A:VAL:HG23	1:69:A:MET:H	14	0.15
(6,138)	1:58:A:GLU:HB2	1:60:A:ILE:H	8	0.15
(6,138)	1:58:A:GLU:HB2	1:60:A:ILE:H	9	0.15
(6,78)	1:37:A:ARG:HD2	1:38:A:VAL:H	12	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(6,24)	1:8:A:LEU:H	1:9:A:ILE:HA	1	0.15
(6,24)	1:8:A:LEU:H	1:9:A:ILE:HA	2	0.15
(6,24)	1:8:A:LEU:H	1:9:A:ILE:HA	3	0.15
(6,24)	1:8:A:LEU:H	1:9:A:ILE:HA	4	0.15
(6,24)	1:8:A:LEU:H	1:9:A:ILE:HA	5	0.15
(6,24)	1:8:A:LEU:H	1:9:A:ILE:HA	6	0.15
(6,24)	1:8:A:LEU:H	1:9:A:ILE:HA	7	0.15
(6,24)	1:8:A:LEU:H	1:9:A:ILE:HA	8	0.15
(6,24)	1:8:A:LEU:H	1:9:A:ILE:HA	9	0.15
(6,24)	1:8:A:LEU:H	1:9:A:ILE:HA	10	0.15
(6,24)	1:8:A:LEU:H	1:9:A:ILE:HA	11	0.15
(6,24)	1:8:A:LEU:H	1:9:A:ILE:HA	12	0.15
(6,24)	1:8:A:LEU:H	1:9:A:ILE:HA	13	0.15
(6,24)	1:8:A:LEU:H	1:9:A:ILE:HA	14	0.15
(6,24)	1:8:A:LEU:H	1:9:A:ILE:HA	15	0.15
(2,138)	1:68:A:VAL:HG21	1:69:A:MET:H	14	0.15
(2,138)	1:68:A:VAL:HG22	1:69:A:MET:H	14	0.15
(2,138)	1:68:A:VAL:HG23	1:69:A:MET:H	14	0.15
(2,121)	1:58:A:GLU:HB2	1:60:A:ILE:H	8	0.15
(2,121)	1:58:A:GLU:HB2	1:60:A:ILE:H	9	0.15
(2,71)	1:37:A:ARG:HD2	1:38:A:VAL:H	12	0.15
(2,24)	1:8:A:LEU:H	1:9:A:ILE:HA	1	0.15
(2,24)	1:8:A:LEU:H	1:9:A:ILE:HA	2	0.15
(2,24)	1:8:A:LEU:H	1:9:A:ILE:HA	3	0.15
(2,24)	1:8:A:LEU:H	1:9:A:ILE:HA	4	0.15
(2,24)	1:8:A:LEU:H	1:9:A:ILE:HA	5	0.15
(2,24)	1:8:A:LEU:H	1:9:A:ILE:HA	6	0.15
(2,24)	1:8:A:LEU:H	1:9:A:ILE:HA	7	0.15
(2,24)	1:8:A:LEU:H	1:9:A:ILE:HA	8	0.15
(2,24)	1:8:A:LEU:H	1:9:A:ILE:HA	9	0.15
(2,24)	1:8:A:LEU:H	1:9:A:ILE:HA	10	0.15
(2,24)	1:8:A:LEU:H	1:9:A:ILE:HA	11	0.15
(2,24)	1:8:A:LEU:H	1:9:A:ILE:HA	12	0.15
(2,24)	1:8:A:LEU:H	1:9:A:ILE:HA	13	0.15
(2,24)	1:8:A:LEU:H	1:9:A:ILE:HA	14	0.15
(2,24)	1:8:A:LEU:H	1:9:A:ILE:HA	15	0.15
(1,93)	1:170:A:ALA:O	1:174:A:ARG:N	7	0.15
(1,93)	1:170:A:ALA:O	1:174:A:ARG:N	9	0.15
(1,93)	1:170:A:ALA:O	1:174:A:ARG:N	10	0.15
(1,93)	1:170:A:ALA:O	1:174:A:ARG:N	14	0.15
(1,85)	1:162:A:GLU:O	1:166:A:VAL:N	9	0.15
(1,85)	1:162:A:GLU:O	1:166:A:VAL:N	10	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,81)	1:155:A:ALA:O	1:159:A:LEU:N	8	0.15
(1,81)	1:155:A:ALA:O	1:159:A:LEU:N	9	0.15
(1,71)	1:145:A:PRO:O	1:148:A:HIS:N	4	0.15
(1,71)	1:145:A:PRO:O	1:148:A:HIS:N	15	0.15
(1,67)	1:131:A:ASP:O	1:135:A:TYR:N	14	0.15
(1,60)	1:113:A:GLY:O	1:120:A:VAL:N	12	0.15
(1,59)	1:106:A:SER:O	1:124:A:SER:N	14	0.15
(1,58)	1:99:A:ILE:O	1:102:A:ALA:N	1	0.15
(1,55)	1:91:A:TRP:O	1:98:A:GLU:N	3	0.15
(1,49)	1:84:A:LEU:O	1:45:A:ILE:N	10	0.15
(1,47)	1:80:A:ILE:O	1:83:A:GLU:N	3	0.15
(1,45)	1:78:A:ALA:O	1:85:A:LEU:N	12	0.15
(1,45)	1:78:A:ALA:O	1:85:A:LEU:N	14	0.15
(1,41)	1:70:A:GLU:O	1:77:A:LEU:N	10	0.15
(1,37)	1:59:A:ALA:O	1:63:A:MET:N	3	0.15
(1,36)	1:58:A:GLU:O	1:62:A:GLU:N	15	0.15
(1,35)	1:57:A:LEU:O	1:61:A:VAL:N	4	0.15
(1,35)	1:57:A:LEU:O	1:61:A:VAL:N	9	0.15
(1,35)	1:57:A:LEU:O	1:61:A:VAL:N	10	0.15
(1,33)	1:55:A:GLY:O	1:59:A:ALA:N	4	0.15
(1,33)	1:55:A:GLY:O	1:59:A:ALA:N	8	0.15
(1,33)	1:55:A:GLY:O	1:59:A:ALA:N	9	0.15
(1,29)	1:49:A:PHE:O	1:90:A:ALA:N	6	0.15
(1,29)	1:49:A:PHE:O	1:90:A:ALA:N	9	0.15
(1,26)	1:46:A:ASP:O	1:26:A:GLY:N	11	0.15
(1,15)	1:24:A:TRP:O	1:48:A:THR:N	10	0.15
(1,14)	1:16:A:ALA:O	1:21:A:LEU:N	11	0.15
(1,14)	1:16:A:ALA:O	1:21:A:LEU:N	12	0.15
(1,13)	1:16:A:ALA:O	1:20:A:ASN:N	8	0.15
(1,13)	1:16:A:ALA:O	1:20:A:ASN:N	9	0.15
(1,12)	1:14:A:ALA:O	1:18:A:GLU:N	8	0.15
(1,3)	1:5:A:GLN:O	1:9:A:ILE:N	3	0.15
(6,184)	1:82:A:ASP:H	1:83:A:GLU:HB3	10	0.14
(6,157)	1:68:A:VAL:HG21	1:69:A:MET:H	13	0.14
(6,157)	1:68:A:VAL:HG22	1:69:A:MET:H	13	0.14
(6,157)	1:68:A:VAL:HG23	1:69:A:MET:H	13	0.14
(6,138)	1:58:A:GLU:HB2	1:60:A:ILE:H	10	0.14
(2,163)	1:82:A:ASP:H	1:83:A:GLU:HB3	10	0.14
(2,138)	1:68:A:VAL:HG21	1:69:A:MET:H	13	0.14
(2,138)	1:68:A:VAL:HG22	1:69:A:MET:H	13	0.14
(2,138)	1:68:A:VAL:HG23	1:69:A:MET:H	13	0.14
(2,121)	1:58:A:GLU:HB2	1:60:A:ILE:H	10	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,92)	1:169:A:ALA:O	1:173:A:SER:N	1	0.14
(1,88)	1:165:A:GLU:O	1:169:A:ALA:N	7	0.14
(1,88)	1:165:A:GLU:O	1:169:A:ALA:N	9	0.14
(1,88)	1:165:A:GLU:O	1:169:A:ALA:N	10	0.14
(1,88)	1:165:A:GLU:O	1:169:A:ALA:N	12	0.14
(1,85)	1:162:A:GLU:O	1:166:A:VAL:N	2	0.14
(1,85)	1:162:A:GLU:O	1:166:A:VAL:N	5	0.14
(1,85)	1:162:A:GLU:O	1:166:A:VAL:N	6	0.14
(1,85)	1:162:A:GLU:O	1:166:A:VAL:N	7	0.14
(1,85)	1:162:A:GLU:O	1:166:A:VAL:N	8	0.14
(1,85)	1:162:A:GLU:O	1:166:A:VAL:N	11	0.14
(1,84)	1:161:A:ALA:O	1:165:A:GLU:N	14	0.14
(1,80)	1:154:A:LEU:O	1:158:A:SER:N	14	0.14
(1,76)	1:150:A:GLU:O	1:154:A:LEU:N	11	0.14
(1,75)	1:149:A:ILE:O	1:153:A:ARG:N	1	0.14
(1,75)	1:149:A:ILE:O	1:153:A:ARG:N	5	0.14
(1,75)	1:149:A:ILE:O	1:153:A:ARG:N	6	0.14
(1,75)	1:149:A:ILE:O	1:153:A:ARG:N	8	0.14
(1,71)	1:145:A:PRO:O	1:148:A:HIS:N	8	0.14
(1,71)	1:145:A:PRO:O	1:148:A:HIS:N	10	0.14
(1,69)	1:135:A:TYR:O	1:139:A:VAL:N	1	0.14
(1,66)	1:126:A:GLU:O	1:130:A:TRP:N	12	0.14
(1,62)	1:120:A:VAL:O	1:113:A:GLY:N	15	0.14
(1,60)	1:113:A:GLY:O	1:120:A:VAL:N	8	0.14
(1,60)	1:113:A:GLY:O	1:120:A:VAL:N	9	0.14
(1,58)	1:99:A:ILE:O	1:102:A:ALA:N	2	0.14
(1,56)	1:96:A:ALA:O	1:93:A:ALA:N	1	0.14
(1,53)	1:88:A:GLU:O	1:49:A:PHE:N	3	0.14
(1,53)	1:88:A:GLU:O	1:49:A:PHE:N	5	0.14
(1,51)	1:86:A:ASP:O	1:47:A:LEU:N	13	0.14
(1,50)	1:85:A:LEU:O	1:78:A:ALA:N	12	0.14
(1,47)	1:80:A:ILE:O	1:83:A:GLU:N	9	0.14
(1,47)	1:80:A:ILE:O	1:83:A:GLU:N	12	0.14
(1,45)	1:78:A:ALA:O	1:85:A:LEU:N	2	0.14
(1,43)	1:76:A:PHE:O	1:87:A:CYS:N	9	0.14
(1,39)	1:61:A:VAL:O	1:66:A:GLY:N	2	0.14
(1,36)	1:58:A:GLU:O	1:62:A:GLU:N	2	0.14
(1,34)	1:56:A:GLU:O	1:60:A:ILE:N	12	0.14
(1,33)	1:55:A:GLY:O	1:59:A:ALA:N	7	0.14
(1,32)	1:54:A:ARG:O	1:58:A:GLU:N	10	0.14
(1,29)	1:49:A:PHE:O	1:90:A:ALA:N	5	0.14
(1,28)	1:48:A:THR:O	1:24:A:TRP:N	1	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,28)	1:48:A:THR:O	1:24:A:TRP:N	3	0.14
(1,28)	1:48:A:THR:O	1:24:A:TRP:N	6	0.14
(1,26)	1:46:A:ASP:O	1:26:A:GLY:N	2	0.14
(1,17)	1:27:A:GLY:O	1:31:A:ILE:N	9	0.14
(1,16)	1:25:A:ILE:O	1:123:A:ASN:N	1	0.14
(1,15)	1:24:A:TRP:O	1:48:A:THR:N	4	0.14
(1,15)	1:24:A:TRP:O	1:48:A:THR:N	7	0.14
(1,12)	1:14:A:ALA:O	1:18:A:GLU:N	9	0.14
(1,12)	1:14:A:ALA:O	1:18:A:GLU:N	11	0.14
(1,12)	1:14:A:ALA:O	1:18:A:GLU:N	14	0.14
(1,11)	1:13:A:LEU:O	1:17:A:ASP:N	14	0.14
(1,10)	1:12:A:ILE:O	1:16:A:ALA:N	14	0.14
(1,6)	1:8:A:LEU:O	1:12:A:ILE:N	13	0.14
(1,6)	1:8:A:LEU:O	1:12:A:ILE:N	14	0.14
(1,6)	1:8:A:LEU:O	1:12:A:ILE:N	15	0.14
(1,3)	1:5:A:GLN:O	1:9:A:ILE:N	5	0.14
(6,268)	1:151:A:SER:HA	1:152:A:TYR:HB3	3	0.13
(6,202)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB1	15	0.13
(6,202)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB2	15	0.13
(6,202)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB3	15	0.13
(6,184)	1:82:A:ASP:H	1:83:A:GLU:HB3	3	0.13
(6,157)	1:68:A:VAL:HG21	1:69:A:MET:H	15	0.13
(6,157)	1:68:A:VAL:HG22	1:69:A:MET:H	15	0.13
(6,157)	1:68:A:VAL:HG23	1:69:A:MET:H	15	0.13
(6,138)	1:58:A:GLU:HB2	1:60:A:ILE:H	1	0.13
(6,138)	1:58:A:GLU:HB2	1:60:A:ILE:H	2	0.13
(6,138)	1:58:A:GLU:HB2	1:60:A:ILE:H	3	0.13
(6,83)	1:39:A:THR:HB	1:40:A:ARG:HD3	7	0.13
(6,78)	1:37:A:ARG:HD2	1:38:A:VAL:H	7	0.13
(2,237)	1:151:A:SER:HA	1:152:A:TYR:HB3	3	0.13
(2,179)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB1	15	0.13
(2,179)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB2	15	0.13
(2,179)	1:95:A:GLU:HG2	1:96:A:ALA:HB3	15	0.13
(2,163)	1:82:A:ASP:H	1:83:A:GLU:HB3	3	0.13
(2,138)	1:68:A:VAL:HG21	1:69:A:MET:H	15	0.13
(2,138)	1:68:A:VAL:HG22	1:69:A:MET:H	15	0.13
(2,138)	1:68:A:VAL:HG23	1:69:A:MET:H	15	0.13
(2,121)	1:58:A:GLU:HB2	1:60:A:ILE:H	1	0.13
(2,121)	1:58:A:GLU:HB2	1:60:A:ILE:H	2	0.13
(2,121)	1:58:A:GLU:HB2	1:60:A:ILE:H	3	0.13
(2,76)	1:39:A:THR:HB	1:40:A:ARG:HD3	7	0.13
(2,71)	1:37:A:ARG:HD2	1:38:A:VAL:H	7	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,93)	1:170:A:ALA:O	1:174:A:ARG:N	11	0.13
(1,88)	1:165:A:GLU:O	1:169:A:ALA:N	8	0.13
(1,88)	1:165:A:GLU:O	1:169:A:ALA:N	11	0.13
(1,86)	1:163:A:LYS:O	1:167:A:LEU:N	13	0.13
(1,85)	1:162:A:GLU:O	1:166:A:VAL:N	1	0.13
(1,85)	1:162:A:GLU:O	1:166:A:VAL:N	3	0.13
(1,85)	1:162:A:GLU:O	1:166:A:VAL:N	12	0.13
(1,85)	1:162:A:GLU:O	1:166:A:VAL:N	14	0.13
(1,81)	1:155:A:ALA:O	1:159:A:LEU:N	2	0.13
(1,81)	1:155:A:ALA:O	1:159:A:LEU:N	6	0.13
(1,81)	1:155:A:ALA:O	1:159:A:LEU:N	7	0.13
(1,80)	1:154:A:LEU:O	1:158:A:SER:N	12	0.13
(1,79)	1:153:A:ARG:O	1:157:A:THR:N	6	0.13
(1,75)	1:149:A:ILE:O	1:153:A:ARG:N	2	0.13
(1,75)	1:149:A:ILE:O	1:153:A:ARG:N	3	0.13
(1,75)	1:149:A:ILE:O	1:153:A:ARG:N	7	0.13
(1,71)	1:145:A:PRO:O	1:148:A:HIS:N	12	0.13
(1,67)	1:131:A:ASP:O	1:135:A:TYR:N	5	0.13
(1,61)	1:118:A:ARG:O	1:115:A:ILE:N	5	0.13
(1,60)	1:113:A:GLY:O	1:120:A:VAL:N	14	0.13
(1,55)	1:91:A:TRP:O	1:98:A:GLU:N	11	0.13
(1,49)	1:84:A:LEU:O	1:45:A:ILE:N	5	0.13
(1,49)	1:84:A:LEU:O	1:45:A:ILE:N	7	0.13
(1,46)	1:79:A:GLU:O	1:67:A:ARG:N	11	0.13
(1,45)	1:78:A:ALA:O	1:85:A:LEU:N	3	0.13
(1,45)	1:78:A:ALA:O	1:85:A:LEU:N	9	0.13
(1,44)	1:77:A:LEU:O	1:69:A:MET:N	11	0.13
(1,39)	1:61:A:VAL:O	1:66:A:GLY:N	1	0.13
(1,39)	1:61:A:VAL:O	1:66:A:GLY:N	3	0.13
(1,39)	1:61:A:VAL:O	1:66:A:GLY:N	4	0.13
(1,36)	1:58:A:GLU:O	1:62:A:GLU:N	12	0.13
(1,35)	1:57:A:LEU:O	1:61:A:VAL:N	1	0.13
(1,35)	1:57:A:LEU:O	1:61:A:VAL:N	3	0.13
(1,33)	1:55:A:GLY:O	1:59:A:ALA:N	3	0.13
(1,33)	1:55:A:GLY:O	1:59:A:ALA:N	6	0.13
(1,31)	1:53:A:ARG:O	1:56:A:GLU:N	15	0.13
(1,24)	1:33:A:ALA:O	1:114:A:VAL:N	7	0.13
(1,20)	1:30:A:ALA:O	1:34:A:ARG:N	14	0.13
(1,16)	1:25:A:ILE:O	1:123:A:ASN:N	6	0.13
(1,8)	1:10:A:HIS:O	1:14:A:ALA:N	2	0.13
(1,8)	1:10:A:HIS:O	1:14:A:ALA:N	4	0.13
(1,8)	1:10:A:HIS:O	1:14:A:ALA:N	5	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,6)	1:8:A:LEU:O	1:12:A:ILE:N	12	0.13
(6,214)	1:104:A:GLN:H	1:106:A:SER:H	4	0.12
(6,184)	1:82:A:ASP:H	1:83:A:GLU:HB3	9	0.12
(6,174)	1:72:A:LEU:HB3	1:73:A:ASP:HA	15	0.12
(6,157)	1:68:A:VAL:HG21	1:69:A:MET:H	2	0.12
(6,157)	1:68:A:VAL:HG22	1:69:A:MET:H	2	0.12
(6,157)	1:68:A:VAL:HG23	1:69:A:MET:H	2	0.12
(6,157)	1:68:A:VAL:HG21	1:69:A:MET:H	11	0.12
(6,157)	1:68:A:VAL:HG22	1:69:A:MET:H	11	0.12
(6,157)	1:68:A:VAL:HG23	1:69:A:MET:H	11	0.12
(6,90)	1:41:A:LYS:HD3	1:42:A:HIS:H	2	0.12
(6,90)	1:41:A:LYS:HD3	1:42:A:HIS:H	5	0.12
(2,190)	1:104:A:GLN:H	1:106:A:SER:H	4	0.12
(2,163)	1:82:A:ASP:H	1:83:A:GLU:HB3	9	0.12
(2,153)	1:72:A:LEU:HB3	1:73:A:ASP:HA	15	0.12
(2,138)	1:68:A:VAL:HG21	1:69:A:MET:H	2	0.12
(2,138)	1:68:A:VAL:HG22	1:69:A:MET:H	2	0.12
(2,138)	1:68:A:VAL:HG23	1:69:A:MET:H	2	0.12
(2,138)	1:68:A:VAL:HG21	1:69:A:MET:H	11	0.12
(2,138)	1:68:A:VAL:HG22	1:69:A:MET:H	11	0.12
(2,138)	1:68:A:VAL:HG23	1:69:A:MET:H	11	0.12
(2,81)	1:41:A:LYS:HD3	1:42:A:HIS:H	2	0.12
(2,81)	1:41:A:LYS:HD3	1:42:A:HIS:H	5	0.12
(1,94)	1:171:A:PHE:O	1:175:A:TYR:N	13	0.12
(1,91)	1:168:A:ARG:O	1:172:A:ARG:N	4	0.12
(1,89)	1:166:A:VAL:O	1:170:A:ALA:N	12	0.12
(1,89)	1:166:A:VAL:O	1:170:A:ALA:N	13	0.12
(1,89)	1:166:A:VAL:O	1:170:A:ALA:N	15	0.12
(1,88)	1:165:A:GLU:O	1:169:A:ALA:N	6	0.12
(1,88)	1:165:A:GLU:O	1:169:A:ALA:N	15	0.12
(1,86)	1:163:A:LYS:O	1:167:A:LEU:N	1	0.12
(1,86)	1:163:A:LYS:O	1:167:A:LEU:N	9	0.12
(1,85)	1:162:A:GLU:O	1:166:A:VAL:N	13	0.12
(1,84)	1:161:A:ALA:O	1:165:A:GLU:N	11	0.12
(1,81)	1:155:A:ALA:O	1:159:A:LEU:N	5	0.12
(1,79)	1:153:A:ARG:O	1:157:A:THR:N	9	0.12
(1,77)	1:151:A:SER:O	1:155:A:ALA:N	3	0.12
(1,77)	1:151:A:SER:O	1:155:A:ALA:N	5	0.12
(1,76)	1:150:A:GLU:O	1:154:A:LEU:N	12	0.12
(1,75)	1:149:A:ILE:O	1:153:A:ARG:N	4	0.12
(1,75)	1:149:A:ILE:O	1:153:A:ARG:N	9	0.12
(1,66)	1:126:A:GLU:O	1:130:A:TRP:N	11	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,66)	1:126:A:GLU:O	1:130:A:TRP:N	14	0.12
(1,60)	1:113:A:GLY:O	1:120:A:VAL:N	2	0.12
(1,60)	1:113:A:GLY:O	1:120:A:VAL:N	7	0.12
(1,60)	1:113:A:GLY:O	1:120:A:VAL:N	10	0.12
(1,56)	1:96:A:ALA:O	1:93:A:ALA:N	4	0.12
(1,55)	1:91:A:TRP:O	1:98:A:GLU:N	13	0.12
(1,55)	1:91:A:TRP:O	1:98:A:GLU:N	14	0.12
(1,55)	1:91:A:TRP:O	1:98:A:GLU:N	15	0.12
(1,54)	1:90:A:ALA:O	1:51:A:GLY:N	12	0.12
(1,53)	1:88:A:GLU:O	1:49:A:PHE:N	2	0.12
(1,50)	1:85:A:LEU:O	1:78:A:ALA:N	5	0.12
(1,49)	1:84:A:LEU:O	1:45:A:ILE:N	8	0.12
(1,47)	1:80:A:ILE:O	1:83:A:GLU:N	7	0.12
(1,47)	1:80:A:ILE:O	1:83:A:GLU:N	14	0.12
(1,45)	1:78:A:ALA:O	1:85:A:LEU:N	4	0.12
(1,45)	1:78:A:ALA:O	1:85:A:LEU:N	5	0.12
(1,45)	1:78:A:ALA:O	1:85:A:LEU:N	8	0.12
(1,36)	1:58:A:GLU:O	1:62:A:GLU:N	13	0.12
(1,35)	1:57:A:LEU:O	1:61:A:VAL:N	2	0.12
(1,29)	1:49:A:PHE:O	1:90:A:ALA:N	8	0.12
(1,29)	1:49:A:PHE:O	1:90:A:ALA:N	10	0.12
(1,28)	1:48:A:THR:O	1:24:A:TRP:N	4	0.12
(1,28)	1:48:A:THR:O	1:24:A:TRP:N	8	0.12
(1,27)	1:47:A:LEU:O	1:88:A:GLU:N	4	0.12
(1,27)	1:47:A:LEU:O	1:88:A:GLU:N	11	0.12
(1,13)	1:16:A:ALA:O	1:20:A:ASN:N	15	0.12
(1,9)	1:11:A:LYS:O	1:15:A:ALA:N	7	0.12
(1,9)	1:11:A:LYS:O	1:15:A:ALA:N	10	0.12
(1,7)	1:9:A:ILE:O	1:13:A:LEU:N	14	0.12
(1,6)	1:8:A:LEU:O	1:12:A:ILE:N	9	0.12
(1,6)	1:8:A:LEU:O	1:12:A:ILE:N	10	0.12
(1,6)	1:8:A:LEU:O	1:12:A:ILE:N	11	0.12
(6,184)	1:82:A:ASP:H	1:83:A:GLU:HB3	1	0.11
(6,157)	1:68:A:VAL:HG21	1:69:A:MET:H	4	0.11
(6,157)	1:68:A:VAL:HG22	1:69:A:MET:H	4	0.11
(6,157)	1:68:A:VAL:HG23	1:69:A:MET:H	4	0.11
(6,157)	1:68:A:VAL:HG21	1:69:A:MET:H	5	0.11
(6,157)	1:68:A:VAL:HG22	1:69:A:MET:H	5	0.11
(6,157)	1:68:A:VAL:HG23	1:69:A:MET:H	5	0.11
(6,157)	1:68:A:VAL:HG21	1:69:A:MET:H	12	0.11
(6,157)	1:68:A:VAL:HG22	1:69:A:MET:H	12	0.11
(6,157)	1:68:A:VAL:HG23	1:69:A:MET:H	12	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(6,83)	1:39:A:THR:HB	1:40:A:ARG:HD3	10	0.11
(2,163)	1:82:A:ASP:H	1:83:A:GLU:HB3	1	0.11
(2,138)	1:68:A:VAL:HG21	1:69:A:MET:H	4	0.11
(2,138)	1:68:A:VAL:HG22	1:69:A:MET:H	4	0.11
(2,138)	1:68:A:VAL:HG23	1:69:A:MET:H	4	0.11
(2,138)	1:68:A:VAL:HG21	1:69:A:MET:H	5	0.11
(2,138)	1:68:A:VAL:HG22	1:69:A:MET:H	5	0.11
(2,138)	1:68:A:VAL:HG23	1:69:A:MET:H	5	0.11
(2,138)	1:68:A:VAL:HG21	1:69:A:MET:H	12	0.11
(2,138)	1:68:A:VAL:HG22	1:69:A:MET:H	12	0.11
(2,138)	1:68:A:VAL:HG23	1:69:A:MET:H	12	0.11
(2,76)	1:39:A:THR:HB	1:40:A:ARG:HD3	10	0.11
(1,92)	1:169:A:ALA:O	1:173:A:SER:N	2	0.11
(1,92)	1:169:A:ALA:O	1:173:A:SER:N	5	0.11
(1,89)	1:166:A:VAL:O	1:170:A:ALA:N	14	0.11
(1,88)	1:165:A:GLU:O	1:169:A:ALA:N	2	0.11
(1,88)	1:165:A:GLU:O	1:169:A:ALA:N	5	0.11
(1,88)	1:165:A:GLU:O	1:169:A:ALA:N	14	0.11
(1,86)	1:163:A:LYS:O	1:167:A:LEU:N	4	0.11
(1,86)	1:163:A:LYS:O	1:167:A:LEU:N	6	0.11
(1,86)	1:163:A:LYS:O	1:167:A:LEU:N	7	0.11
(1,86)	1:163:A:LYS:O	1:167:A:LEU:N	8	0.11
(1,85)	1:162:A:GLU:O	1:166:A:VAL:N	4	0.11
(1,85)	1:162:A:GLU:O	1:166:A:VAL:N	15	0.11
(1,83)	1:160:A:GLY:O	1:164:A:VAL:N	13	0.11
(1,81)	1:155:A:ALA:O	1:159:A:LEU:N	3	0.11
(1,81)	1:155:A:ALA:O	1:159:A:LEU:N	11	0.11
(1,80)	1:154:A:LEU:O	1:158:A:SER:N	1	0.11
(1,80)	1:154:A:LEU:O	1:158:A:SER:N	11	0.11
(1,79)	1:153:A:ARG:O	1:157:A:THR:N	2	0.11
(1,79)	1:153:A:ARG:O	1:157:A:THR:N	11	0.11
(1,77)	1:151:A:SER:O	1:155:A:ALA:N	1	0.11
(1,77)	1:151:A:SER:O	1:155:A:ALA:N	6	0.11
(1,76)	1:150:A:GLU:O	1:154:A:LEU:N	14	0.11
(1,76)	1:150:A:GLU:O	1:154:A:LEU:N	15	0.11
(1,75)	1:149:A:ILE:O	1:153:A:ARG:N	10	0.11
(1,69)	1:135:A:TYR:O	1:139:A:VAL:N	3	0.11
(1,60)	1:113:A:GLY:O	1:120:A:VAL:N	1	0.11
(1,60)	1:113:A:GLY:O	1:120:A:VAL:N	13	0.11
(1,57)	1:98:A:GLU:O	1:91:A:TRP:N	3	0.11
(1,56)	1:96:A:ALA:O	1:93:A:ALA:N	5	0.11
(1,55)	1:91:A:TRP:O	1:98:A:GLU:N	2	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,55)	1:91:A:TRP:O	1:98:A:GLU:N	5	0.11
(1,55)	1:91:A:TRP:O	1:98:A:GLU:N	8	0.11
(1,55)	1:91:A:TRP:O	1:98:A:GLU:N	9	0.11
(1,54)	1:90:A:ALA:O	1:51:A:GLY:N	1	0.11
(1,54)	1:90:A:ALA:O	1:51:A:GLY:N	3	0.11
(1,51)	1:86:A:ASP:O	1:47:A:LEU:N	7	0.11
(1,51)	1:86:A:ASP:O	1:47:A:LEU:N	14	0.11
(1,50)	1:85:A:LEU:O	1:78:A:ALA:N	3	0.11
(1,50)	1:85:A:LEU:O	1:78:A:ALA:N	13	0.11
(1,49)	1:84:A:LEU:O	1:45:A:ILE:N	13	0.11
(1,47)	1:80:A:ILE:O	1:83:A:GLU:N	8	0.11
(1,47)	1:80:A:ILE:O	1:83:A:GLU:N	10	0.11
(1,45)	1:78:A:ALA:O	1:85:A:LEU:N	7	0.11
(1,45)	1:78:A:ALA:O	1:85:A:LEU:N	10	0.11
(1,45)	1:78:A:ALA:O	1:85:A:LEU:N	11	0.11
(1,44)	1:77:A:LEU:O	1:69:A:MET:N	7	0.11
(1,42)	1:75:A:GLY:O	1:72:A:LEU:N	13	0.11
(1,41)	1:70:A:GLU:O	1:77:A:LEU:N	6	0.11
(1,41)	1:70:A:GLU:O	1:77:A:LEU:N	9	0.11
(1,33)	1:55:A:GLY:O	1:59:A:ALA:N	11	0.11
(1,32)	1:54:A:ARG:O	1:58:A:GLU:N	3	0.11
(1,32)	1:54:A:ARG:O	1:58:A:GLU:N	4	0.11
(1,32)	1:54:A:ARG:O	1:58:A:GLU:N	7	0.11
(1,29)	1:49:A:PHE:O	1:90:A:ALA:N	3	0.11
(1,29)	1:49:A:PHE:O	1:90:A:ALA:N	4	0.11
(1,29)	1:49:A:PHE:O	1:90:A:ALA:N	7	0.11
(1,26)	1:46:A:ASP:O	1:26:A:GLY:N	3	0.11
(1,24)	1:33:A:ALA:O	1:114:A:VAL:N	3	0.11
(1,24)	1:33:A:ALA:O	1:114:A:VAL:N	8	0.11
(1,16)	1:25:A:ILE:O	1:123:A:ASN:N	9	0.11
(1,15)	1:24:A:TRP:O	1:48:A:THR:N	1	0.11
(1,15)	1:24:A:TRP:O	1:48:A:THR:N	5	0.11
(1,13)	1:16:A:ALA:O	1:20:A:ASN:N	13	0.11
(1,12)	1:14:A:ALA:O	1:18:A:GLU:N	3	0.11
(1,9)	1:11:A:LYS:O	1:15:A:ALA:N	8	0.11
(1,7)	1:9:A:ILE:O	1:13:A:LEU:N	11	0.11
(1,7)	1:9:A:ILE:O	1:13:A:LEU:N	12	0.11
(1,7)	1:9:A:ILE:O	1:13:A:LEU:N	13	0.11
(1,7)	1:9:A:ILE:O	1:13:A:LEU:N	15	0.11
(1,1)	1:3:A:THR:O	1:7:A:THR:N	7	0.11
(6,238)	1:118:A:ARG:HD3	1:119:A:PRO:HA	3	0.1
(6,157)	1:68:A:VAL:HG21	1:69:A:MET:H	6	0.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(6,157)	1:68:A:VAL:HG22	1:69:A:MET:H	6	0.1
(6,157)	1:68:A:VAL:HG23	1:69:A:MET:H	6	0.1
(6,157)	1:68:A:VAL:HG21	1:69:A:MET:H	7	0.1
(6,157)	1:68:A:VAL:HG22	1:69:A:MET:H	7	0.1
(6,157)	1:68:A:VAL:HG23	1:69:A:MET:H	7	0.1
(6,157)	1:68:A:VAL:HG21	1:69:A:MET:H	8	0.1
(6,157)	1:68:A:VAL:HG22	1:69:A:MET:H	8	0.1
(6,157)	1:68:A:VAL:HG23	1:69:A:MET:H	8	0.1
(6,60)	1:29:A:TRP:H	1:30:A:ALA:HA	12	0.1
(3,21)	1:118:A:ARG:HD3	1:119:A:PRO:HA	3	0.1
(2,138)	1:68:A:VAL:HG21	1:69:A:MET:H	6	0.1
(2,138)	1:68:A:VAL:HG22	1:69:A:MET:H	6	0.1
(2,138)	1:68:A:VAL:HG23	1:69:A:MET:H	6	0.1
(2,138)	1:68:A:VAL:HG21	1:69:A:MET:H	7	0.1
(2,138)	1:68:A:VAL:HG22	1:69:A:MET:H	7	0.1
(2,138)	1:68:A:VAL:HG23	1:69:A:MET:H	7	0.1
(2,138)	1:68:A:VAL:HG21	1:69:A:MET:H	8	0.1
(2,138)	1:68:A:VAL:HG22	1:69:A:MET:H	8	0.1
(2,138)	1:68:A:VAL:HG23	1:69:A:MET:H	8	0.1
(2,56)	1:29:A:TRP:H	1:30:A:ALA:HA	12	0.1
(1,93)	1:170:A:ALA:O	1:174:A:ARG:N	5	0.1
(1,86)	1:163:A:LYS:O	1:167:A:LEU:N	14	0.1
(1,83)	1:160:A:GLY:O	1:164:A:VAL:N	11	0.1
(1,83)	1:160:A:GLY:O	1:164:A:VAL:N	12	0.1
(1,79)	1:153:A:ARG:O	1:157:A:THR:N	8	0.1
(1,79)	1:153:A:ARG:O	1:157:A:THR:N	10	0.1
(1,77)	1:151:A:SER:O	1:155:A:ALA:N	2	0.1
(1,75)	1:149:A:ILE:O	1:153:A:ARG:N	11	0.1
(1,56)	1:96:A:ALA:O	1:93:A:ALA:N	2	0.1
(1,56)	1:96:A:ALA:O	1:93:A:ALA:N	3	0.1
(1,56)	1:96:A:ALA:O	1:93:A:ALA:N	8	0.1
(1,51)	1:86:A:ASP:O	1:47:A:LEU:N	1	0.1
(1,51)	1:86:A:ASP:O	1:47:A:LEU:N	10	0.1
(1,45)	1:78:A:ALA:O	1:85:A:LEU:N	1	0.1
(1,44)	1:77:A:LEU:O	1:69:A:MET:N	6	0.1
(1,44)	1:77:A:LEU:O	1:69:A:MET:N	9	0.1
(1,44)	1:77:A:LEU:O	1:69:A:MET:N	13	0.1
(1,41)	1:70:A:GLU:O	1:77:A:LEU:N	4	0.1
(1,39)	1:61:A:VAL:O	1:66:A:GLY:N	5	0.1
(1,35)	1:57:A:LEU:O	1:61:A:VAL:N	5	0.1
(1,35)	1:57:A:LEU:O	1:61:A:VAL:N	14	0.1
(1,33)	1:55:A:GLY:O	1:59:A:ALA:N	5	0.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,31)	1:53:A:ARG:O	1:56:A:GLU:N	2	0.1
(1,28)	1:48:A:THR:O	1:24:A:TRP:N	10	0.1
(1,27)	1:47:A:LEU:O	1:88:A:GLU:N	13	0.1
(1,21)	1:31:A:ILE:O	1:35:A:LEU:N	15	0.1
(1,9)	1:11:A:LYS:O	1:15:A:ALA:N	9	0.1

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

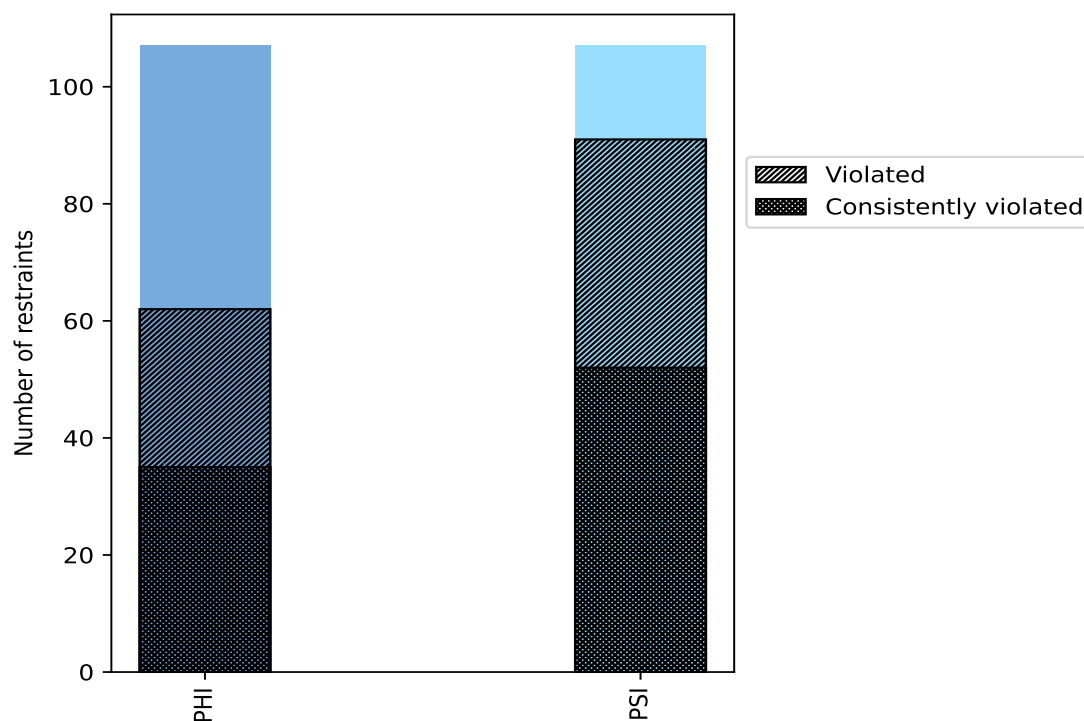
10.1 Summary of dihedral-angle violations [i](#)

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

Angle type	Count	% ¹	Violated ³			Consistently Violated ⁴		
			Count	% ²	% ¹	Count	% ²	% ¹
PHI	107	50.0	62	57.9	29.0	35	32.7	16.4
PSI	107	50.0	91	85.0	42.5	52	48.6	24.3
Total	214	100.0	153	71.5	71.5	87	40.7	40.7

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

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



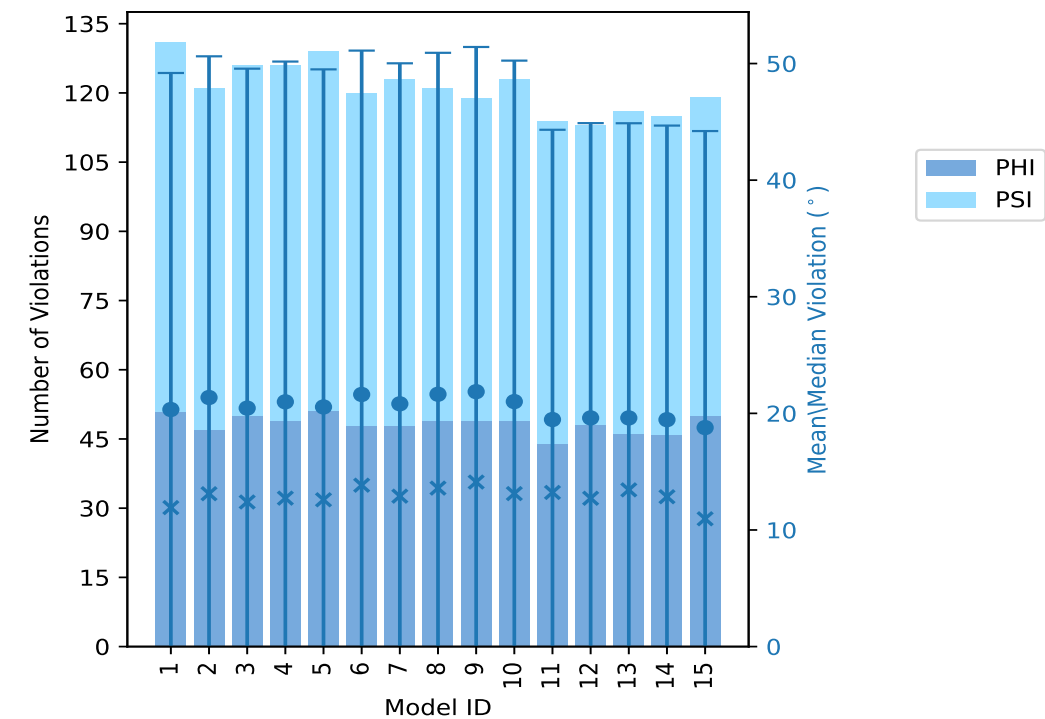
Violated and consistently violated restraints are shown using different hatch patterns in their respective categories

10.2 Dihedral-angle violation statistics for each model ⓘ

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

Model ID	Number of violations			Mean (°)	Max (°)	SD (°)	Median (°)
	PHI	PSI	Total				
1	51	80	131	20.33	163.84	28.86	11.92
2	47	74	121	21.36	162.27	29.26	13.11
3	50	76	126	20.45	164.41	29.11	12.4
4	49	77	126	20.99	165.19	29.18	12.73
5	51	78	129	20.55	164.01	28.95	12.59
6	48	72	120	21.62	162.62	29.49	13.84
7	48	75	123	20.82	163.09	29.2	12.9
8	49	72	121	21.64	163.25	29.28	13.59
9	49	70	119	21.86	162.81	29.56	14.11
10	49	74	123	21.01	163.19	29.24	13.12
11	44	70	114	19.47	158.57	24.85	13.22
12	48	65	113	19.61	157.53	25.28	12.72
13	46	70	116	19.61	159.07	25.27	13.44
14	46	69	115	19.46	157.28	25.22	12.85
15	50	69	119	18.78	160.32	25.43	10.96

10.2.1 Bar graph : Dihedral violation statistics for each model ⓘ



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

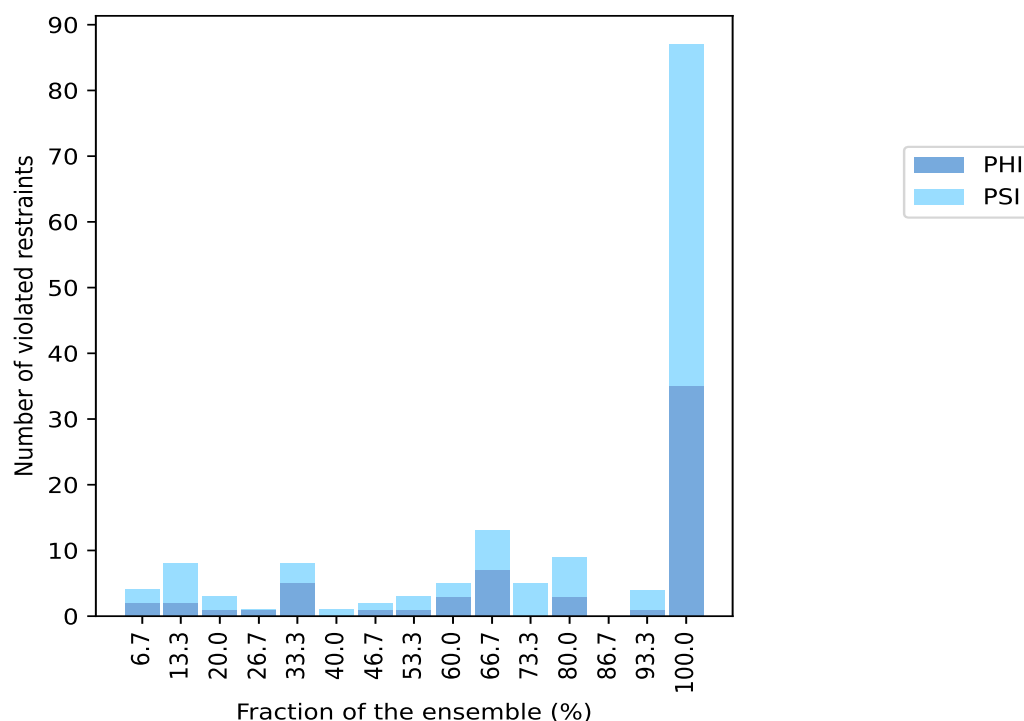
10.3 Dihedral-angle violation statistics for the ensemble [i](#)

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

Number of violated restraints			Fraction of the ensemble	
PHI	PSI	Total	Count ¹	%
2	2	4	1	6.7
2	6	8	2	13.3
1	2	3	3	20.0
1	0	1	4	26.7
5	3	8	5	33.3
0	1	1	6	40.0
1	1	2	7	46.7
1	2	3	8	53.3
3	2	5	9	60.0
7	6	13	10	66.7
0	5	5	11	73.3
3	6	9	12	80.0
0	0	0	13	86.7
1	3	4	14	93.3
35	52	87	15	100.0

¹ Number of models with violations

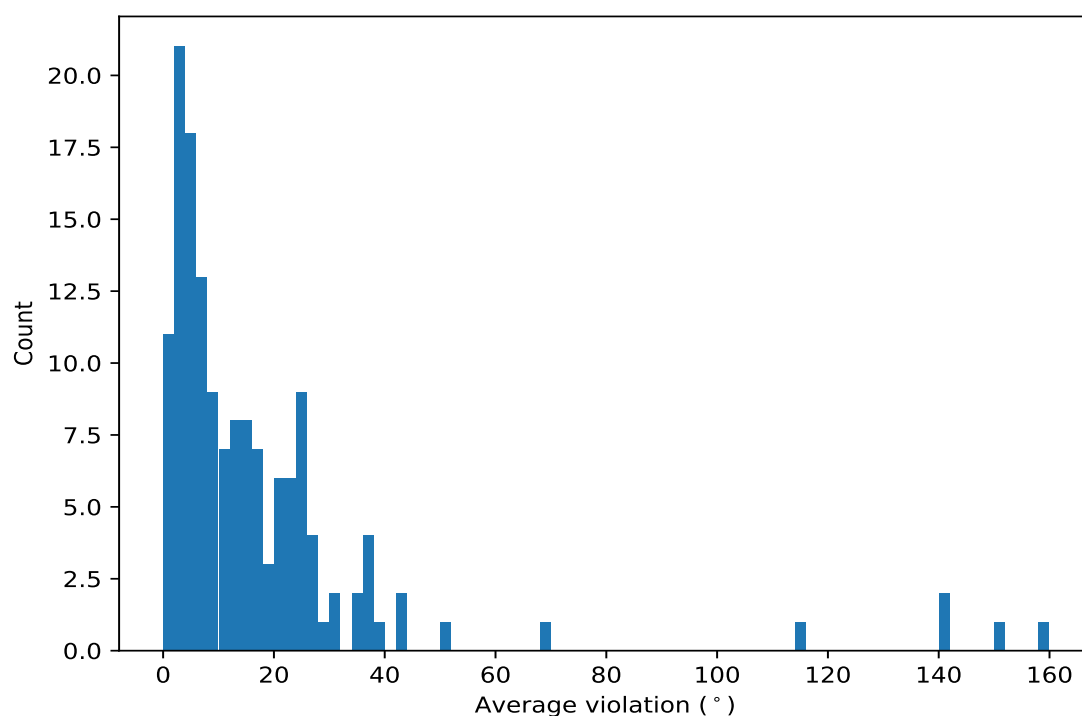
10.3.1 Bar graph : Dihedral-angle Violation statistics for the ensemble [i](#)



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

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

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



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

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

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,4)	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	1:4:A:THR:N	15	159.86	1.23	160.32
(2,2)	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	1:4:A:THR:N	15	151.11	1.23	151.57
(2,15)	1:26:A:GLY:C	1:27:A:GLY:N	1:27:A:GLY:CA	1:27:A:GLY:C	15	141.23	19.49	150.61
(2,107)	1:179:A:GLU:C	1:180:A:HIS:N	1:180:A:HIS:CA	1:180:A:HIS:C	15	115.38	3.62	113.19
(2,108)	1:180:A:HIS:N	1:180:A:HIS:CA	1:180:A:HIS:C	1:181:A:HIS:N	15	69.7	1.74	68.56
(2,16)	1:27:A:GLY:N	1:27:A:GLY:CA	1:27:A:GLY:C	1:28:A:GLY:N	15	51.15	22.53	62.97
(2,29)	1:40:A:ARG:C	1:41:A:LYS:N	1:41:A:LYS:CA	1:41:A:LYS:C	15	43.1	4.79	42.81
(1,2)	1:2:A:ASP:N	1:2:A:ASP:CA	1:2:A:ASP:C	1:3:A:THR:N	15	42.03	2.52	42.87
(2,65)	1:124:A:SER:C	1:125:A:TRP:N	1:125:A:TRP:CA	1:125:A:TRP:C	15	39.12	2.98	40.92
(1,65)	1:138:A:GLU:C	1:139:A:VAL:N	1:139:A:VAL:CA	1:139:A:VAL:C	15	36.52	3.16	35.31
(1,27)	1:48:A:THR:C	1:49:A:PHE:N	1:49:A:PHE:CA	1:49:A:PHE:C	15	36.38	3.39	35.65
(2,46)	1:69:A:MET:N	1:69:A:MET:CA	1:69:A:MET:C	1:70:A:GLU:N	15	36.23	0.83	36.33
(2,10)	1:15:A:ALA:N	1:15:A:ALA:CA	1:15:A:ALA:C	1:16:A:ALA:N	15	34.94	1.18	35.31
(1,3)	1:2:A:ASP:C	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	15	34.66	1.08	34.33
(2,61)	1:120:A:VAL:C	1:121:A:ARG:N	1:121:A:ARG:CA	1:121:A:ARG:C	15	30.76	8.38	33.72
(2,96)	1:171:A:PHE:N	1:171:A:PHE:CA	1:171:A:PHE:C	1:172:A:ARG:N	15	30.57	1.56	30.64
(2,1)	1:2:A:ASP:C	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	15	27.11	1.08	26.79
(1,1)	1:1:A:MET:C	1:2:A:ASP:N	1:2:A:ASP:CA	1:2:A:ASP:C	15	26.97	1.81	27.49
(2,83)	1:161:A:ALA:C	1:162:A:GLU:N	1:162:A:GLU:CA	1:162:A:GLU:C	15	26.25	0.89	26.63
(2,9)	1:14:A:ALA:C	1:15:A:ALA:N	1:15:A:ALA:CA	1:15:A:ALA:C	15	26.16	0.98	26.21
(2,26)	1:38:A:VAL:N	1:38:A:VAL:CA	1:38:A:VAL:C	1:39:A:THR:N	15	25.73	12.59	29.98

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(2,50)	1:77:A:LEU:N	1:77:A:LEU:CA	1:77:A:LEU:C	1:78:A:ALA:N	15	25.33	2.33	25.32
(1,70)	1:146:A:THR:N	1:146:A:THR:CA	1:146:A:THR:C	1:147:A:LYS:N	15	25.3	1.4	25.8
(2,14)	1:26:A:GLY:N	1:26:A:GLY:CA	1:26:A:GLY:C	1:27:A:GLY:N	15	25.11	9.55	22.96
(2,82)	1:159:A:LEU:N	1:159:A:LEU:CA	1:159:A:LEU:C	1:160:A:GLY:N	15	24.68	1.0	25.04
(2,20)	1:31:A:ILE:N	1:31:A:ILE:CA	1:31:A:ILE:C	1:32:A:ASP:N	15	24.54	1.91	25.34
(1,80)	1:159:A:LEU:N	1:159:A:LEU:CA	1:159:A:LEU:C	1:160:A:GLY:N	15	24.18	1.0	24.54
(1,92)	1:171:A:PHE:N	1:171:A:PHE:CA	1:171:A:PHE:C	1:172:A:ARG:N	15	24.15	1.56	24.23
(1,10)	1:11:A:LYS:N	1:11:A:LYS:CA	1:11:A:LYS:C	1:12:A:ILE:N	15	23.91	0.43	23.79
(1,20)	1:38:A:VAL:N	1:38:A:VAL:CA	1:38:A:VAL:C	1:39:A:THR:N	15	23.89	12.59	28.15
(1,69)	1:145:A:PRO:C	1:146:A:THR:N	1:146:A:THR:CA	1:146:A:THR:C	15	23.21	1.63	23.41
(2,67)	1:129:A:ILE:C	1:130:A:TRP:N	1:130:A:TRP:CA	1:130:A:TRP:C	15	23.1	2.29	23.34
(1,17)	1:33:A:ALA:C	1:34:A:ARG:N	1:34:A:ARG:CA	1:34:A:ARG:C	15	22.67	1.45	22.2
(1,21)	1:40:A:ARG:C	1:41:A:LYS:N	1:41:A:LYS:CA	1:41:A:LYS:C	15	22.41	4.79	22.12
(2,84)	1:162:A:GLU:N	1:162:A:GLU:CA	1:162:A:GLU:C	1:163:A:LYS:N	15	21.9	0.5	21.77
(2,21)	1:33:A:ALA:C	1:34:A:ARG:N	1:34:A:ARG:CA	1:34:A:ARG:C	15	21.23	1.45	20.76
(1,98)	1:177:A:ALA:N	1:177:A:ALA:CA	1:177:A:ALA:C	1:178:A:LEU:N	15	20.47	0.93	20.49
(2,66)	1:125:A:TRP:N	1:125:A:TRP:CA	1:125:A:TRP:C	1:126:A:GLU:N	15	20.37	1.63	20.92
(2,32)	1:42:A:HIS:N	1:42:A:HIS:CA	1:42:A:HIS:C	1:43:A:ASP:N	15	20.25	3.47	19.56
(2,4)	1:6:A:VAL:N	1:6:A:VAL:CA	1:6:A:VAL:C	1:7:A:THR:N	15	20.16	0.86	20.12
(2,24)	1:37:A:ARG:N	1:37:A:ARG:CA	1:37:A:ARG:C	1:38:A:VAL:N	15	18.64	2.88	18.33
(2,44)	1:59:A:ALA:N	1:59:A:ALA:CA	1:59:A:ALA:C	1:60:A:ILE:N	15	17.64	1.74	17.96
(2,95)	1:170:A:ALA:C	1:171:A:PHE:N	1:171:A:PHE:CA	1:171:A:PHE:C	15	17.55	1.4	17.4
(1,18)	1:34:A:ARG:N	1:34:A:ARG:CA	1:34:A:ARG:C	1:35:A:LEU:N	15	17.23	0.83	17.49
(2,111)	1:183:A:HIS:C	1:184:A:HIS:N	1:184:A:HIS:CA	1:184:A:HIS:C	15	17.01	3.68	16.98
(2,43)	1:58:A:GLU:C	1:59:A:ALA:N	1:59:A:ALA:CA	1:59:A:ALA:C	15	16.63	0.75	17.0
(1,34)	1:58:A:GLU:N	1:58:A:GLU:CA	1:58:A:GLU:C	1:59:A:ALA:N	15	16.47	1.43	16.44
(1,35)	1:71:A:GLU:C	1:72:A:LEU:N	1:72:A:LEU:CA	1:72:A:LEU:C	15	16.31	5.29	16.15
(1,66)	1:139:A:VAL:N	1:139:A:VAL:CA	1:139:A:VAL:C	1:140:A:PRO:N	15	15.94	4.35	13.11
(1,14)	1:19:A:ARG:N	1:19:A:ARG:CA	1:19:A:ARG:C	1:20:A:ASN:N	15	15.72	7.41	13.77
(1,9)	1:10:A:HIS:C	1:11:A:LYS:N	1:11:A:LYS:CA	1:11:A:LYS:C	15	15.02	1.29	14.93
(1,24)	1:42:A:HIS:N	1:42:A:HIS:CA	1:42:A:HIS:C	1:43:A:ASP:N	15	14.66	3.47	13.97
(1,36)	1:72:A:LEU:N	1:72:A:LEU:CA	1:72:A:LEU:C	1:73:A:ASP:N	15	14.5	2.86	15.12
(1,79)	1:158:A:SER:C	1:159:A:LEU:N	1:159:A:LEU:CA	1:159:A:LEU:C	15	14.41	2.52	13.12
(2,45)	1:68:A:VAL:C	1:69:A:MET:N	1:69:A:MET:CA	1:69:A:MET:C	15	14.2	1.33	14.6
(2,35)	1:47:A:LEU:C	1:48:A:THR:N	1:48:A:THR:CA	1:48:A:THR:C	15	13.89	6.69	16.09
(2,81)	1:158:A:SER:C	1:159:A:LEU:N	1:159:A:LEU:CA	1:159:A:LEU:C	15	13.48	2.52	12.19
(1,91)	1:170:A:ALA:C	1:171:A:PHE:N	1:171:A:PHE:CA	1:171:A:PHE:C	15	13.33	1.4	13.18
(2,37)	1:48:A:THR:C	1:49:A:PHE:N	1:49:A:PHE:CA	1:49:A:PHE:C	15	12.96	3.39	12.23
(2,8)	1:13:A:LEU:N	1:13:A:LEU:CA	1:13:A:LEU:C	1:14:A:ALA:N	15	12.94	3.02	13.86
(2,80)	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	1:156:A:CYS:N	15	12.26	1.15	12.67
(1,76)	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	1:156:A:CYS:N	15	12.0	1.15	12.4
(2,18)	1:29:A:TRP:N	1:29:A:TRP:CA	1:29:A:TRP:C	1:30:A:ALA:N	15	11.59	0.94	11.93
(1,16)	1:33:A:ALA:N	1:33:A:ALA:CA	1:33:A:ALA:C	1:34:A:ARG:N	15	10.69	1.1	10.98
(2,79)	1:154:A:LEU:C	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	15	10.69	0.55	10.6
(1,97)	1:176:A:ALA:C	1:177:A:ALA:N	1:177:A:ALA:CA	1:177:A:ALA:C	15	10.57	0.4	10.6
(1,8)	1:10:A:HIS:N	1:10:A:HIS:CA	1:10:A:HIS:C	1:11:A:LYS:N	15	10.18	0.74	10.33
(2,19)	1:30:A:ALA:C	1:31:A:ILE:N	1:31:A:ILE:CA	1:31:A:ILE:C	15	9.73	1.24	10.54
(1,82)	1:161:A:ALA:N	1:161:A:ALA:CA	1:161:A:ALA:C	1:162:A:GLU:N	15	9.35	1.44	9.8
(2,30)	1:41:A:LYS:N	1:41:A:LYS:CA	1:41:A:LYS:C	1:42:A:HIS:N	15	9.08	3.63	8.96
(1,33)	1:57:A:LEU:C	1:58:A:GLU:N	1:58:A:GLU:CA	1:58:A:GLU:C	15	9.03	0.5	9.02
(1,74)	1:154:A:LEU:N	1:154:A:LEU:CA	1:154:A:LEU:C	1:155:A:ALA:N	15	8.92	0.81	8.89

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(2,94)	1:170:A:ALA:N	1:170:A:ALA:CA	1:170:A:ALA:C	1:171:A:PHE:N	15	8.71	1.64	8.61
(1,52)	1:119:A:PRO:N	1:119:A:PRO:CA	1:119:A:PRO:C	1:120:A:VAL:N	15	8.61	1.58	8.36
(1,75)	1:154:A:LEU:C	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	15	7.58	0.55	7.48
(1,100)	1:180:A:HIS:N	1:180:A:HIS:CA	1:180:A:HIS:C	1:181:A:HIS:N	15	7.39	1.74	6.25
(2,90)	1:168:A:ARG:N	1:168:A:ARG:CA	1:168:A:ARG:C	1:169:A:ALA:N	15	7.08	0.82	6.97
(1,43)	1:105:A:GLY:C	1:106:A:SER:N	1:106:A:SER:CA	1:106:A:SER:C	15	6.72	1.19	6.79
(1,6)	1:9:A:ILE:N	1:9:A:ILE:CA	1:9:A:ILE:C	1:10:A:HIS:N	15	6.6	0.43	6.66
(1,88)	1:169:A:ALA:N	1:169:A:ALA:CA	1:169:A:ALA:C	1:170:A:ALA:N	15	5.21	0.53	5.29
(2,22)	1:34:A:ARG:N	1:34:A:ARG:CA	1:34:A:ARG:C	1:35:A:LEU:N	15	5.12	0.83	5.38
(1,72)	1:153:A:ARG:N	1:153:A:ARG:CA	1:153:A:ARG:C	1:154:A:LEU:N	15	4.98	0.69	5.0
(1,90)	1:170:A:ALA:N	1:170:A:ALA:CA	1:170:A:ALA:C	1:171:A:PHE:N	15	4.67	1.64	4.57
(2,77)	1:153:A:ARG:C	1:154:A:LEU:N	1:154:A:LEU:CA	1:154:A:LEU:C	15	4.07	0.41	4.07
(1,94)	1:173:A:SER:N	1:173:A:SER:CA	1:173:A:SER:C	1:174:A:ARG:N	15	3.12	0.56	3.17
(2,86)	1:166:A:VAL:N	1:166:A:VAL:CA	1:166:A:VAL:C	1:167:A:LEU:N	15	2.13	0.32	2.06
(1,86)	1:167:A:LEU:N	1:167:A:LEU:CA	1:167:A:LEU:C	1:168:A:ARG:N	15	1.74	0.44	1.68
(1,39)	1:81:A:GLY:C	1:82:A:ASP:N	1:82:A:ASP:CA	1:82:A:ASP:C	14	18.2	10.08	23.16
(2,12)	1:19:A:ARG:N	1:19:A:ARG:CA	1:19:A:ARG:C	1:20:A:ASN:N	14	12.57	6.61	9.63
(1,46)	1:108:A:PRO:N	1:108:A:PRO:CA	1:108:A:PRO:C	1:109:A:GLU:N	14	5.63	2.19	5.2
(2,68)	1:130:A:TRP:N	1:130:A:TRP:CA	1:130:A:TRP:C	1:131:A:ASP:N	14	3.08	1.19	3.22
(2,112)	1:184:A:HIS:N	1:184:A:HIS:CA	1:184:A:HIS:C	1:185:A:HIS:N	12	140.11	52.92	163.14
(2,13)	1:25:A:ILE:C	1:26:A:GLY:N	1:26:A:GLY:CA	1:26:A:GLY:C	12	10.52	5.37	10.01
(2,64)	1:122:A:CYS:N	1:122:A:CYS:CA	1:122:A:CYS:C	1:123:A:ASN:N	12	9.56	4.81	10.77
(1,47)	1:108:A:PRO:C	1:109:A:GLU:N	1:109:A:GLU:CA	1:109:A:GLU:C	12	6.26	2.56	6.12
(1,42)	1:89:A:PRO:N	1:89:A:PRO:CA	1:89:A:PRO:C	1:90:A:ALA:N	12	5.66	3.17	4.04
(2,54)	1:104:A:GLN:N	1:104:A:GLN:CA	1:104:A:GLN:C	1:105:A:GLY:N	12	5.44	2.7	4.64
(1,61)	1:136:A:ALA:C	1:137:A:ASP:N	1:137:A:ASP:CA	1:137:A:ASP:C	12	3.82	1.29	3.91
(1,30)	1:56:A:GLU:N	1:56:A:GLU:CA	1:56:A:GLU:C	1:57:A:LEU:N	12	2.9	1.0	3.34
(1,102)	1:182:A:HIS:N	1:182:A:HIS:CA	1:182:A:HIS:C	1:183:A:HIS:N	12	2.84	1.22	2.36
(2,56)	1:105:A:GLY:N	1:105:A:GLY:CA	1:105:A:GLY:C	1:106:A:SER:N	11	10.23	4.48	8.66
(1,26)	1:48:A:THR:N	1:48:A:THR:CA	1:48:A:THR:C	1:49:A:PHE:N	11	7.41	3.6	6.95
(1,44)	1:106:A:SER:N	1:106:A:SER:CA	1:106:A:SER:C	1:107:A:CYS:N	11	6.33	3.26	5.28
(1,58)	1:129:A:ILE:N	1:129:A:ILE:CA	1:129:A:ILE:C	1:130:A:TRP:N	11	3.35	1.18	3.52
(1,32)	1:57:A:LEU:N	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:C	1:58:A:GLU:N	11	2.41	0.68	2.4
(1,40)	1:82:A:ASP:N	1:82:A:ASP:CA	1:82:A:ASP:C	1:83:A:GLU:N	10	36.61	3.94	36.44
(2,52)	1:82:A:ASP:N	1:82:A:ASP:CA	1:82:A:ASP:C	1:83:A:GLU:N	10	25.25	3.94	25.08
(2,51)	1:81:A:GLY:C	1:82:A:ASP:N	1:82:A:ASP:CA	1:82:A:ASP:C	10	14.08	2.15	13.62
(1,25)	1:47:A:LEU:C	1:48:A:THR:N	1:48:A:THR:CA	1:48:A:THR:C	10	7.81	2.38	7.98
(1,54)	1:121:A:ARG:N	1:121:A:ARG:CA	1:121:A:ARG:C	1:122:A:CYS:N	10	7.81	2.93	7.18
(2,60)	1:120:A:VAL:N	1:120:A:VAL:CA	1:120:A:VAL:C	1:121:A:ARG:N	10	6.59	2.17	6.77
(2,33)	1:46:A:ASP:C	1:47:A:LEU:N	1:47:A:LEU:CA	1:47:A:LEU:C	10	6.17	1.0	6.34
(2,59)	1:119:A:PRO:C	1:120:A:VAL:N	1:120:A:VAL:CA	1:120:A:VAL:C	10	5.16	1.26	5.39
(1,78)	1:158:A:SER:N	1:158:A:SER:CA	1:158:A:SER:C	1:159:A:LEU:N	10	4.99	0.61	4.83
(1,12)	1:13:A:LEU:N	1:13:A:LEU:CA	1:13:A:LEU:C	1:14:A:ALA:N	10	4.36	1.2	4.4
(1,99)	1:179:A:GLU:C	1:180:A:HIS:N	1:180:A:HIS:CA	1:180:A:HIS:C	10	4.2	0.48	4.2
(2,47)	1:75:A:GLY:C	1:76:A:PHE:N	1:76:A:PHE:CA	1:76:A:PHE:C	10	3.65	1.61	3.72
(1,11)	1:12:A:ILE:C	1:13:A:LEU:N	1:13:A:LEU:CA	1:13:A:LEU:C	10	3.55	0.79	3.43
(1,81)	1:160:A:GLY:C	1:161:A:ALA:N	1:161:A:ALA:CA	1:161:A:ALA:C	9	4.13	2.73	5.53
(2,48)	1:76:A:PHE:N	1:76:A:PHE:CA	1:76:A:PHE:C	1:77:A:LEU:N	9	3.93	1.54	3.27
(1,63)	1:137:A:ASP:C	1:138:A:GLU:N	1:138:A:GLU:CA	1:138:A:GLU:C	9	3.56	1.55	3.2
(1,38)	1:76:A:PHE:N	1:76:A:PHE:CA	1:76:A:PHE:C	1:77:A:LEU:N	9	2.83	1.49	2.13
(2,41)	1:57:A:LEU:C	1:58:A:GLU:N	1:58:A:GLU:CA	1:58:A:GLU:C	9	1.63	0.34	1.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

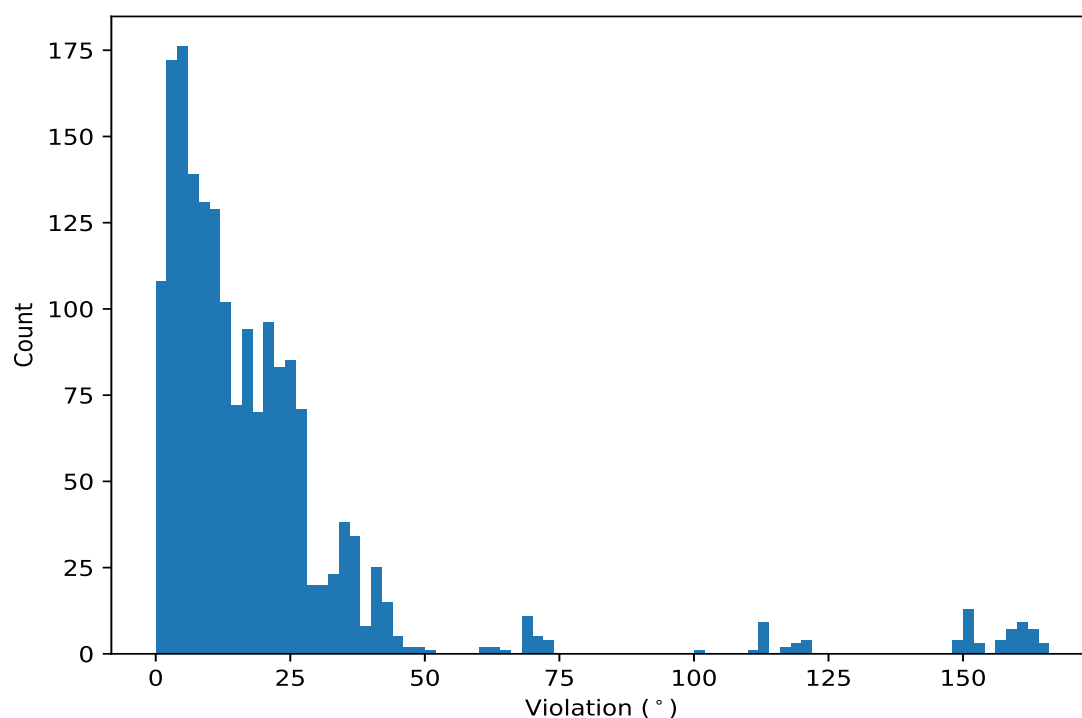
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(2,36)	1:48:A:THR:N	1:48:A:THR:CA	1:48:A:THR:C	1:49:A:PHE:N	8	5.18	2.35	5.44
(1,60)	1:132:A:TYR:N	1:132:A:TYR:CA	1:132:A:TYR:C	1:133:A:PHE:N	8	3.68	1.72	2.87
(1,37)	1:75:A:GLY:C	1:76:A:PHE:N	1:76:A:PHE:CA	1:76:A:PHE:C	8	2.6	1.54	2.21
(2,74)	1:138:A:GLU:N	1:138:A:GLU:CA	1:138:A:GLU:C	1:139:A:VAL:N	7	5.64	3.07	6.92
(1,93)	1:172:A:ARG:C	1:173:A:SER:N	1:173:A:SER:CA	1:173:A:SER:C	7	1.32	0.17	1.23
(1,64)	1:138:A:GLU:N	1:138:A:GLU:CA	1:138:A:GLU:C	1:139:A:VAL:N	6	6.08	2.61	7.08
(2,57)	1:112:A:GLU:C	1:113:A:GLY:N	1:113:A:GLY:CA	1:113:A:GLY:C	5	29.18	2.79	29.78
(1,49)	1:112:A:GLU:C	1:113:A:GLY:N	1:113:A:GLY:CA	1:113:A:GLY:C	5	19.0	2.79	19.6
(1,19)	1:37:A:ARG:C	1:38:A:VAL:N	1:38:A:VAL:CA	1:38:A:VAL:C	5	8.76	1.61	8.9
(1,41)	1:88:A:GLU:C	1:89:A:PRO:N	1:89:A:PRO:CA	1:89:A:PRO:C	5	4.78	0.78	4.47
(2,34)	1:47:A:LEU:N	1:47:A:LEU:CA	1:47:A:LEU:C	1:48:A:THR:N	5	4.77	1.79	5.11
(2,58)	1:113:A:GLY:N	1:113:A:GLY:CA	1:113:A:GLY:C	1:114:A:VAL:N	5	3.72	1.37	4.0
(2,104)	1:178:A:LEU:N	1:178:A:LEU:CA	1:178:A:LEU:C	1:179:A:GLU:N	5	1.53	0.44	1.39
(1,7)	1:9:A:ILE:C	1:10:A:HIS:N	1:10:A:HIS:CA	1:10:A:HIS:C	5	1.35	0.19	1.31
(2,69)	1:131:A:ASP:C	1:132:A:TYR:N	1:132:A:TYR:CA	1:132:A:TYR:C	4	2.18	0.75	2.24
(2,110)	1:182:A:HIS:N	1:182:A:HIS:CA	1:182:A:HIS:C	1:183:A:HIS:N	3	1.93	0.74	1.63
(2,98)	1:174:A:ARG:N	1:174:A:ARG:CA	1:174:A:ARG:C	1:175:A:TYR:N	3	1.61	0.21	1.58
(1,85)	1:166:A:VAL:C	1:167:A:LEU:N	1:167:A:LEU:CA	1:167:A:LEU:C	3	1.21	0.21	1.09
(2,62)	1:121:A:ARG:N	1:121:A:ARG:CA	1:121:A:ARG:C	1:122:A:CYS:N	2	4.16	0.94	4.16
(2,72)	1:137:A:ASP:N	1:137:A:ASP:CA	1:137:A:ASP:C	1:138:A:GLU:N	2	3.35	0.3	3.35
(1,22)	1:41:A:LYS:N	1:41:A:LYS:CA	1:41:A:LYS:C	1:42:A:HIS:N	2	3.27	0.5	3.27
(1,62)	1:137:A:ASP:N	1:137:A:ASP:CA	1:137:A:ASP:C	1:138:A:GLU:N	2	2.26	0.3	2.26
(2,70)	1:132:A:TYR:N	1:132:A:TYR:CA	1:132:A:TYR:C	1:133:A:PHE:N	2	2.04	0.3	2.04
(2,105)	1:178:A:LEU:C	1:179:A:GLU:N	1:179:A:GLU:CA	1:179:A:GLU:C	2	1.42	0.21	1.42
(2,3)	1:5:A:GLN:C	1:6:A:VAL:N	1:6:A:VAL:CA	1:6:A:VAL:C	2	1.25	0.08	1.25
(1,56)	1:127:A:ALA:N	1:127:A:ALA:CA	1:127:A:ALA:C	1:128:A:ILE:N	2	1.24	0.16	1.24

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

10.5 All violated dihedral-angle restraints ⓘ

10.5.1 Histogram : Distribution of violations ⓘ

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



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

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

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(2,112)	1:184:A:HIS:N	1:184:A:HIS:CA	1:184:A:HIS:C	1:185:A:HIS:N	4	165.19
(2,112)	1:184:A:HIS:N	1:184:A:HIS:CA	1:184:A:HIS:C	1:185:A:HIS:N	3	164.41
(2,112)	1:184:A:HIS:N	1:184:A:HIS:CA	1:184:A:HIS:C	1:185:A:HIS:N	5	164.01
(2,112)	1:184:A:HIS:N	1:184:A:HIS:CA	1:184:A:HIS:C	1:185:A:HIS:N	1	163.84
(2,112)	1:184:A:HIS:N	1:184:A:HIS:CA	1:184:A:HIS:C	1:185:A:HIS:N	8	163.25
(2,112)	1:184:A:HIS:N	1:184:A:HIS:CA	1:184:A:HIS:C	1:185:A:HIS:N	10	163.19
(2,112)	1:184:A:HIS:N	1:184:A:HIS:CA	1:184:A:HIS:C	1:185:A:HIS:N	7	163.09
(2,112)	1:184:A:HIS:N	1:184:A:HIS:CA	1:184:A:HIS:C	1:185:A:HIS:N	9	162.81
(2,112)	1:184:A:HIS:N	1:184:A:HIS:CA	1:184:A:HIS:C	1:185:A:HIS:N	6	162.62
(2,112)	1:184:A:HIS:N	1:184:A:HIS:CA	1:184:A:HIS:C	1:185:A:HIS:N	2	162.27
(1,4)	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	1:4:A:THR:N	9	161.45
(1,4)	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	1:4:A:THR:N	10	161.43
(1,4)	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	1:4:A:THR:N	6	161.03
(1,4)	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	1:4:A:THR:N	8	160.71
(1,4)	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	1:4:A:THR:N	4	160.43
(1,4)	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	1:4:A:THR:N	7	160.4
(1,4)	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	1:4:A:THR:N	3	160.33
(1,4)	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	1:4:A:THR:N	15	160.32
(1,4)	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	1:4:A:THR:N	2	160.02
(1,4)	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	1:4:A:THR:N	5	159.96
(2,15)	1:26:A:GLY:C	1:27:A:GLY:N	1:27:A:GLY:CA	1:27:A:GLY:C	1	159.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,4)	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	1:4:A:THR:N	1	159.33
(2,15)	1:26:A:GLY:C	1:27:A:GLY:N	1:27:A:GLY:CA	1:27:A:GLY:C	3	159.1
(1,4)	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	1:4:A:THR:N	13	159.07
(1,4)	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	1:4:A:THR:N	11	158.57
(2,15)	1:26:A:GLY:C	1:27:A:GLY:N	1:27:A:GLY:CA	1:27:A:GLY:C	5	158.32
(2,15)	1:26:A:GLY:C	1:27:A:GLY:N	1:27:A:GLY:CA	1:27:A:GLY:C	2	157.65
(1,4)	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	1:4:A:THR:N	12	157.53
(2,15)	1:26:A:GLY:C	1:27:A:GLY:N	1:27:A:GLY:CA	1:27:A:GLY:C	4	157.45
(1,4)	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	1:4:A:THR:N	14	157.28
(2,2)	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	1:4:A:THR:N	9	152.7
(2,2)	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	1:4:A:THR:N	10	152.69
(2,2)	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	1:4:A:THR:N	6	152.28
(2,2)	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	1:4:A:THR:N	8	151.97
(2,2)	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	1:4:A:THR:N	4	151.68
(2,2)	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	1:4:A:THR:N	7	151.66
(2,2)	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	1:4:A:THR:N	3	151.59
(2,2)	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	1:4:A:THR:N	15	151.57
(2,15)	1:26:A:GLY:C	1:27:A:GLY:N	1:27:A:GLY:CA	1:27:A:GLY:C	7	151.37
(2,2)	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	1:4:A:THR:N	2	151.27
(2,15)	1:26:A:GLY:C	1:27:A:GLY:N	1:27:A:GLY:CA	1:27:A:GLY:C	6	151.23
(2,2)	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	1:4:A:THR:N	5	151.21
(2,15)	1:26:A:GLY:C	1:27:A:GLY:N	1:27:A:GLY:CA	1:27:A:GLY:C	8	150.61
(2,2)	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	1:4:A:THR:N	1	150.59
(2,2)	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	1:4:A:THR:N	13	150.33
(2,15)	1:26:A:GLY:C	1:27:A:GLY:N	1:27:A:GLY:CA	1:27:A:GLY:C	10	150.03
(2,15)	1:26:A:GLY:C	1:27:A:GLY:N	1:27:A:GLY:CA	1:27:A:GLY:C	9	149.83
(2,2)	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	1:4:A:THR:N	11	149.83
(2,2)	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	1:4:A:THR:N	12	148.78
(2,2)	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	1:4:A:THR:N	14	148.54
(2,107)	1:179:A:GLU:C	1:180:A:HIS:N	1:180:A:HIS:CA	1:180:A:HIS:C	11	120.99
(2,107)	1:179:A:GLU:C	1:180:A:HIS:N	1:180:A:HIS:CA	1:180:A:HIS:C	15	120.79
(2,107)	1:179:A:GLU:C	1:180:A:HIS:N	1:180:A:HIS:CA	1:180:A:HIS:C	13	120.69
(2,107)	1:179:A:GLU:C	1:180:A:HIS:N	1:180:A:HIS:CA	1:180:A:HIS:C	14	120.65
(2,15)	1:26:A:GLY:C	1:27:A:GLY:N	1:27:A:GLY:CA	1:27:A:GLY:C	15	119.67
(2,107)	1:179:A:GLU:C	1:180:A:HIS:N	1:180:A:HIS:CA	1:180:A:HIS:C	12	119.0
(2,15)	1:26:A:GLY:C	1:27:A:GLY:N	1:27:A:GLY:CA	1:27:A:GLY:C	12	118.96
(2,15)	1:26:A:GLY:C	1:27:A:GLY:N	1:27:A:GLY:CA	1:27:A:GLY:C	14	117.29
(2,15)	1:26:A:GLY:C	1:27:A:GLY:N	1:27:A:GLY:CA	1:27:A:GLY:C	13	116.66
(2,107)	1:179:A:GLU:C	1:180:A:HIS:N	1:180:A:HIS:CA	1:180:A:HIS:C	5	113.68
(2,107)	1:179:A:GLU:C	1:180:A:HIS:N	1:180:A:HIS:CA	1:180:A:HIS:C	1	113.42
(2,107)	1:179:A:GLU:C	1:180:A:HIS:N	1:180:A:HIS:CA	1:180:A:HIS:C	10	113.19
(2,107)	1:179:A:GLU:C	1:180:A:HIS:N	1:180:A:HIS:CA	1:180:A:HIS:C	6	112.92
(2,107)	1:179:A:GLU:C	1:180:A:HIS:N	1:180:A:HIS:CA	1:180:A:HIS:C	9	112.86
(2,107)	1:179:A:GLU:C	1:180:A:HIS:N	1:180:A:HIS:CA	1:180:A:HIS:C	3	112.84
(2,107)	1:179:A:GLU:C	1:180:A:HIS:N	1:180:A:HIS:CA	1:180:A:HIS:C	4	112.65
(2,107)	1:179:A:GLU:C	1:180:A:HIS:N	1:180:A:HIS:CA	1:180:A:HIS:C	7	112.63
(2,107)	1:179:A:GLU:C	1:180:A:HIS:N	1:180:A:HIS:CA	1:180:A:HIS:C	2	112.38
(2,107)	1:179:A:GLU:C	1:180:A:HIS:N	1:180:A:HIS:CA	1:180:A:HIS:C	8	111.94
(2,15)	1:26:A:GLY:C	1:27:A:GLY:N	1:27:A:GLY:CA	1:27:A:GLY:C	11	100.76
(2,108)	1:180:A:HIS:N	1:180:A:HIS:CA	1:180:A:HIS:C	1:181:A:HIS:N	15	73.27
(2,16)	1:27:A:GLY:N	1:27:A:GLY:CA	1:27:A:GLY:C	1:28:A:GLY:N	9	72.78

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(2,108)	1:180:A:HIS:N	1:180:A:HIS:CA	1:180:A:HIS:C	1:181:A:HIS:N	12	72.66
(2,16)	1:27:A:GLY:N	1:27:A:GLY:CA	1:27:A:GLY:C	1:28:A:GLY:N	10	72.26
(2,108)	1:180:A:HIS:N	1:180:A:HIS:CA	1:180:A:HIS:C	1:181:A:HIS:N	11	71.88
(2,108)	1:180:A:HIS:N	1:180:A:HIS:CA	1:180:A:HIS:C	1:181:A:HIS:N	14	71.54
(2,108)	1:180:A:HIS:N	1:180:A:HIS:CA	1:180:A:HIS:C	1:181:A:HIS:N	13	71.01
(2,16)	1:27:A:GLY:N	1:27:A:GLY:CA	1:27:A:GLY:C	1:28:A:GLY:N	8	70.99
(2,16)	1:27:A:GLY:N	1:27:A:GLY:CA	1:27:A:GLY:C	1:28:A:GLY:N	6	70.55
(2,16)	1:27:A:GLY:N	1:27:A:GLY:CA	1:27:A:GLY:C	1:28:A:GLY:N	7	69.58
(2,108)	1:180:A:HIS:N	1:180:A:HIS:CA	1:180:A:HIS:C	1:181:A:HIS:N	5	68.84
(2,108)	1:180:A:HIS:N	1:180:A:HIS:CA	1:180:A:HIS:C	1:181:A:HIS:N	1	68.65
(2,108)	1:180:A:HIS:N	1:180:A:HIS:CA	1:180:A:HIS:C	1:181:A:HIS:N	7	68.56
(2,108)	1:180:A:HIS:N	1:180:A:HIS:CA	1:180:A:HIS:C	1:181:A:HIS:N	4	68.52
(2,108)	1:180:A:HIS:N	1:180:A:HIS:CA	1:180:A:HIS:C	1:181:A:HIS:N	9	68.51
(2,108)	1:180:A:HIS:N	1:180:A:HIS:CA	1:180:A:HIS:C	1:181:A:HIS:N	6	68.5
(2,108)	1:180:A:HIS:N	1:180:A:HIS:CA	1:180:A:HIS:C	1:181:A:HIS:N	3	68.47
(2,108)	1:180:A:HIS:N	1:180:A:HIS:CA	1:180:A:HIS:C	1:181:A:HIS:N	10	68.45
(2,108)	1:180:A:HIS:N	1:180:A:HIS:CA	1:180:A:HIS:C	1:181:A:HIS:N	8	68.33
(2,108)	1:180:A:HIS:N	1:180:A:HIS:CA	1:180:A:HIS:C	1:181:A:HIS:N	2	68.31
(2,16)	1:27:A:GLY:N	1:27:A:GLY:CA	1:27:A:GLY:C	1:28:A:GLY:N	4	64.18
(2,16)	1:27:A:GLY:N	1:27:A:GLY:CA	1:27:A:GLY:C	1:28:A:GLY:N	5	63.07
(2,16)	1:27:A:GLY:N	1:27:A:GLY:CA	1:27:A:GLY:C	1:28:A:GLY:N	2	62.97
(2,16)	1:27:A:GLY:N	1:27:A:GLY:CA	1:27:A:GLY:C	1:28:A:GLY:N	1	61.12
(2,16)	1:27:A:GLY:N	1:27:A:GLY:CA	1:27:A:GLY:C	1:28:A:GLY:N	3	60.73
(2,29)	1:40:A:ARG:C	1:41:A:LYS:N	1:41:A:LYS:CA	1:41:A:LYS:C	14	50.78
(2,29)	1:40:A:ARG:C	1:41:A:LYS:N	1:41:A:LYS:CA	1:41:A:LYS:C	11	49.72
(2,29)	1:40:A:ARG:C	1:41:A:LYS:N	1:41:A:LYS:CA	1:41:A:LYS:C	15	48.99
(2,29)	1:40:A:ARG:C	1:41:A:LYS:N	1:41:A:LYS:CA	1:41:A:LYS:C	13	47.4
(2,29)	1:40:A:ARG:C	1:41:A:LYS:N	1:41:A:LYS:CA	1:41:A:LYS:C	12	47.19
(1,2)	1:2:A:ASP:N	1:2:A:ASP:CA	1:2:A:ASP:C	1:3:A:THR:N	1	45.98
(2,29)	1:40:A:ARG:C	1:41:A:LYS:N	1:41:A:LYS:CA	1:41:A:LYS:C	9	44.76
(1,2)	1:2:A:ASP:N	1:2:A:ASP:CA	1:2:A:ASP:C	1:3:A:THR:N	11	44.62
(2,26)	1:38:A:VAL:N	1:38:A:VAL:CA	1:38:A:VAL:C	1:39:A:THR:N	1	44.18
(2,112)	1:184:A:HIS:N	1:184:A:HIS:CA	1:184:A:HIS:C	1:185:A:HIS:N	13	44.1
(1,2)	1:2:A:ASP:N	1:2:A:ASP:CA	1:2:A:ASP:C	1:3:A:THR:N	5	43.97
(1,2)	1:2:A:ASP:N	1:2:A:ASP:CA	1:2:A:ASP:C	1:3:A:THR:N	4	43.9
(2,26)	1:38:A:VAL:N	1:38:A:VAL:CA	1:38:A:VAL:C	1:39:A:THR:N	5	43.57
(1,2)	1:2:A:ASP:N	1:2:A:ASP:CA	1:2:A:ASP:C	1:3:A:THR:N	13	43.48
(2,29)	1:40:A:ARG:C	1:41:A:LYS:N	1:41:A:LYS:CA	1:41:A:LYS:C	10	43.44
(1,2)	1:2:A:ASP:N	1:2:A:ASP:CA	1:2:A:ASP:C	1:3:A:THR:N	7	43.19
(1,2)	1:2:A:ASP:N	1:2:A:ASP:CA	1:2:A:ASP:C	1:3:A:THR:N	3	43.14
(2,26)	1:38:A:VAL:N	1:38:A:VAL:CA	1:38:A:VAL:C	1:39:A:THR:N	4	42.88
(1,2)	1:2:A:ASP:N	1:2:A:ASP:CA	1:2:A:ASP:C	1:3:A:THR:N	2	42.87
(2,29)	1:40:A:ARG:C	1:41:A:LYS:N	1:41:A:LYS:CA	1:41:A:LYS:C	6	42.81
(1,65)	1:138:A:GLU:C	1:139:A:VAL:N	1:139:A:VAL:CA	1:139:A:VAL:C	15	42.6
(1,40)	1:82:A:ASP:N	1:82:A:ASP:CA	1:82:A:ASP:C	1:83:A:GLU:N	6	42.41
(1,20)	1:38:A:VAL:N	1:38:A:VAL:CA	1:38:A:VAL:C	1:39:A:THR:N	1	42.34
(1,2)	1:2:A:ASP:N	1:2:A:ASP:CA	1:2:A:ASP:C	1:3:A:THR:N	15	42.07
(1,40)	1:82:A:ASP:N	1:82:A:ASP:CA	1:82:A:ASP:C	1:83:A:GLU:N	5	42.0
(1,65)	1:138:A:GLU:C	1:139:A:VAL:N	1:139:A:VAL:CA	1:139:A:VAL:C	12	41.97
(1,2)	1:2:A:ASP:N	1:2:A:ASP:CA	1:2:A:ASP:C	1:3:A:THR:N	14	41.81
(2,65)	1:124:A:SER:C	1:125:A:TRP:N	1:125:A:TRP:CA	1:125:A:TRP:C	1	41.74

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(2,29)	1:40:A:ARG:C	1:41:A:LYS:N	1:41:A:LYS:CA	1:41:A:LYS:C	8	41.73
(1,20)	1:38:A:VAL:N	1:38:A:VAL:CA	1:38:A:VAL:C	1:39:A:THR:N	5	41.73
(2,61)	1:120:A:VAL:C	1:121:A:ARG:N	1:121:A:ARG:CA	1:121:A:ARG:C	2	41.72
(1,27)	1:48:A:THR:C	1:49:A:PHE:N	1:49:A:PHE:CA	1:49:A:PHE:C	12	41.61
(2,65)	1:124:A:SER:C	1:125:A:TRP:N	1:125:A:TRP:CA	1:125:A:TRP:C	8	41.53
(2,29)	1:40:A:ARG:C	1:41:A:LYS:N	1:41:A:LYS:CA	1:41:A:LYS:C	7	41.42
(2,65)	1:124:A:SER:C	1:125:A:TRP:N	1:125:A:TRP:CA	1:125:A:TRP:C	9	41.41
(2,65)	1:124:A:SER:C	1:125:A:TRP:N	1:125:A:TRP:CA	1:125:A:TRP:C	2	41.37
(1,2)	1:2:A:ASP:N	1:2:A:ASP:CA	1:2:A:ASP:C	1:3:A:THR:N	8	41.35
(1,27)	1:48:A:THR:C	1:49:A:PHE:N	1:49:A:PHE:CA	1:49:A:PHE:C	11	41.25
(2,65)	1:124:A:SER:C	1:125:A:TRP:N	1:125:A:TRP:CA	1:125:A:TRP:C	7	41.22
(2,65)	1:124:A:SER:C	1:125:A:TRP:N	1:125:A:TRP:CA	1:125:A:TRP:C	10	41.17
(1,2)	1:2:A:ASP:N	1:2:A:ASP:CA	1:2:A:ASP:C	1:3:A:THR:N	12	41.17
(1,27)	1:48:A:THR:C	1:49:A:PHE:N	1:49:A:PHE:CA	1:49:A:PHE:C	13	41.12
(1,20)	1:38:A:VAL:N	1:38:A:VAL:CA	1:38:A:VAL:C	1:39:A:THR:N	4	41.04
(2,65)	1:124:A:SER:C	1:125:A:TRP:N	1:125:A:TRP:CA	1:125:A:TRP:C	4	41.01
(2,65)	1:124:A:SER:C	1:125:A:TRP:N	1:125:A:TRP:CA	1:125:A:TRP:C	6	40.92
(2,65)	1:124:A:SER:C	1:125:A:TRP:N	1:125:A:TRP:CA	1:125:A:TRP:C	3	40.78
(1,40)	1:82:A:ASP:N	1:82:A:ASP:CA	1:82:A:ASP:C	1:83:A:GLU:N	1	40.77
(2,65)	1:124:A:SER:C	1:125:A:TRP:N	1:125:A:TRP:CA	1:125:A:TRP:C	5	40.75
(1,65)	1:138:A:GLU:C	1:139:A:VAL:N	1:139:A:VAL:CA	1:139:A:VAL:C	14	40.68
(2,29)	1:40:A:ARG:C	1:41:A:LYS:N	1:41:A:LYS:CA	1:41:A:LYS:C	2	40.43
(1,65)	1:138:A:GLU:C	1:139:A:VAL:N	1:139:A:VAL:CA	1:139:A:VAL:C	13	39.57
(1,27)	1:48:A:THR:C	1:49:A:PHE:N	1:49:A:PHE:CA	1:49:A:PHE:C	14	39.23
(2,29)	1:40:A:ARG:C	1:41:A:LYS:N	1:41:A:LYS:CA	1:41:A:LYS:C	4	38.97
(1,27)	1:48:A:THR:C	1:49:A:PHE:N	1:49:A:PHE:CA	1:49:A:PHE:C	9	38.66
(2,61)	1:120:A:VAL:C	1:121:A:ARG:N	1:121:A:ARG:CA	1:121:A:ARG:C	3	38.54
(2,61)	1:120:A:VAL:C	1:121:A:ARG:N	1:121:A:ARG:CA	1:121:A:ARG:C	7	38.52
(2,46)	1:69:A:MET:N	1:69:A:MET:CA	1:69:A:MET:C	1:70:A:GLU:N	14	38.37
(2,14)	1:26:A:GLY:N	1:26:A:GLY:CA	1:26:A:GLY:C	1:27:A:GLY:N	1	38.2
(1,40)	1:82:A:ASP:N	1:82:A:ASP:CA	1:82:A:ASP:C	1:83:A:GLU:N	8	37.93
(1,40)	1:82:A:ASP:N	1:82:A:ASP:CA	1:82:A:ASP:C	1:83:A:GLU:N	9	37.91
(1,2)	1:2:A:ASP:N	1:2:A:ASP:CA	1:2:A:ASP:C	1:3:A:THR:N	10	37.88
(1,2)	1:2:A:ASP:N	1:2:A:ASP:CA	1:2:A:ASP:C	1:3:A:THR:N	6	37.74
(2,14)	1:26:A:GLY:N	1:26:A:GLY:CA	1:26:A:GLY:C	1:27:A:GLY:N	3	37.69
(2,61)	1:120:A:VAL:C	1:121:A:ARG:N	1:121:A:ARG:CA	1:121:A:ARG:C	1	37.51
(1,27)	1:48:A:THR:C	1:49:A:PHE:N	1:49:A:PHE:CA	1:49:A:PHE:C	6	37.44
(1,2)	1:2:A:ASP:N	1:2:A:ASP:CA	1:2:A:ASP:C	1:3:A:THR:N	9	37.22
(1,27)	1:48:A:THR:C	1:49:A:PHE:N	1:49:A:PHE:CA	1:49:A:PHE:C	15	37.15
(2,14)	1:26:A:GLY:N	1:26:A:GLY:CA	1:26:A:GLY:C	1:27:A:GLY:N	4	37.12
(2,46)	1:69:A:MET:N	1:69:A:MET:CA	1:69:A:MET:C	1:70:A:GLU:N	13	37.03
(2,46)	1:69:A:MET:N	1:69:A:MET:CA	1:69:A:MET:C	1:70:A:GLU:N	10	37.02
(1,65)	1:138:A:GLU:C	1:139:A:VAL:N	1:139:A:VAL:CA	1:139:A:VAL:C	1	36.81
(1,3)	1:2:A:ASP:C	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	9	36.79
(2,29)	1:40:A:ARG:C	1:41:A:LYS:N	1:41:A:LYS:CA	1:41:A:LYS:C	3	36.67
(2,46)	1:69:A:MET:N	1:69:A:MET:CA	1:69:A:MET:C	1:70:A:GLU:N	12	36.56
(2,46)	1:69:A:MET:N	1:69:A:MET:CA	1:69:A:MET:C	1:70:A:GLU:N	1	36.53
(2,14)	1:26:A:GLY:N	1:26:A:GLY:CA	1:26:A:GLY:C	1:27:A:GLY:N	2	36.52
(1,3)	1:2:A:ASP:C	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	6	36.48
(2,46)	1:69:A:MET:N	1:69:A:MET:CA	1:69:A:MET:C	1:70:A:GLU:N	8	36.41
(1,65)	1:138:A:GLU:C	1:139:A:VAL:N	1:139:A:VAL:CA	1:139:A:VAL:C	3	36.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(2,10)	1:15:A:ALA:N	1:15:A:ALA:CA	1:15:A:ALA:C	1:16:A:ALA:N	5	36.39
(2,46)	1:69:A:MET:N	1:69:A:MET:CA	1:69:A:MET:C	1:70:A:GLU:N	9	36.38
(2,10)	1:15:A:ALA:N	1:15:A:ALA:CA	1:15:A:ALA:C	1:16:A:ALA:N	7	36.37
(2,61)	1:120:A:VAL:C	1:121:A:ARG:N	1:121:A:ARG:CA	1:121:A:ARG:C	4	36.34
(2,46)	1:69:A:MET:N	1:69:A:MET:CA	1:69:A:MET:C	1:70:A:GLU:N	15	36.33
(2,29)	1:40:A:ARG:C	1:41:A:LYS:N	1:41:A:LYS:CA	1:41:A:LYS:C	5	36.33
(2,10)	1:15:A:ALA:N	1:15:A:ALA:CA	1:15:A:ALA:C	1:16:A:ALA:N	9	36.31
(2,65)	1:124:A:SER:C	1:125:A:TRP:N	1:125:A:TRP:CA	1:125:A:TRP:C	11	36.15
(1,3)	1:2:A:ASP:C	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	10	36.1
(2,61)	1:120:A:VAL:C	1:121:A:ARG:N	1:121:A:ARG:CA	1:121:A:ARG:C	10	36.08
(2,46)	1:69:A:MET:N	1:69:A:MET:CA	1:69:A:MET:C	1:70:A:GLU:N	6	36.06
(2,46)	1:69:A:MET:N	1:69:A:MET:CA	1:69:A:MET:C	1:70:A:GLU:N	7	36.05
(2,10)	1:15:A:ALA:N	1:15:A:ALA:CA	1:15:A:ALA:C	1:16:A:ALA:N	3	36.02
(2,61)	1:120:A:VAL:C	1:121:A:ARG:N	1:121:A:ARG:CA	1:121:A:ARG:C	8	35.97
(2,29)	1:40:A:ARG:C	1:41:A:LYS:N	1:41:A:LYS:CA	1:41:A:LYS:C	1	35.86
(1,65)	1:138:A:GLU:C	1:139:A:VAL:N	1:139:A:VAL:CA	1:139:A:VAL:C	8	35.85
(2,14)	1:26:A:GLY:N	1:26:A:GLY:CA	1:26:A:GLY:C	1:27:A:GLY:N	5	35.82
(2,10)	1:15:A:ALA:N	1:15:A:ALA:CA	1:15:A:ALA:C	1:16:A:ALA:N	2	35.82
(2,46)	1:69:A:MET:N	1:69:A:MET:CA	1:69:A:MET:C	1:70:A:GLU:N	3	35.66
(1,27)	1:48:A:THR:C	1:49:A:PHE:N	1:49:A:PHE:CA	1:49:A:PHE:C	10	35.65
(2,10)	1:15:A:ALA:N	1:15:A:ALA:CA	1:15:A:ALA:C	1:16:A:ALA:N	4	35.62
(2,46)	1:69:A:MET:N	1:69:A:MET:CA	1:69:A:MET:C	1:70:A:GLU:N	11	35.5
(2,46)	1:69:A:MET:N	1:69:A:MET:CA	1:69:A:MET:C	1:70:A:GLU:N	5	35.46
(2,10)	1:15:A:ALA:N	1:15:A:ALA:CA	1:15:A:ALA:C	1:16:A:ALA:N	8	35.43
(2,65)	1:124:A:SER:C	1:125:A:TRP:N	1:125:A:TRP:CA	1:125:A:TRP:C	15	35.37
(1,27)	1:48:A:THR:C	1:49:A:PHE:N	1:49:A:PHE:CA	1:49:A:PHE:C	2	35.37
(1,27)	1:48:A:THR:C	1:49:A:PHE:N	1:49:A:PHE:CA	1:49:A:PHE:C	7	35.36
(2,10)	1:15:A:ALA:N	1:15:A:ALA:CA	1:15:A:ALA:C	1:16:A:ALA:N	6	35.31
(1,65)	1:138:A:GLU:C	1:139:A:VAL:N	1:139:A:VAL:CA	1:139:A:VAL:C	7	35.31
(1,65)	1:138:A:GLU:C	1:139:A:VAL:N	1:139:A:VAL:CA	1:139:A:VAL:C	10	35.29
(2,65)	1:124:A:SER:C	1:125:A:TRP:N	1:125:A:TRP:CA	1:125:A:TRP:C	14	35.16
(2,46)	1:69:A:MET:N	1:69:A:MET:CA	1:69:A:MET:C	1:70:A:GLU:N	4	35.14
(1,3)	1:2:A:ASP:C	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	15	35.13
(2,10)	1:15:A:ALA:N	1:15:A:ALA:CA	1:15:A:ALA:C	1:16:A:ALA:N	1	35.03
(1,40)	1:82:A:ASP:N	1:82:A:ASP:CA	1:82:A:ASP:C	1:83:A:GLU:N	7	34.98
(2,46)	1:69:A:MET:N	1:69:A:MET:CA	1:69:A:MET:C	1:70:A:GLU:N	2	34.97
(1,65)	1:138:A:GLU:C	1:139:A:VAL:N	1:139:A:VAL:CA	1:139:A:VAL:C	6	34.94
(1,65)	1:138:A:GLU:C	1:139:A:VAL:N	1:139:A:VAL:CA	1:139:A:VAL:C	11	34.94
(1,65)	1:138:A:GLU:C	1:139:A:VAL:N	1:139:A:VAL:CA	1:139:A:VAL:C	9	34.81
(1,3)	1:2:A:ASP:C	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	2	34.81
(1,3)	1:2:A:ASP:C	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	3	34.81
(1,3)	1:2:A:ASP:C	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	4	34.67
(2,10)	1:15:A:ALA:N	1:15:A:ALA:CA	1:15:A:ALA:C	1:16:A:ALA:N	14	34.62
(1,65)	1:138:A:GLU:C	1:139:A:VAL:N	1:139:A:VAL:CA	1:139:A:VAL:C	2	34.52
(2,65)	1:124:A:SER:C	1:125:A:TRP:N	1:125:A:TRP:CA	1:125:A:TRP:C	13	34.33
(1,3)	1:2:A:ASP:C	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	7	34.33
(1,3)	1:2:A:ASP:C	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	8	34.32
(1,27)	1:48:A:THR:C	1:49:A:PHE:N	1:49:A:PHE:CA	1:49:A:PHE:C	8	34.24
(1,3)	1:2:A:ASP:C	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	12	34.19
(1,3)	1:2:A:ASP:C	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	13	34.11
(2,10)	1:15:A:ALA:N	1:15:A:ALA:CA	1:15:A:ALA:C	1:16:A:ALA:N	10	34.06

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,3)	1:2:A:ASP:C	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	11	33.95
(1,3)	1:2:A:ASP:C	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	14	33.89
(2,65)	1:124:A:SER:C	1:125:A:TRP:N	1:125:A:TRP:CA	1:125:A:TRP:C	12	33.85
(1,3)	1:2:A:ASP:C	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	1	33.77
(1,40)	1:82:A:ASP:N	1:82:A:ASP:CA	1:82:A:ASP:C	1:83:A:GLU:N	2	33.74
(2,61)	1:120:A:VAL:C	1:121:A:ARG:N	1:121:A:ARG:CA	1:121:A:ARG:C	5	33.72
(2,10)	1:15:A:ALA:N	1:15:A:ALA:CA	1:15:A:ALA:C	1:16:A:ALA:N	12	33.66
(2,10)	1:15:A:ALA:N	1:15:A:ALA:CA	1:15:A:ALA:C	1:16:A:ALA:N	15	33.57
(2,61)	1:120:A:VAL:C	1:121:A:ARG:N	1:121:A:ARG:CA	1:121:A:ARG:C	9	33.53
(1,27)	1:48:A:THR:C	1:49:A:PHE:N	1:49:A:PHE:CA	1:49:A:PHE:C	4	33.35
(2,10)	1:15:A:ALA:N	1:15:A:ALA:CA	1:15:A:ALA:C	1:16:A:ALA:N	11	33.1
(2,57)	1:112:A:GLU:C	1:113:A:GLY:N	1:113:A:GLY:CA	1:113:A:GLY:C	13	33.06
(2,61)	1:120:A:VAL:C	1:121:A:ARG:N	1:121:A:ARG:CA	1:121:A:ARG:C	6	33.05
(2,26)	1:38:A:VAL:N	1:38:A:VAL:CA	1:38:A:VAL:C	1:39:A:THR:N	8	32.96
(2,10)	1:15:A:ALA:N	1:15:A:ALA:CA	1:15:A:ALA:C	1:16:A:ALA:N	13	32.85
(1,27)	1:48:A:THR:C	1:49:A:PHE:N	1:49:A:PHE:CA	1:49:A:PHE:C	1	32.78
(1,65)	1:138:A:GLU:C	1:139:A:VAL:N	1:139:A:VAL:CA	1:139:A:VAL:C	4	32.58
(1,3)	1:2:A:ASP:C	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	5	32.52
(1,40)	1:82:A:ASP:N	1:82:A:ASP:CA	1:82:A:ASP:C	1:83:A:GLU:N	3	32.51
(2,96)	1:171:A:PHE:N	1:171:A:PHE:CA	1:171:A:PHE:C	1:172:A:ARG:N	8	32.22
(2,96)	1:171:A:PHE:N	1:171:A:PHE:CA	1:171:A:PHE:C	1:172:A:ARG:N	7	32.18
(2,96)	1:171:A:PHE:N	1:171:A:PHE:CA	1:171:A:PHE:C	1:172:A:ARG:N	6	32.14
(1,40)	1:82:A:ASP:N	1:82:A:ASP:CA	1:82:A:ASP:C	1:83:A:GLU:N	10	32.09
(2,96)	1:171:A:PHE:N	1:171:A:PHE:CA	1:171:A:PHE:C	1:172:A:ARG:N	10	31.99
(1,27)	1:48:A:THR:C	1:49:A:PHE:N	1:49:A:PHE:CA	1:49:A:PHE:C	5	31.97
(1,40)	1:82:A:ASP:N	1:82:A:ASP:CA	1:82:A:ASP:C	1:83:A:GLU:N	4	31.74
(2,96)	1:171:A:PHE:N	1:171:A:PHE:CA	1:171:A:PHE:C	1:172:A:ARG:N	9	31.71
(2,96)	1:171:A:PHE:N	1:171:A:PHE:CA	1:171:A:PHE:C	1:172:A:ARG:N	12	31.53
(1,65)	1:138:A:GLU:C	1:139:A:VAL:N	1:139:A:VAL:CA	1:139:A:VAL:C	5	31.5
(2,26)	1:38:A:VAL:N	1:38:A:VAL:CA	1:38:A:VAL:C	1:39:A:THR:N	9	31.37
(2,96)	1:171:A:PHE:N	1:171:A:PHE:CA	1:171:A:PHE:C	1:172:A:ARG:N	4	31.33
(1,20)	1:38:A:VAL:N	1:38:A:VAL:CA	1:38:A:VAL:C	1:39:A:THR:N	8	31.12
(2,52)	1:82:A:ASP:N	1:82:A:ASP:CA	1:82:A:ASP:C	1:83:A:GLU:N	6	31.05
(2,26)	1:38:A:VAL:N	1:38:A:VAL:CA	1:38:A:VAL:C	1:39:A:THR:N	2	30.85
(2,57)	1:112:A:GLU:C	1:113:A:GLY:N	1:113:A:GLY:CA	1:113:A:GLY:C	15	30.72
(2,96)	1:171:A:PHE:N	1:171:A:PHE:CA	1:171:A:PHE:C	1:172:A:ARG:N	3	30.64
(2,52)	1:82:A:ASP:N	1:82:A:ASP:CA	1:82:A:ASP:C	1:83:A:GLU:N	5	30.64
(1,27)	1:48:A:THR:C	1:49:A:PHE:N	1:49:A:PHE:CA	1:49:A:PHE:C	3	30.5
(2,26)	1:38:A:VAL:N	1:38:A:VAL:CA	1:38:A:VAL:C	1:39:A:THR:N	6	30.46
(2,96)	1:171:A:PHE:N	1:171:A:PHE:CA	1:171:A:PHE:C	1:172:A:ARG:N	14	30.43
(2,96)	1:171:A:PHE:N	1:171:A:PHE:CA	1:171:A:PHE:C	1:172:A:ARG:N	15	30.37
(2,96)	1:171:A:PHE:N	1:171:A:PHE:CA	1:171:A:PHE:C	1:172:A:ARG:N	5	30.22
(1,21)	1:40:A:ARG:C	1:41:A:LYS:N	1:41:A:LYS:CA	1:41:A:LYS:C	14	30.09
(2,26)	1:38:A:VAL:N	1:38:A:VAL:CA	1:38:A:VAL:C	1:39:A:THR:N	10	29.98
(1,1)	1:1:A:MET:C	1:2:A:ASP:N	1:2:A:ASP:CA	1:2:A:ASP:C	5	29.92
(2,57)	1:112:A:GLU:C	1:113:A:GLY:N	1:113:A:GLY:CA	1:113:A:GLY:C	14	29.78
(2,96)	1:171:A:PHE:N	1:171:A:PHE:CA	1:171:A:PHE:C	1:172:A:ARG:N	13	29.63
(2,96)	1:171:A:PHE:N	1:171:A:PHE:CA	1:171:A:PHE:C	1:172:A:ARG:N	11	29.59
(1,20)	1:38:A:VAL:N	1:38:A:VAL:CA	1:38:A:VAL:C	1:39:A:THR:N	9	29.54
(2,52)	1:82:A:ASP:N	1:82:A:ASP:CA	1:82:A:ASP:C	1:83:A:GLU:N	1	29.41
(1,1)	1:1:A:MET:C	1:2:A:ASP:N	1:2:A:ASP:CA	1:2:A:ASP:C	15	29.39

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(2,50)	1:77:A:LEU:N	1:77:A:LEU:CA	1:77:A:LEU:C	1:78:A:ALA:N	15	29.31
(2,1)	1:2:A:ASP:C	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	9	29.24
(2,50)	1:77:A:LEU:N	1:77:A:LEU:CA	1:77:A:LEU:C	1:78:A:ALA:N	12	29.23
(1,21)	1:40:A:ARG:C	1:41:A:LYS:N	1:41:A:LYS:CA	1:41:A:LYS:C	11	29.03
(1,20)	1:38:A:VAL:N	1:38:A:VAL:CA	1:38:A:VAL:C	1:39:A:THR:N	2	29.02
(2,1)	1:2:A:ASP:C	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	6	28.94
(1,20)	1:38:A:VAL:N	1:38:A:VAL:CA	1:38:A:VAL:C	1:39:A:THR:N	6	28.62
(2,1)	1:2:A:ASP:C	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	10	28.55
(1,21)	1:40:A:ARG:C	1:41:A:LYS:N	1:41:A:LYS:CA	1:41:A:LYS:C	15	28.3
(1,1)	1:1:A:MET:C	1:2:A:ASP:N	1:2:A:ASP:CA	1:2:A:ASP:C	7	28.16
(1,20)	1:38:A:VAL:N	1:38:A:VAL:CA	1:38:A:VAL:C	1:39:A:THR:N	10	28.15
(1,39)	1:81:A:GLY:C	1:82:A:ASP:N	1:82:A:ASP:CA	1:82:A:ASP:C	1	28.1
(1,1)	1:1:A:MET:C	1:2:A:ASP:N	1:2:A:ASP:CA	1:2:A:ASP:C	4	27.95
(1,39)	1:81:A:GLY:C	1:82:A:ASP:N	1:82:A:ASP:CA	1:82:A:ASP:C	5	27.86
(2,9)	1:14:A:ALA:C	1:15:A:ALA:N	1:15:A:ALA:CA	1:15:A:ALA:C	15	27.84
(1,70)	1:146:A:THR:N	1:146:A:THR:CA	1:146:A:THR:C	1:147:A:LYS:N	4	27.64
(1,1)	1:1:A:MET:C	1:2:A:ASP:N	1:2:A:ASP:CA	1:2:A:ASP:C	11	27.63
(2,1)	1:2:A:ASP:C	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	15	27.59
(1,1)	1:1:A:MET:C	1:2:A:ASP:N	1:2:A:ASP:CA	1:2:A:ASP:C	1	27.59
(2,20)	1:31:A:ILE:N	1:31:A:ILE:CA	1:31:A:ILE:C	1:32:A:ASP:N	14	27.56
(2,96)	1:171:A:PHE:N	1:171:A:PHE:CA	1:171:A:PHE:C	1:172:A:ARG:N	2	27.55
(1,1)	1:1:A:MET:C	1:2:A:ASP:N	1:2:A:ASP:CA	1:2:A:ASP:C	8	27.55
(2,32)	1:42:A:HIS:N	1:42:A:HIS:CA	1:42:A:HIS:C	1:43:A:ASP:N	14	27.5
(1,1)	1:1:A:MET:C	1:2:A:ASP:N	1:2:A:ASP:CA	1:2:A:ASP:C	13	27.49
(2,50)	1:77:A:LEU:N	1:77:A:LEU:CA	1:77:A:LEU:C	1:78:A:ALA:N	14	27.48
(2,57)	1:112:A:GLU:C	1:113:A:GLY:N	1:113:A:GLY:CA	1:113:A:GLY:C	11	27.35
(2,1)	1:2:A:ASP:C	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	3	27.27
(2,1)	1:2:A:ASP:C	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	2	27.26
(2,20)	1:31:A:ILE:N	1:31:A:ILE:CA	1:31:A:ILE:C	1:32:A:ASP:N	11	27.25
(2,9)	1:14:A:ALA:C	1:15:A:ALA:N	1:15:A:ALA:CA	1:15:A:ALA:C	13	27.2
(1,14)	1:19:A:ARG:N	1:19:A:ARG:CA	1:19:A:ARG:C	1:20:A:ASN:N	9	27.14
(2,1)	1:2:A:ASP:C	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	4	27.12
(2,9)	1:14:A:ALA:C	1:15:A:ALA:N	1:15:A:ALA:CA	1:15:A:ALA:C	12	27.11
(2,9)	1:14:A:ALA:C	1:15:A:ALA:N	1:15:A:ALA:CA	1:15:A:ALA:C	3	27.08
(1,35)	1:71:A:GLU:C	1:72:A:LEU:N	1:72:A:LEU:CA	1:72:A:LEU:C	4	27.08
(1,1)	1:1:A:MET:C	1:2:A:ASP:N	1:2:A:ASP:CA	1:2:A:ASP:C	3	27.06
(2,9)	1:14:A:ALA:C	1:15:A:ALA:N	1:15:A:ALA:CA	1:15:A:ALA:C	11	27.01
(2,96)	1:171:A:PHE:N	1:171:A:PHE:CA	1:171:A:PHE:C	1:172:A:ARG:N	1	26.99
(2,83)	1:161:A:ALA:C	1:162:A:GLU:N	1:162:A:GLU:CA	1:162:A:GLU:C	3	26.99
(2,9)	1:14:A:ALA:C	1:15:A:ALA:N	1:15:A:ALA:CA	1:15:A:ALA:C	7	26.93
(2,83)	1:161:A:ALA:C	1:162:A:GLU:N	1:162:A:GLU:CA	1:162:A:GLU:C	1	26.86
(2,1)	1:2:A:ASP:C	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	7	26.79
(2,1)	1:2:A:ASP:C	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	8	26.78
(1,1)	1:1:A:MET:C	1:2:A:ASP:N	1:2:A:ASP:CA	1:2:A:ASP:C	2	26.77
(2,83)	1:161:A:ALA:C	1:162:A:GLU:N	1:162:A:GLU:CA	1:162:A:GLU:C	5	26.75
(2,50)	1:77:A:LEU:N	1:77:A:LEU:CA	1:77:A:LEU:C	1:78:A:ALA:N	7	26.75
(2,83)	1:161:A:ALA:C	1:162:A:GLU:N	1:162:A:GLU:CA	1:162:A:GLU:C	6	26.74
(1,21)	1:40:A:ARG:C	1:41:A:LYS:N	1:41:A:LYS:CA	1:41:A:LYS:C	13	26.71
(2,83)	1:161:A:ALA:C	1:162:A:GLU:N	1:162:A:GLU:CA	1:162:A:GLU:C	9	26.7
(2,83)	1:161:A:ALA:C	1:162:A:GLU:N	1:162:A:GLU:CA	1:162:A:GLU:C	2	26.64
(2,83)	1:161:A:ALA:C	1:162:A:GLU:N	1:162:A:GLU:CA	1:162:A:GLU:C	8	26.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(2,1)	1:2:A:ASP:C	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	12	26.64
(2,83)	1:161:A:ALA:C	1:162:A:GLU:N	1:162:A:GLU:CA	1:162:A:GLU:C	10	26.63
(2,50)	1:77:A:LEU:N	1:77:A:LEU:CA	1:77:A:LEU:C	1:78:A:ALA:N	9	26.6
(2,83)	1:161:A:ALA:C	1:162:A:GLU:N	1:162:A:GLU:CA	1:162:A:GLU:C	13	26.59
(2,52)	1:82:A:ASP:N	1:82:A:ASP:CA	1:82:A:ASP:C	1:83:A:GLU:N	8	26.56
(2,1)	1:2:A:ASP:C	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	13	26.56
(1,1)	1:1:A:MET:C	1:2:A:ASP:N	1:2:A:ASP:CA	1:2:A:ASP:C	10	26.56
(2,52)	1:82:A:ASP:N	1:82:A:ASP:CA	1:82:A:ASP:C	1:83:A:GLU:N	9	26.55
(2,83)	1:161:A:ALA:C	1:162:A:GLU:N	1:162:A:GLU:CA	1:162:A:GLU:C	7	26.53
(2,83)	1:161:A:ALA:C	1:162:A:GLU:N	1:162:A:GLU:CA	1:162:A:GLU:C	4	26.52
(2,9)	1:14:A:ALA:C	1:15:A:ALA:N	1:15:A:ALA:CA	1:15:A:ALA:C	8	26.52
(1,21)	1:40:A:ARG:C	1:41:A:LYS:N	1:41:A:LYS:CA	1:41:A:LYS:C	12	26.5
(2,32)	1:42:A:HIS:N	1:42:A:HIS:CA	1:42:A:HIS:C	1:43:A:ASP:N	11	26.45
(2,1)	1:2:A:ASP:C	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	11	26.4
(2,82)	1:159:A:LEU:N	1:159:A:LEU:CA	1:159:A:LEU:C	1:160:A:GLY:N	4	26.38
(1,14)	1:19:A:ARG:N	1:19:A:ARG:CA	1:19:A:ARG:C	1:20:A:ASN:N	10	26.38
(1,1)	1:1:A:MET:C	1:2:A:ASP:N	1:2:A:ASP:CA	1:2:A:ASP:C	9	26.38
(2,1)	1:2:A:ASP:C	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	14	26.34
(2,67)	1:129:A:ILE:C	1:130:A:TRP:N	1:130:A:TRP:CA	1:130:A:TRP:C	5	26.28
(1,14)	1:19:A:ARG:N	1:19:A:ARG:CA	1:19:A:ARG:C	1:20:A:ASN:N	8	26.25
(1,70)	1:146:A:THR:N	1:146:A:THR:CA	1:146:A:THR:C	1:147:A:LYS:N	13	26.24
(2,1)	1:2:A:ASP:C	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	1	26.23
(2,9)	1:14:A:ALA:C	1:15:A:ALA:N	1:15:A:ALA:CA	1:15:A:ALA:C	10	26.21
(2,9)	1:14:A:ALA:C	1:15:A:ALA:N	1:15:A:ALA:CA	1:15:A:ALA:C	14	26.21
(1,70)	1:146:A:THR:N	1:146:A:THR:CA	1:146:A:THR:C	1:147:A:LYS:N	12	26.19
(2,20)	1:31:A:ILE:N	1:31:A:ILE:CA	1:31:A:ILE:C	1:32:A:ASP:N	13	26.17
(1,66)	1:139:A:VAL:N	1:139:A:VAL:CA	1:139:A:VAL:C	1:140:A:PRO:N	11	26.16
(1,70)	1:146:A:THR:N	1:146:A:THR:CA	1:146:A:THR:C	1:147:A:LYS:N	14	26.15
(1,70)	1:146:A:THR:N	1:146:A:THR:CA	1:146:A:THR:C	1:147:A:LYS:N	7	26.07
(2,83)	1:161:A:ALA:C	1:162:A:GLU:N	1:162:A:GLU:CA	1:162:A:GLU:C	15	26.06
(1,70)	1:146:A:THR:N	1:146:A:THR:CA	1:146:A:THR:C	1:147:A:LYS:N	15	26.06
(1,70)	1:146:A:THR:N	1:146:A:THR:CA	1:146:A:THR:C	1:147:A:LYS:N	9	26.04
(2,83)	1:161:A:ALA:C	1:162:A:GLU:N	1:162:A:GLU:CA	1:162:A:GLU:C	12	25.97
(2,26)	1:38:A:VAL:N	1:38:A:VAL:CA	1:38:A:VAL:C	1:39:A:THR:N	3	25.94
(1,80)	1:159:A:LEU:N	1:159:A:LEU:CA	1:159:A:LEU:C	1:160:A:GLY:N	4	25.88
(2,20)	1:31:A:ILE:N	1:31:A:ILE:CA	1:31:A:ILE:C	1:32:A:ASP:N	12	25.85
(2,20)	1:31:A:ILE:N	1:31:A:ILE:CA	1:31:A:ILE:C	1:32:A:ASP:N	7	25.83
(1,92)	1:171:A:PHE:N	1:171:A:PHE:CA	1:171:A:PHE:C	1:172:A:ARG:N	8	25.81
(1,70)	1:146:A:THR:N	1:146:A:THR:CA	1:146:A:THR:C	1:147:A:LYS:N	6	25.8
(2,32)	1:42:A:HIS:N	1:42:A:HIS:CA	1:42:A:HIS:C	1:43:A:ASP:N	15	25.78
(1,92)	1:171:A:PHE:N	1:171:A:PHE:CA	1:171:A:PHE:C	1:172:A:ARG:N	7	25.76
(1,70)	1:146:A:THR:N	1:146:A:THR:CA	1:146:A:THR:C	1:147:A:LYS:N	10	25.74
(1,92)	1:171:A:PHE:N	1:171:A:PHE:CA	1:171:A:PHE:C	1:172:A:ARG:N	6	25.72
(2,82)	1:159:A:LEU:N	1:159:A:LEU:CA	1:159:A:LEU:C	1:160:A:GLY:N	14	25.7
(1,39)	1:81:A:GLY:C	1:82:A:ASP:N	1:82:A:ASP:CA	1:82:A:ASP:C	6	25.7
(2,50)	1:77:A:LEU:N	1:77:A:LEU:CA	1:77:A:LEU:C	1:78:A:ALA:N	11	25.65
(1,1)	1:1:A:MET:C	1:2:A:ASP:N	1:2:A:ASP:CA	1:2:A:ASP:C	6	25.64
(1,92)	1:171:A:PHE:N	1:171:A:PHE:CA	1:171:A:PHE:C	1:172:A:ARG:N	10	25.57
(1,69)	1:145:A:PRO:C	1:146:A:THR:N	1:146:A:THR:CA	1:146:A:THR:C	2	25.57
(1,69)	1:145:A:PRO:C	1:146:A:THR:N	1:146:A:THR:CA	1:146:A:THR:C	5	25.56
(1,70)	1:146:A:THR:N	1:146:A:THR:CA	1:146:A:THR:C	1:147:A:LYS:N	8	25.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(2,20)	1:31:A:ILE:N	1:31:A:ILE:CA	1:31:A:ILE:C	1:32:A:ASP:N	6	25.52
(1,69)	1:145:A:PRO:C	1:146:A:THR:N	1:146:A:THR:CA	1:146:A:THR:C	1	25.52
(1,17)	1:33:A:ALA:C	1:34:A:ARG:N	1:34:A:ARG:CA	1:34:A:ARG:C	15	25.48
(2,50)	1:77:A:LEU:N	1:77:A:LEU:CA	1:77:A:LEU:C	1:78:A:ALA:N	10	25.46
(2,20)	1:31:A:ILE:N	1:31:A:ILE:CA	1:31:A:ILE:C	1:32:A:ASP:N	10	25.45
(2,82)	1:159:A:LEU:N	1:159:A:LEU:CA	1:159:A:LEU:C	1:160:A:GLY:N	1	25.44
(2,82)	1:159:A:LEU:N	1:159:A:LEU:CA	1:159:A:LEU:C	1:160:A:GLY:N	3	25.42
(2,67)	1:129:A:ILE:C	1:130:A:TRP:N	1:130:A:TRP:CA	1:130:A:TRP:C	8	25.38
(2,67)	1:129:A:ILE:C	1:130:A:TRP:N	1:130:A:TRP:CA	1:130:A:TRP:C	9	25.37
(1,70)	1:146:A:THR:N	1:146:A:THR:CA	1:146:A:THR:C	1:147:A:LYS:N	11	25.37
(2,20)	1:31:A:ILE:N	1:31:A:ILE:CA	1:31:A:ILE:C	1:32:A:ASP:N	8	25.34
(2,50)	1:77:A:LEU:N	1:77:A:LEU:CA	1:77:A:LEU:C	1:78:A:ALA:N	8	25.32
(1,92)	1:171:A:PHE:N	1:171:A:PHE:CA	1:171:A:PHE:C	1:172:A:ARG:N	9	25.29
(2,67)	1:129:A:ILE:C	1:130:A:TRP:N	1:130:A:TRP:CA	1:130:A:TRP:C	7	25.27
(2,50)	1:77:A:LEU:N	1:77:A:LEU:CA	1:77:A:LEU:C	1:78:A:ALA:N	13	25.24
(2,82)	1:159:A:LEU:N	1:159:A:LEU:CA	1:159:A:LEU:C	1:160:A:GLY:N	9	25.21
(2,9)	1:14:A:ALA:C	1:15:A:ALA:N	1:15:A:ALA:CA	1:15:A:ALA:C	4	25.2
(1,80)	1:159:A:LEU:N	1:159:A:LEU:CA	1:159:A:LEU:C	1:160:A:GLY:N	14	25.2
(2,9)	1:14:A:ALA:C	1:15:A:ALA:N	1:15:A:ALA:CA	1:15:A:ALA:C	9	25.19
(1,39)	1:81:A:GLY:C	1:82:A:ASP:N	1:82:A:ASP:CA	1:82:A:ASP:C	4	25.14
(2,82)	1:159:A:LEU:N	1:159:A:LEU:CA	1:159:A:LEU:C	1:160:A:GLY:N	11	25.13
(1,17)	1:33:A:ALA:C	1:34:A:ARG:N	1:34:A:ARG:CA	1:34:A:ARG:C	13	25.13
(2,9)	1:14:A:ALA:C	1:15:A:ALA:N	1:15:A:ALA:CA	1:15:A:ALA:C	6	25.11
(1,92)	1:171:A:PHE:N	1:171:A:PHE:CA	1:171:A:PHE:C	1:172:A:ARG:N	12	25.11
(2,67)	1:129:A:ILE:C	1:130:A:TRP:N	1:130:A:TRP:CA	1:130:A:TRP:C	10	25.1
(2,82)	1:159:A:LEU:N	1:159:A:LEU:CA	1:159:A:LEU:C	1:160:A:GLY:N	6	25.07
(2,9)	1:14:A:ALA:C	1:15:A:ALA:N	1:15:A:ALA:CA	1:15:A:ALA:C	2	25.07
(2,82)	1:159:A:LEU:N	1:159:A:LEU:CA	1:159:A:LEU:C	1:160:A:GLY:N	7	25.04
(2,67)	1:129:A:ILE:C	1:130:A:TRP:N	1:130:A:TRP:CA	1:130:A:TRP:C	1	25.03
(2,9)	1:14:A:ALA:C	1:15:A:ALA:N	1:15:A:ALA:CA	1:15:A:ALA:C	5	25.01
(2,57)	1:112:A:GLU:C	1:113:A:GLY:N	1:113:A:GLY:CA	1:113:A:GLY:C	12	24.97
(2,1)	1:2:A:ASP:C	1:3:A:THR:N	1:3:A:THR:CA	1:3:A:THR:C	5	24.97
(1,80)	1:159:A:LEU:N	1:159:A:LEU:CA	1:159:A:LEU:C	1:160:A:GLY:N	1	24.94
(1,80)	1:159:A:LEU:N	1:159:A:LEU:CA	1:159:A:LEU:C	1:160:A:GLY:N	3	24.92
(1,92)	1:171:A:PHE:N	1:171:A:PHE:CA	1:171:A:PHE:C	1:172:A:ARG:N	4	24.91
(2,14)	1:26:A:GLY:N	1:26:A:GLY:CA	1:26:A:GLY:C	1:27:A:GLY:N	6	24.89
(2,50)	1:77:A:LEU:N	1:77:A:LEU:CA	1:77:A:LEU:C	1:78:A:ALA:N	5	24.84
(2,9)	1:14:A:ALA:C	1:15:A:ALA:N	1:15:A:ALA:CA	1:15:A:ALA:C	1	24.78
(1,69)	1:145:A:PRO:C	1:146:A:THR:N	1:146:A:THR:CA	1:146:A:THR:C	3	24.76
(1,10)	1:11:A:LYS:N	1:11:A:LYS:CA	1:11:A:LYS:C	1:12:A:ILE:N	15	24.76
(1,17)	1:33:A:ALA:C	1:34:A:ARG:N	1:34:A:ARG:CA	1:34:A:ARG:C	12	24.73
(2,50)	1:77:A:LEU:N	1:77:A:LEU:CA	1:77:A:LEU:C	1:78:A:ALA:N	6	24.72
(1,80)	1:159:A:LEU:N	1:159:A:LEU:CA	1:159:A:LEU:C	1:160:A:GLY:N	9	24.72
(2,82)	1:159:A:LEU:N	1:159:A:LEU:CA	1:159:A:LEU:C	1:160:A:GLY:N	5	24.7
(2,82)	1:159:A:LEU:N	1:159:A:LEU:CA	1:159:A:LEU:C	1:160:A:GLY:N	8	24.7
(2,20)	1:31:A:ILE:N	1:31:A:ILE:CA	1:31:A:ILE:C	1:32:A:ASP:N	9	24.67
(2,67)	1:129:A:ILE:C	1:130:A:TRP:N	1:130:A:TRP:CA	1:130:A:TRP:C	6	24.63
(1,80)	1:159:A:LEU:N	1:159:A:LEU:CA	1:159:A:LEU:C	1:160:A:GLY:N	11	24.63
(1,10)	1:11:A:LYS:N	1:11:A:LYS:CA	1:11:A:LYS:C	1:12:A:ILE:N	13	24.61
(2,24)	1:37:A:ARG:N	1:37:A:ARG:CA	1:37:A:ARG:C	1:38:A:VAL:N	1	24.57
(1,80)	1:159:A:LEU:N	1:159:A:LEU:CA	1:159:A:LEU:C	1:160:A:GLY:N	6	24.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,80)	1:159:A:LEU:N	1:159:A:LEU:CA	1:159:A:LEU:C	1:160:A:GLY:N	7	24.54
(1,10)	1:11:A:LYS:N	1:11:A:LYS:CA	1:11:A:LYS:C	1:12:A:ILE:N	12	24.54
(2,83)	1:161:A:ALA:C	1:162:A:GLU:N	1:162:A:GLU:CA	1:162:A:GLU:C	14	24.33
(1,10)	1:11:A:LYS:N	1:11:A:LYS:CA	1:11:A:LYS:C	1:12:A:ILE:N	14	24.31
(2,82)	1:159:A:LEU:N	1:159:A:LEU:CA	1:159:A:LEU:C	1:160:A:GLY:N	15	24.25
(1,92)	1:171:A:PHE:N	1:171:A:PHE:CA	1:171:A:PHE:C	1:172:A:ARG:N	3	24.23
(1,80)	1:159:A:LEU:N	1:159:A:LEU:CA	1:159:A:LEU:C	1:160:A:GLY:N	5	24.2
(1,80)	1:159:A:LEU:N	1:159:A:LEU:CA	1:159:A:LEU:C	1:160:A:GLY:N	8	24.2
(1,20)	1:38:A:VAL:N	1:38:A:VAL:CA	1:38:A:VAL:C	1:39:A:THR:N	3	24.1
(1,21)	1:40:A:ARG:C	1:41:A:LYS:N	1:41:A:LYS:CA	1:41:A:LYS:C	9	24.07
(2,50)	1:77:A:LEU:N	1:77:A:LEU:CA	1:77:A:LEU:C	1:78:A:ALA:N	3	24.05
(2,21)	1:33:A:ALA:C	1:34:A:ARG:N	1:34:A:ARG:CA	1:34:A:ARG:C	15	24.04
(2,82)	1:159:A:LEU:N	1:159:A:LEU:CA	1:159:A:LEU:C	1:160:A:GLY:N	13	24.03
(1,39)	1:81:A:GLY:C	1:82:A:ASP:N	1:82:A:ASP:CA	1:82:A:ASP:C	8	24.02
(1,92)	1:171:A:PHE:N	1:171:A:PHE:CA	1:171:A:PHE:C	1:172:A:ARG:N	14	24.01
(1,39)	1:81:A:GLY:C	1:82:A:ASP:N	1:82:A:ASP:CA	1:82:A:ASP:C	3	23.99
(1,92)	1:171:A:PHE:N	1:171:A:PHE:CA	1:171:A:PHE:C	1:172:A:ARG:N	15	23.96
(1,10)	1:11:A:LYS:N	1:11:A:LYS:CA	1:11:A:LYS:C	1:12:A:ILE:N	11	23.95
(1,17)	1:33:A:ALA:C	1:34:A:ARG:N	1:34:A:ARG:CA	1:34:A:ARG:C	11	23.89
(1,10)	1:11:A:LYS:N	1:11:A:LYS:CA	1:11:A:LYS:C	1:12:A:ILE:N	7	23.85
(2,83)	1:161:A:ALA:C	1:162:A:GLU:N	1:162:A:GLU:CA	1:162:A:GLU:C	11	23.84
(2,16)	1:27:A:GLY:N	1:27:A:GLY:CA	1:27:A:GLY:C	1:28:A:GLY:N	14	23.83
(1,70)	1:146:A:THR:N	1:146:A:THR:CA	1:146:A:THR:C	1:147:A:LYS:N	5	23.82
(1,69)	1:145:A:PRO:C	1:146:A:THR:N	1:146:A:THR:CA	1:146:A:THR:C	8	23.82
(1,92)	1:171:A:PHE:N	1:171:A:PHE:CA	1:171:A:PHE:C	1:172:A:ARG:N	5	23.8
(1,10)	1:11:A:LYS:N	1:11:A:LYS:CA	1:11:A:LYS:C	1:12:A:ILE:N	3	23.8
(1,10)	1:11:A:LYS:N	1:11:A:LYS:CA	1:11:A:LYS:C	1:12:A:ILE:N	8	23.79
(1,80)	1:159:A:LEU:N	1:159:A:LEU:CA	1:159:A:LEU:C	1:160:A:GLY:N	15	23.75
(1,10)	1:11:A:LYS:N	1:11:A:LYS:CA	1:11:A:LYS:C	1:12:A:ILE:N	1	23.74
(2,21)	1:33:A:ALA:C	1:34:A:ARG:N	1:34:A:ARG:CA	1:34:A:ARG:C	13	23.69
(1,69)	1:145:A:PRO:C	1:146:A:THR:N	1:146:A:THR:CA	1:146:A:THR:C	10	23.68
(1,10)	1:11:A:LYS:N	1:11:A:LYS:CA	1:11:A:LYS:C	1:12:A:ILE:N	9	23.66
(1,10)	1:11:A:LYS:N	1:11:A:LYS:CA	1:11:A:LYS:C	1:12:A:ILE:N	10	23.65
(2,26)	1:38:A:VAL:N	1:38:A:VAL:CA	1:38:A:VAL:C	1:39:A:THR:N	7	23.64
(1,10)	1:11:A:LYS:N	1:11:A:LYS:CA	1:11:A:LYS:C	1:12:A:ILE:N	5	23.64
(2,52)	1:82:A:ASP:N	1:82:A:ASP:CA	1:82:A:ASP:C	1:83:A:GLU:N	7	23.62
(1,10)	1:11:A:LYS:N	1:11:A:LYS:CA	1:11:A:LYS:C	1:12:A:ILE:N	2	23.58
(2,20)	1:31:A:ILE:N	1:31:A:ILE:CA	1:31:A:ILE:C	1:32:A:ASP:N	1	23.57
(1,80)	1:159:A:LEU:N	1:159:A:LEU:CA	1:159:A:LEU:C	1:160:A:GLY:N	13	23.54
(1,10)	1:11:A:LYS:N	1:11:A:LYS:CA	1:11:A:LYS:C	1:12:A:ILE:N	4	23.49
(1,69)	1:145:A:PRO:C	1:146:A:THR:N	1:146:A:THR:CA	1:146:A:THR:C	6	23.47
(1,70)	1:146:A:THR:N	1:146:A:THR:CA	1:146:A:THR:C	1:147:A:LYS:N	1	23.45
(1,39)	1:81:A:GLY:C	1:82:A:ASP:N	1:82:A:ASP:CA	1:82:A:ASP:C	2	23.45
(1,69)	1:145:A:PRO:C	1:146:A:THR:N	1:146:A:THR:CA	1:146:A:THR:C	7	23.41
(2,82)	1:159:A:LEU:N	1:159:A:LEU:CA	1:159:A:LEU:C	1:160:A:GLY:N	12	23.38
(1,1)	1:1:A:MET:C	1:2:A:ASP:N	1:2:A:ASP:CA	1:2:A:ASP:C	12	23.36
(2,67)	1:129:A:ILE:C	1:130:A:TRP:N	1:130:A:TRP:CA	1:130:A:TRP:C	3	23.34
(1,17)	1:33:A:ALA:C	1:34:A:ARG:N	1:34:A:ARG:CA	1:34:A:ARG:C	14	23.32
(1,69)	1:145:A:PRO:C	1:146:A:THR:N	1:146:A:THR:CA	1:146:A:THR:C	9	23.31
(2,14)	1:26:A:GLY:N	1:26:A:GLY:CA	1:26:A:GLY:C	1:27:A:GLY:N	15	23.3
(2,21)	1:33:A:ALA:C	1:34:A:ARG:N	1:34:A:ARG:CA	1:34:A:ARG:C	12	23.29

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,10)	1:11:A:LYS:N	1:11:A:LYS:CA	1:11:A:LYS:C	1:12:A:ILE:N	6	23.28
(2,82)	1:159:A:LEU:N	1:159:A:LEU:CA	1:159:A:LEU:C	1:160:A:GLY:N	10	23.25
(1,92)	1:171:A:PHE:N	1:171:A:PHE:CA	1:171:A:PHE:C	1:172:A:ARG:N	13	23.21
(1,92)	1:171:A:PHE:N	1:171:A:PHE:CA	1:171:A:PHE:C	1:172:A:ARG:N	11	23.17
(2,66)	1:125:A:TRP:N	1:125:A:TRP:CA	1:125:A:TRP:C	1:126:A:GLU:N	11	23.16
(2,84)	1:162:A:GLU:N	1:162:A:GLU:CA	1:162:A:GLU:C	1:163:A:LYS:N	11	23.1
(2,67)	1:129:A:ILE:C	1:130:A:TRP:N	1:130:A:TRP:CA	1:130:A:TRP:C	2	23.08
(1,1)	1:1:A:MET:C	1:2:A:ASP:N	1:2:A:ASP:CA	1:2:A:ASP:C	14	23.06
(1,66)	1:139:A:VAL:N	1:139:A:VAL:CA	1:139:A:VAL:C	1:140:A:PRO:N	12	23.04
(2,12)	1:19:A:ARG:N	1:19:A:ARG:CA	1:19:A:ARG:C	1:20:A:ASN:N	9	22.99
(2,14)	1:26:A:GLY:N	1:26:A:GLY:CA	1:26:A:GLY:C	1:27:A:GLY:N	7	22.96
(1,70)	1:146:A:THR:N	1:146:A:THR:CA	1:146:A:THR:C	1:147:A:LYS:N	2	22.9
(1,69)	1:145:A:PRO:C	1:146:A:THR:N	1:146:A:THR:CA	1:146:A:THR:C	4	22.89
(2,14)	1:26:A:GLY:N	1:26:A:GLY:CA	1:26:A:GLY:C	1:27:A:GLY:N	8	22.88
(1,80)	1:159:A:LEU:N	1:159:A:LEU:CA	1:159:A:LEU:C	1:160:A:GLY:N	12	22.88
(1,49)	1:112:A:GLU:C	1:113:A:GLY:N	1:113:A:GLY:CA	1:113:A:GLY:C	13	22.88
(1,39)	1:81:A:GLY:C	1:82:A:ASP:N	1:82:A:ASP:CA	1:82:A:ASP:C	9	22.87
(1,80)	1:159:A:LEU:N	1:159:A:LEU:CA	1:159:A:LEU:C	1:160:A:GLY:N	10	22.75
(1,21)	1:40:A:ARG:C	1:41:A:LYS:N	1:41:A:LYS:CA	1:41:A:LYS:C	10	22.75
(2,20)	1:31:A:ILE:N	1:31:A:ILE:CA	1:31:A:ILE:C	1:32:A:ASP:N	4	22.68
(1,98)	1:177:A:ALA:N	1:177:A:ALA:CA	1:177:A:ALA:C	1:178:A:LEU:N	2	22.67
(1,17)	1:33:A:ALA:C	1:34:A:ARG:N	1:34:A:ARG:CA	1:34:A:ARG:C	2	22.6
(1,39)	1:81:A:GLY:C	1:82:A:ASP:N	1:82:A:ASP:CA	1:82:A:ASP:C	7	22.58
(1,14)	1:19:A:ARG:N	1:19:A:ARG:CA	1:19:A:ARG:C	1:20:A:ASN:N	6	22.58
(2,84)	1:162:A:GLU:N	1:162:A:GLU:CA	1:162:A:GLU:C	1:163:A:LYS:N	10	22.57
(2,20)	1:31:A:ILE:N	1:31:A:ILE:CA	1:31:A:ILE:C	1:32:A:ASP:N	2	22.56
(2,82)	1:159:A:LEU:N	1:159:A:LEU:CA	1:159:A:LEU:C	1:160:A:GLY:N	2	22.5
(1,70)	1:146:A:THR:N	1:146:A:THR:CA	1:146:A:THR:C	1:147:A:LYS:N	3	22.5
(2,24)	1:37:A:ARG:N	1:37:A:ARG:CA	1:37:A:ARG:C	1:38:A:VAL:N	13	22.46
(2,21)	1:33:A:ALA:C	1:34:A:ARG:N	1:34:A:ARG:CA	1:34:A:ARG:C	11	22.45
(1,17)	1:33:A:ALA:C	1:34:A:ARG:N	1:34:A:ARG:CA	1:34:A:ARG:C	3	22.44
(2,52)	1:82:A:ASP:N	1:82:A:ASP:CA	1:82:A:ASP:C	1:83:A:GLU:N	2	22.38
(2,84)	1:162:A:GLU:N	1:162:A:GLU:CA	1:162:A:GLU:C	1:163:A:LYS:N	14	22.37
(2,84)	1:162:A:GLU:N	1:162:A:GLU:CA	1:162:A:GLU:C	1:163:A:LYS:N	6	22.36
(2,50)	1:77:A:LEU:N	1:77:A:LEU:CA	1:77:A:LEU:C	1:78:A:ALA:N	1	22.35
(2,50)	1:77:A:LEU:N	1:77:A:LEU:CA	1:77:A:LEU:C	1:78:A:ALA:N	4	22.31
(1,35)	1:71:A:GLU:C	1:72:A:LEU:N	1:72:A:LEU:CA	1:72:A:LEU:C	1	22.3
(2,24)	1:37:A:ARG:N	1:37:A:ARG:CA	1:37:A:ARG:C	1:38:A:VAL:N	4	22.26
(2,84)	1:162:A:GLU:N	1:162:A:GLU:CA	1:162:A:GLU:C	1:163:A:LYS:N	2	22.22
(2,12)	1:19:A:ARG:N	1:19:A:ARG:CA	1:19:A:ARG:C	1:20:A:ASN:N	10	22.22
(1,17)	1:33:A:ALA:C	1:34:A:ARG:N	1:34:A:ARG:CA	1:34:A:ARG:C	4	22.2
(2,67)	1:129:A:ILE:C	1:130:A:TRP:N	1:130:A:TRP:CA	1:130:A:TRP:C	15	22.15
(2,20)	1:31:A:ILE:N	1:31:A:ILE:CA	1:31:A:ILE:C	1:32:A:ASP:N	5	22.13
(1,21)	1:40:A:ARG:C	1:41:A:LYS:N	1:41:A:LYS:CA	1:41:A:LYS:C	6	22.12
(2,12)	1:19:A:ARG:N	1:19:A:ARG:CA	1:19:A:ARG:C	1:20:A:ASN:N	8	22.1
(2,66)	1:125:A:TRP:N	1:125:A:TRP:CA	1:125:A:TRP:C	1:126:A:GLU:N	14	22.01
(1,80)	1:159:A:LEU:N	1:159:A:LEU:CA	1:159:A:LEU:C	1:160:A:GLY:N	2	22.0
(1,17)	1:33:A:ALA:C	1:34:A:ARG:N	1:34:A:ARG:CA	1:34:A:ARG:C	10	21.99
(2,20)	1:31:A:ILE:N	1:31:A:ILE:CA	1:31:A:ILE:C	1:32:A:ASP:N	15	21.98
(2,66)	1:125:A:TRP:N	1:125:A:TRP:CA	1:125:A:TRP:C	1:126:A:GLU:N	6	21.93
(1,24)	1:42:A:HIS:N	1:42:A:HIS:CA	1:42:A:HIS:C	1:43:A:ASP:N	14	21.91

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(2,21)	1:33:A:ALA:C	1:34:A:ARG:N	1:34:A:ARG:CA	1:34:A:ARG:C	14	21.88
(2,84)	1:162:A:GLU:N	1:162:A:GLU:CA	1:162:A:GLU:C	1:163:A:LYS:N	12	21.81
(1,20)	1:38:A:VAL:N	1:38:A:VAL:CA	1:38:A:VAL:C	1:39:A:THR:N	7	21.8
(2,84)	1:162:A:GLU:N	1:162:A:GLU:CA	1:162:A:GLU:C	1:163:A:LYS:N	9	21.78
(2,84)	1:162:A:GLU:N	1:162:A:GLU:CA	1:162:A:GLU:C	1:163:A:LYS:N	8	21.77
(1,69)	1:145:A:PRO:C	1:146:A:THR:N	1:146:A:THR:CA	1:146:A:THR:C	13	21.71
(1,69)	1:145:A:PRO:C	1:146:A:THR:N	1:146:A:THR:CA	1:146:A:THR:C	12	21.69
(1,17)	1:33:A:ALA:C	1:34:A:ARG:N	1:34:A:ARG:CA	1:34:A:ARG:C	5	21.66
(2,84)	1:162:A:GLU:N	1:162:A:GLU:CA	1:162:A:GLU:C	1:163:A:LYS:N	13	21.63
(2,84)	1:162:A:GLU:N	1:162:A:GLU:CA	1:162:A:GLU:C	1:163:A:LYS:N	7	21.62
(2,84)	1:162:A:GLU:N	1:162:A:GLU:CA	1:162:A:GLU:C	1:163:A:LYS:N	1	21.59
(2,20)	1:31:A:ILE:N	1:31:A:ILE:CA	1:31:A:ILE:C	1:32:A:ASP:N	3	21.57
(2,66)	1:125:A:TRP:N	1:125:A:TRP:CA	1:125:A:TRP:C	1:126:A:GLU:N	10	21.54
(1,17)	1:33:A:ALA:C	1:34:A:ARG:N	1:34:A:ARG:CA	1:34:A:ARG:C	8	21.54
(2,111)	1:183:A:HIS:C	1:184:A:HIS:N	1:184:A:HIS:CA	1:184:A:HIS:C	14	21.51
(1,17)	1:33:A:ALA:C	1:34:A:ARG:N	1:34:A:ARG:CA	1:34:A:ARG:C	7	21.5
(2,35)	1:47:A:LEU:C	1:48:A:THR:N	1:48:A:THR:CA	1:48:A:THR:C	3	21.48
(2,84)	1:162:A:GLU:N	1:162:A:GLU:CA	1:162:A:GLU:C	1:163:A:LYS:N	4	21.47
(2,84)	1:162:A:GLU:N	1:162:A:GLU:CA	1:162:A:GLU:C	1:163:A:LYS:N	5	21.47
(2,66)	1:125:A:TRP:N	1:125:A:TRP:CA	1:125:A:TRP:C	1:126:A:GLU:N	12	21.47
(1,17)	1:33:A:ALA:C	1:34:A:ARG:N	1:34:A:ARG:CA	1:34:A:ARG:C	6	21.44
(2,35)	1:47:A:LEU:C	1:48:A:THR:N	1:48:A:THR:CA	1:48:A:THR:C	9	21.42
(2,84)	1:162:A:GLU:N	1:162:A:GLU:CA	1:162:A:GLU:C	1:163:A:LYS:N	3	21.38
(2,84)	1:162:A:GLU:N	1:162:A:GLU:CA	1:162:A:GLU:C	1:163:A:LYS:N	15	21.29
(1,17)	1:33:A:ALA:C	1:34:A:ARG:N	1:34:A:ARG:CA	1:34:A:ARG:C	9	21.28
(2,4)	1:6:A:VAL:N	1:6:A:VAL:CA	1:6:A:VAL:C	1:7:A:THR:N	13	21.24
(1,69)	1:145:A:PRO:C	1:146:A:THR:N	1:146:A:THR:CA	1:146:A:THR:C	15	21.24
(1,98)	1:177:A:ALA:N	1:177:A:ALA:CA	1:177:A:ALA:C	1:178:A:LEU:N	3	21.23
(2,4)	1:6:A:VAL:N	1:6:A:VAL:CA	1:6:A:VAL:C	1:7:A:THR:N	14	21.18
(1,98)	1:177:A:ALA:N	1:177:A:ALA:CA	1:177:A:ALA:C	1:178:A:LEU:N	1	21.18
(2,21)	1:33:A:ALA:C	1:34:A:ARG:N	1:34:A:ARG:CA	1:34:A:ARG:C	2	21.16
(2,4)	1:6:A:VAL:N	1:6:A:VAL:CA	1:6:A:VAL:C	1:7:A:THR:N	12	21.16
(2,4)	1:6:A:VAL:N	1:6:A:VAL:CA	1:6:A:VAL:C	1:7:A:THR:N	15	21.16
(2,52)	1:82:A:ASP:N	1:82:A:ASP:CA	1:82:A:ASP:C	1:83:A:GLU:N	3	21.15
(1,92)	1:171:A:PHE:N	1:171:A:PHE:CA	1:171:A:PHE:C	1:172:A:ARG:N	2	21.14
(1,66)	1:139:A:VAL:N	1:139:A:VAL:CA	1:139:A:VAL:C	1:140:A:PRO:N	13	21.13
(2,32)	1:42:A:HIS:N	1:42:A:HIS:CA	1:42:A:HIS:C	1:43:A:ASP:N	12	21.08
(1,21)	1:40:A:ARG:C	1:41:A:LYS:N	1:41:A:LYS:CA	1:41:A:LYS:C	8	21.04
(2,66)	1:125:A:TRP:N	1:125:A:TRP:CA	1:125:A:TRP:C	1:126:A:GLU:N	9	21.0
(2,21)	1:33:A:ALA:C	1:34:A:ARG:N	1:34:A:ARG:CA	1:34:A:ARG:C	3	21.0
(1,39)	1:81:A:GLY:C	1:82:A:ASP:N	1:82:A:ASP:CA	1:82:A:ASP:C	10	20.99
(2,66)	1:125:A:TRP:N	1:125:A:TRP:CA	1:125:A:TRP:C	1:126:A:GLU:N	7	20.96
(2,13)	1:25:A:ILE:C	1:26:A:GLY:N	1:26:A:GLY:CA	1:26:A:GLY:C	14	20.96
(2,4)	1:6:A:VAL:N	1:6:A:VAL:CA	1:6:A:VAL:C	1:7:A:THR:N	3	20.93
(2,66)	1:125:A:TRP:N	1:125:A:TRP:CA	1:125:A:TRP:C	1:126:A:GLU:N	8	20.92
(1,98)	1:177:A:ALA:N	1:177:A:ALA:CA	1:177:A:ALA:C	1:178:A:LEU:N	4	20.91
(2,16)	1:27:A:GLY:N	1:27:A:GLY:CA	1:27:A:GLY:C	1:28:A:GLY:N	12	20.9
(1,24)	1:42:A:HIS:N	1:42:A:HIS:CA	1:42:A:HIS:C	1:43:A:ASP:N	11	20.86
(1,69)	1:145:A:PRO:C	1:146:A:THR:N	1:146:A:THR:CA	1:146:A:THR:C	14	20.84
(2,4)	1:6:A:VAL:N	1:6:A:VAL:CA	1:6:A:VAL:C	1:7:A:THR:N	11	20.83
(1,17)	1:33:A:ALA:C	1:34:A:ARG:N	1:34:A:ARG:CA	1:34:A:ARG:C	1	20.82

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,98)	1:177:A:ALA:N	1:177:A:ALA:CA	1:177:A:ALA:C	1:178:A:LEU:N	15	20.79
(2,95)	1:170:A:ALA:C	1:171:A:PHE:N	1:171:A:PHE:CA	1:171:A:PHE:C	4	20.76
(2,21)	1:33:A:ALA:C	1:34:A:ARG:N	1:34:A:ARG:CA	1:34:A:ARG:C	4	20.76
(1,69)	1:145:A:PRO:C	1:146:A:THR:N	1:146:A:THR:CA	1:146:A:THR:C	11	20.75
(2,52)	1:82:A:ASP:N	1:82:A:ASP:CA	1:82:A:ASP:C	1:83:A:GLU:N	10	20.73
(1,21)	1:40:A:ARG:C	1:41:A:LYS:N	1:41:A:LYS:CA	1:41:A:LYS:C	7	20.73
(1,35)	1:71:A:GLU:C	1:72:A:LEU:N	1:72:A:LEU:CA	1:72:A:LEU:C	2	20.69
(1,98)	1:177:A:ALA:N	1:177:A:ALA:CA	1:177:A:ALA:C	1:178:A:LEU:N	5	20.67
(2,50)	1:77:A:LEU:N	1:77:A:LEU:CA	1:77:A:LEU:C	1:78:A:ALA:N	2	20.64
(2,14)	1:26:A:GLY:N	1:26:A:GLY:CA	1:26:A:GLY:C	1:27:A:GLY:N	9	20.6
(2,32)	1:42:A:HIS:N	1:42:A:HIS:CA	1:42:A:HIS:C	1:43:A:ASP:N	13	20.58
(1,92)	1:171:A:PHE:N	1:171:A:PHE:CA	1:171:A:PHE:C	1:172:A:ARG:N	1	20.57
(2,4)	1:6:A:VAL:N	1:6:A:VAL:CA	1:6:A:VAL:C	1:7:A:THR:N	2	20.56
(2,21)	1:33:A:ALA:C	1:34:A:ARG:N	1:34:A:ARG:CA	1:34:A:ARG:C	10	20.55
(1,49)	1:112:A:GLU:C	1:113:A:GLY:N	1:113:A:GLY:CA	1:113:A:GLY:C	15	20.54
(1,98)	1:177:A:ALA:N	1:177:A:ALA:CA	1:177:A:ALA:C	1:178:A:LEU:N	9	20.52
(1,98)	1:177:A:ALA:N	1:177:A:ALA:CA	1:177:A:ALA:C	1:178:A:LEU:N	7	20.49
(2,66)	1:125:A:TRP:N	1:125:A:TRP:CA	1:125:A:TRP:C	1:126:A:GLU:N	13	20.44
(2,52)	1:82:A:ASP:N	1:82:A:ASP:CA	1:82:A:ASP:C	1:83:A:GLU:N	4	20.38
(1,98)	1:177:A:ALA:N	1:177:A:ALA:CA	1:177:A:ALA:C	1:178:A:LEU:N	8	20.38
(2,67)	1:129:A:ILE:C	1:130:A:TRP:N	1:130:A:TRP:CA	1:130:A:TRP:C	11	20.37
(2,35)	1:47:A:LEU:C	1:48:A:THR:N	1:48:A:THR:CA	1:48:A:THR:C	8	20.35
(1,98)	1:177:A:ALA:N	1:177:A:ALA:CA	1:177:A:ALA:C	1:178:A:LEU:N	10	20.34
(1,98)	1:177:A:ALA:N	1:177:A:ALA:CA	1:177:A:ALA:C	1:178:A:LEU:N	6	20.29
(2,67)	1:129:A:ILE:C	1:130:A:TRP:N	1:130:A:TRP:CA	1:130:A:TRP:C	4	20.25
(2,67)	1:129:A:ILE:C	1:130:A:TRP:N	1:130:A:TRP:CA	1:130:A:TRP:C	12	20.23
(2,21)	1:33:A:ALA:C	1:34:A:ARG:N	1:34:A:ARG:CA	1:34:A:ARG:C	5	20.22
(1,24)	1:42:A:HIS:N	1:42:A:HIS:CA	1:42:A:HIS:C	1:43:A:ASP:N	15	20.19
(1,14)	1:19:A:ARG:N	1:19:A:ARG:CA	1:19:A:ARG:C	1:20:A:ASN:N	11	20.19
(1,79)	1:158:A:SER:C	1:159:A:LEU:N	1:159:A:LEU:CA	1:159:A:LEU:C	11	20.17
(1,35)	1:71:A:GLU:C	1:72:A:LEU:N	1:72:A:LEU:CA	1:72:A:LEU:C	5	20.15
(1,98)	1:177:A:ALA:N	1:177:A:ALA:CA	1:177:A:ALA:C	1:178:A:LEU:N	13	20.14
(2,66)	1:125:A:TRP:N	1:125:A:TRP:CA	1:125:A:TRP:C	1:126:A:GLU:N	3	20.13
(2,35)	1:47:A:LEU:C	1:48:A:THR:N	1:48:A:THR:CA	1:48:A:THR:C	6	20.12
(2,4)	1:6:A:VAL:N	1:6:A:VAL:CA	1:6:A:VAL:C	1:7:A:THR:N	1	20.12
(2,61)	1:120:A:VAL:C	1:121:A:ARG:N	1:121:A:ARG:CA	1:121:A:ARG:C	14	20.1
(2,21)	1:33:A:ALA:C	1:34:A:ARG:N	1:34:A:ARG:CA	1:34:A:ARG:C	8	20.1
(2,67)	1:129:A:ILE:C	1:130:A:TRP:N	1:130:A:TRP:CA	1:130:A:TRP:C	14	20.06
(2,21)	1:33:A:ALA:C	1:34:A:ARG:N	1:34:A:ARG:CA	1:34:A:ARG:C	7	20.06
(2,21)	1:33:A:ALA:C	1:34:A:ARG:N	1:34:A:ARG:CA	1:34:A:ARG:C	6	20.0
(2,16)	1:27:A:GLY:N	1:27:A:GLY:CA	1:27:A:GLY:C	1:28:A:GLY:N	11	20.0
(2,67)	1:129:A:ILE:C	1:130:A:TRP:N	1:130:A:TRP:CA	1:130:A:TRP:C	13	19.99
(1,98)	1:177:A:ALA:N	1:177:A:ALA:CA	1:177:A:ALA:C	1:178:A:LEU:N	11	19.97
(2,35)	1:47:A:LEU:C	1:48:A:THR:N	1:48:A:THR:CA	1:48:A:THR:C	7	19.91
(2,14)	1:26:A:GLY:N	1:26:A:GLY:CA	1:26:A:GLY:C	1:27:A:GLY:N	10	19.9
(2,95)	1:170:A:ALA:C	1:171:A:PHE:N	1:171:A:PHE:CA	1:171:A:PHE:C	3	19.88
(2,21)	1:33:A:ALA:C	1:34:A:ARG:N	1:34:A:ARG:CA	1:34:A:ARG:C	9	19.84
(2,61)	1:120:A:VAL:C	1:121:A:ARG:N	1:121:A:ARG:CA	1:121:A:ARG:C	15	19.75
(1,21)	1:40:A:ARG:C	1:41:A:LYS:N	1:41:A:LYS:CA	1:41:A:LYS:C	2	19.74
(2,4)	1:6:A:VAL:N	1:6:A:VAL:CA	1:6:A:VAL:C	1:7:A:THR:N	5	19.73
(2,24)	1:37:A:ARG:N	1:37:A:ARG:CA	1:37:A:ARG:C	1:38:A:VAL:N	3	19.71

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(2,4)	1:6:A:VAL:N	1:6:A:VAL:CA	1:6:A:VAL:C	1:7:A:THR:N	7	19.7
(2,32)	1:42:A:HIS:N	1:42:A:HIS:CA	1:42:A:HIS:C	1:43:A:ASP:N	6	19.64
(2,4)	1:6:A:VAL:N	1:6:A:VAL:CA	1:6:A:VAL:C	1:7:A:THR:N	4	19.64
(1,49)	1:112:A:GLU:C	1:113:A:GLY:N	1:113:A:GLY:CA	1:113:A:GLY:C	14	19.6
(2,32)	1:42:A:HIS:N	1:42:A:HIS:CA	1:42:A:HIS:C	1:43:A:ASP:N	1	19.59
(2,111)	1:183:A:HIS:C	1:184:A:HIS:N	1:184:A:HIS:CA	1:184:A:HIS:C	6	19.58
(2,111)	1:183:A:HIS:C	1:184:A:HIS:N	1:184:A:HIS:CA	1:184:A:HIS:C	8	19.58
(1,36)	1:72:A:LEU:N	1:72:A:LEU:CA	1:72:A:LEU:C	1:73:A:ASP:N	1	19.58
(2,61)	1:120:A:VAL:C	1:121:A:ARG:N	1:121:A:ARG:CA	1:121:A:ARG:C	12	19.57
(2,32)	1:42:A:HIS:N	1:42:A:HIS:CA	1:42:A:HIS:C	1:43:A:ASP:N	5	19.56
(2,111)	1:183:A:HIS:C	1:184:A:HIS:N	1:184:A:HIS:CA	1:184:A:HIS:C	9	19.46
(2,24)	1:37:A:ARG:N	1:37:A:ARG:CA	1:37:A:ARG:C	1:38:A:VAL:N	12	19.42
(2,111)	1:183:A:HIS:C	1:184:A:HIS:N	1:184:A:HIS:CA	1:184:A:HIS:C	7	19.41
(2,66)	1:125:A:TRP:N	1:125:A:TRP:CA	1:125:A:TRP:C	1:126:A:GLU:N	15	19.41
(2,21)	1:33:A:ALA:C	1:34:A:ARG:N	1:34:A:ARG:CA	1:34:A:ARG:C	1	19.38
(1,14)	1:19:A:ARG:N	1:19:A:ARG:CA	1:19:A:ARG:C	1:20:A:ASN:N	4	19.38
(2,111)	1:183:A:HIS:C	1:184:A:HIS:N	1:184:A:HIS:CA	1:184:A:HIS:C	10	19.28
(2,4)	1:6:A:VAL:N	1:6:A:VAL:CA	1:6:A:VAL:C	1:7:A:THR:N	8	19.25
(2,81)	1:158:A:SER:C	1:159:A:LEU:N	1:159:A:LEU:CA	1:159:A:LEU:C	11	19.24
(2,4)	1:6:A:VAL:N	1:6:A:VAL:CA	1:6:A:VAL:C	1:7:A:THR:N	10	19.24
(1,66)	1:139:A:VAL:N	1:139:A:VAL:CA	1:139:A:VAL:C	1:140:A:PRO:N	14	19.22
(2,44)	1:59:A:ALA:N	1:59:A:ALA:CA	1:59:A:ALA:C	1:60:A:ILE:N	9	19.14
(2,44)	1:59:A:ALA:N	1:59:A:ALA:CA	1:59:A:ALA:C	1:60:A:ILE:N	7	19.11
(2,66)	1:125:A:TRP:N	1:125:A:TRP:CA	1:125:A:TRP:C	1:126:A:GLU:N	4	19.09
(2,44)	1:59:A:ALA:N	1:59:A:ALA:CA	1:59:A:ALA:C	1:60:A:ILE:N	8	19.04
(2,16)	1:27:A:GLY:N	1:27:A:GLY:CA	1:27:A:GLY:C	1:28:A:GLY:N	13	19.03
(2,32)	1:42:A:HIS:N	1:42:A:HIS:CA	1:42:A:HIS:C	1:43:A:ASP:N	7	19.02
(1,35)	1:71:A:GLU:C	1:72:A:LEU:N	1:72:A:LEU:CA	1:72:A:LEU:C	9	19.02
(2,4)	1:6:A:VAL:N	1:6:A:VAL:CA	1:6:A:VAL:C	1:7:A:THR:N	6	19.01
(2,44)	1:59:A:ALA:N	1:59:A:ALA:CA	1:59:A:ALA:C	1:60:A:ILE:N	10	18.99
(2,61)	1:120:A:VAL:C	1:121:A:ARG:N	1:121:A:ARG:CA	1:121:A:ARG:C	13	18.92
(1,35)	1:71:A:GLU:C	1:72:A:LEU:N	1:72:A:LEU:CA	1:72:A:LEU:C	3	18.92
(2,24)	1:37:A:ARG:N	1:37:A:ARG:CA	1:37:A:ARG:C	1:38:A:VAL:N	10	18.87
(2,32)	1:42:A:HIS:N	1:42:A:HIS:CA	1:42:A:HIS:C	1:43:A:ASP:N	3	18.86
(1,98)	1:177:A:ALA:N	1:177:A:ALA:CA	1:177:A:ALA:C	1:178:A:LEU:N	12	18.82
(2,24)	1:37:A:ARG:N	1:37:A:ARG:CA	1:37:A:ARG:C	1:38:A:VAL:N	8	18.79
(2,66)	1:125:A:TRP:N	1:125:A:TRP:CA	1:125:A:TRP:C	1:126:A:GLU:N	1	18.73
(2,4)	1:6:A:VAL:N	1:6:A:VAL:CA	1:6:A:VAL:C	1:7:A:THR:N	9	18.71
(2,32)	1:42:A:HIS:N	1:42:A:HIS:CA	1:42:A:HIS:C	1:43:A:ASP:N	8	18.65
(1,98)	1:177:A:ALA:N	1:177:A:ALA:CA	1:177:A:ALA:C	1:178:A:LEU:N	14	18.58
(2,95)	1:170:A:ALA:C	1:171:A:PHE:N	1:171:A:PHE:CA	1:171:A:PHE:C	5	18.51
(1,34)	1:58:A:GLU:N	1:58:A:GLU:CA	1:58:A:GLU:C	1:59:A:ALA:N	8	18.45
(2,12)	1:19:A:ARG:N	1:19:A:ARG:CA	1:19:A:ARG:C	1:20:A:ASN:N	6	18.43
(1,35)	1:71:A:GLU:C	1:72:A:LEU:N	1:72:A:LEU:CA	1:72:A:LEU:C	10	18.37
(1,18)	1:34:A:ARG:N	1:34:A:ARG:CA	1:34:A:ARG:C	1:35:A:LEU:N	15	18.36
(2,44)	1:59:A:ALA:N	1:59:A:ALA:CA	1:59:A:ALA:C	1:60:A:ILE:N	6	18.35
(2,24)	1:37:A:ARG:N	1:37:A:ARG:CA	1:37:A:ARG:C	1:38:A:VAL:N	7	18.33
(1,18)	1:34:A:ARG:N	1:34:A:ARG:CA	1:34:A:ARG:C	1:35:A:LEU:N	8	18.32
(1,34)	1:58:A:GLU:N	1:58:A:GLU:CA	1:58:A:GLU:C	1:59:A:ALA:N	10	18.31
(2,111)	1:183:A:HIS:C	1:184:A:HIS:N	1:184:A:HIS:CA	1:184:A:HIS:C	1	18.3
(2,44)	1:59:A:ALA:N	1:59:A:ALA:CA	1:59:A:ALA:C	1:60:A:ILE:N	12	18.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,21)	1:40:A:ARG:C	1:41:A:LYS:N	1:41:A:LYS:CA	1:41:A:LYS:C	4	18.28
(1,34)	1:58:A:GLU:N	1:58:A:GLU:CA	1:58:A:GLU:C	1:59:A:ALA:N	7	18.26
(1,18)	1:34:A:ARG:N	1:34:A:ARG:CA	1:34:A:ARG:C	1:35:A:LEU:N	12	18.25
(2,37)	1:48:A:THR:C	1:49:A:PHE:N	1:49:A:PHE:CA	1:49:A:PHE:C	12	18.19
(2,24)	1:37:A:ARG:N	1:37:A:ARG:CA	1:37:A:ARG:C	1:38:A:VAL:N	6	18.17
(1,34)	1:58:A:GLU:N	1:58:A:GLU:CA	1:58:A:GLU:C	1:59:A:ALA:N	9	18.17
(2,61)	1:120:A:VAL:C	1:121:A:ARG:N	1:121:A:ARG:CA	1:121:A:ARG:C	11	18.13
(2,44)	1:59:A:ALA:N	1:59:A:ALA:CA	1:59:A:ALA:C	1:60:A:ILE:N	13	18.12
(2,14)	1:26:A:GLY:N	1:26:A:GLY:CA	1:26:A:GLY:C	1:27:A:GLY:N	14	18.11
(2,44)	1:59:A:ALA:N	1:59:A:ALA:CA	1:59:A:ALA:C	1:60:A:ILE:N	5	17.96
(1,79)	1:158:A:SER:C	1:159:A:LEU:N	1:159:A:LEU:CA	1:159:A:LEU:C	14	17.96
(2,95)	1:170:A:ALA:C	1:171:A:PHE:N	1:171:A:PHE:CA	1:171:A:PHE:C	13	17.89
(1,66)	1:139:A:VAL:N	1:139:A:VAL:CA	1:139:A:VAL:C	1:140:A:PRO:N	15	17.87
(1,18)	1:34:A:ARG:N	1:34:A:ARG:CA	1:34:A:ARG:C	1:35:A:LEU:N	7	17.85
(2,24)	1:37:A:ARG:N	1:37:A:ARG:CA	1:37:A:ARG:C	1:38:A:VAL:N	5	17.84
(2,37)	1:48:A:THR:C	1:49:A:PHE:N	1:49:A:PHE:CA	1:49:A:PHE:C	11	17.83
(1,18)	1:34:A:ARG:N	1:34:A:ARG:CA	1:34:A:ARG:C	1:35:A:LEU:N	13	17.8
(2,95)	1:170:A:ALA:C	1:171:A:PHE:N	1:171:A:PHE:CA	1:171:A:PHE:C	7	17.75
(2,95)	1:170:A:ALA:C	1:171:A:PHE:N	1:171:A:PHE:CA	1:171:A:PHE:C	8	17.75
(2,44)	1:59:A:ALA:N	1:59:A:ALA:CA	1:59:A:ALA:C	1:60:A:ILE:N	1	17.75
(2,95)	1:170:A:ALA:C	1:171:A:PHE:N	1:171:A:PHE:CA	1:171:A:PHE:C	10	17.73
(2,51)	1:81:A:GLY:C	1:82:A:ASP:N	1:82:A:ASP:CA	1:82:A:ASP:C	1	17.71
(2,44)	1:59:A:ALA:N	1:59:A:ALA:CA	1:59:A:ALA:C	1:60:A:ILE:N	4	17.7
(2,37)	1:48:A:THR:C	1:49:A:PHE:N	1:49:A:PHE:CA	1:49:A:PHE:C	13	17.7
(2,24)	1:37:A:ARG:N	1:37:A:ARG:CA	1:37:A:ARG:C	1:38:A:VAL:N	15	17.67
(1,18)	1:34:A:ARG:N	1:34:A:ARG:CA	1:34:A:ARG:C	1:35:A:LEU:N	10	17.66
(2,24)	1:37:A:ARG:N	1:37:A:ARG:CA	1:37:A:ARG:C	1:38:A:VAL:N	11	17.65
(2,32)	1:42:A:HIS:N	1:42:A:HIS:CA	1:42:A:HIS:C	1:43:A:ASP:N	2	17.6
(1,18)	1:34:A:ARG:N	1:34:A:ARG:CA	1:34:A:ARG:C	1:35:A:LEU:N	6	17.51
(2,44)	1:59:A:ALA:N	1:59:A:ALA:CA	1:59:A:ALA:C	1:60:A:ILE:N	2	17.5
(1,18)	1:34:A:ARG:N	1:34:A:ARG:CA	1:34:A:ARG:C	1:35:A:LEU:N	11	17.49
(2,32)	1:42:A:HIS:N	1:42:A:HIS:CA	1:42:A:HIS:C	1:43:A:ASP:N	10	17.48
(2,51)	1:81:A:GLY:C	1:82:A:ASP:N	1:82:A:ASP:CA	1:82:A:ASP:C	5	17.47
(2,66)	1:125:A:TRP:N	1:125:A:TRP:CA	1:125:A:TRP:C	1:126:A:GLU:N	2	17.45
(2,44)	1:59:A:ALA:N	1:59:A:ALA:CA	1:59:A:ALA:C	1:60:A:ILE:N	11	17.42
(2,95)	1:170:A:ALA:C	1:171:A:PHE:N	1:171:A:PHE:CA	1:171:A:PHE:C	9	17.4
(1,34)	1:58:A:GLU:N	1:58:A:GLU:CA	1:58:A:GLU:C	1:59:A:ALA:N	1	17.36
(2,43)	1:58:A:GLU:C	1:59:A:ALA:N	1:59:A:ALA:CA	1:59:A:ALA:C	9	17.34
(2,43)	1:58:A:GLU:C	1:59:A:ALA:N	1:59:A:ALA:CA	1:59:A:ALA:C	11	17.32
(1,34)	1:58:A:GLU:N	1:58:A:GLU:CA	1:58:A:GLU:C	1:59:A:ALA:N	6	17.31
(2,95)	1:170:A:ALA:C	1:171:A:PHE:N	1:171:A:PHE:CA	1:171:A:PHE:C	14	17.3
(2,66)	1:125:A:TRP:N	1:125:A:TRP:CA	1:125:A:TRP:C	1:126:A:GLU:N	5	17.29
(2,95)	1:170:A:ALA:C	1:171:A:PHE:N	1:171:A:PHE:CA	1:171:A:PHE:C	12	17.28
(2,56)	1:105:A:GLY:N	1:105:A:GLY:CA	1:105:A:GLY:C	1:106:A:SER:N	4	17.28
(2,35)	1:47:A:LEU:C	1:48:A:THR:N	1:48:A:THR:CA	1:48:A:THR:C	2	17.27
(1,36)	1:72:A:LEU:N	1:72:A:LEU:CA	1:72:A:LEU:C	1:73:A:ASP:N	9	17.27
(2,43)	1:58:A:GLU:C	1:59:A:ALA:N	1:59:A:ALA:CA	1:59:A:ALA:C	2	17.23
(2,43)	1:58:A:GLU:C	1:59:A:ALA:N	1:59:A:ALA:CA	1:59:A:ALA:C	12	17.21
(1,36)	1:72:A:LEU:N	1:72:A:LEU:CA	1:72:A:LEU:C	1:73:A:ASP:N	10	17.2
(2,95)	1:170:A:ALA:C	1:171:A:PHE:N	1:171:A:PHE:CA	1:171:A:PHE:C	6	17.17
(1,49)	1:112:A:GLU:C	1:113:A:GLY:N	1:113:A:GLY:CA	1:113:A:GLY:C	11	17.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,18)	1:34:A:ARG:N	1:34:A:ARG:CA	1:34:A:ARG:C	1:35:A:LEU:N	14	17.16
(2,43)	1:58:A:GLU:C	1:59:A:ALA:N	1:59:A:ALA:CA	1:59:A:ALA:C	10	17.12
(2,14)	1:26:A:GLY:N	1:26:A:GLY:CA	1:26:A:GLY:C	1:27:A:GLY:N	13	17.12
(2,43)	1:58:A:GLU:C	1:59:A:ALA:N	1:59:A:ALA:CA	1:59:A:ALA:C	6	17.07
(2,43)	1:58:A:GLU:C	1:59:A:ALA:N	1:59:A:ALA:CA	1:59:A:ALA:C	8	17.07
(1,18)	1:34:A:ARG:N	1:34:A:ARG:CA	1:34:A:ARG:C	1:35:A:LEU:N	9	17.07
(2,81)	1:158:A:SER:C	1:159:A:LEU:N	1:159:A:LEU:CA	1:159:A:LEU:C	14	17.03
(1,79)	1:158:A:SER:C	1:159:A:LEU:N	1:159:A:LEU:CA	1:159:A:LEU:C	15	17.03
(2,64)	1:122:A:CYS:N	1:122:A:CYS:CA	1:122:A:CYS:C	1:123:A:ASN:N	15	17.01
(2,43)	1:58:A:GLU:C	1:59:A:ALA:N	1:59:A:ALA:CA	1:59:A:ALA:C	7	17.0
(2,43)	1:58:A:GLU:C	1:59:A:ALA:N	1:59:A:ALA:CA	1:59:A:ALA:C	1	16.99
(2,35)	1:47:A:LEU:C	1:48:A:THR:N	1:48:A:THR:CA	1:48:A:THR:C	4	16.99
(2,111)	1:183:A:HIS:C	1:184:A:HIS:N	1:184:A:HIS:CA	1:184:A:HIS:C	4	16.98
(1,34)	1:58:A:GLU:N	1:58:A:GLU:CA	1:58:A:GLU:C	1:59:A:ALA:N	2	16.94
(2,44)	1:59:A:ALA:N	1:59:A:ALA:CA	1:59:A:ALA:C	1:60:A:ILE:N	15	16.92
(1,79)	1:158:A:SER:C	1:159:A:LEU:N	1:159:A:LEU:CA	1:159:A:LEU:C	13	16.88
(2,95)	1:170:A:ALA:C	1:171:A:PHE:N	1:171:A:PHE:CA	1:171:A:PHE:C	11	16.82
(1,9)	1:10:A:HIS:C	1:11:A:LYS:N	1:11:A:LYS:CA	1:11:A:LYS:C	9	16.76
(1,79)	1:158:A:SER:C	1:159:A:LEU:N	1:159:A:LEU:CA	1:159:A:LEU:C	12	16.73
(2,111)	1:183:A:HIS:C	1:184:A:HIS:N	1:184:A:HIS:CA	1:184:A:HIS:C	15	16.7
(1,9)	1:10:A:HIS:C	1:11:A:LYS:N	1:11:A:LYS:CA	1:11:A:LYS:C	10	16.7
(2,43)	1:58:A:GLU:C	1:59:A:ALA:N	1:59:A:ALA:CA	1:59:A:ALA:C	13	16.69
(2,111)	1:183:A:HIS:C	1:184:A:HIS:N	1:184:A:HIS:CA	1:184:A:HIS:C	3	16.67
(2,13)	1:25:A:ILE:C	1:26:A:GLY:N	1:26:A:GLY:CA	1:26:A:GLY:C	12	16.62
(2,111)	1:183:A:HIS:C	1:184:A:HIS:N	1:184:A:HIS:CA	1:184:A:HIS:C	2	16.61
(2,8)	1:13:A:LEU:N	1:13:A:LEU:CA	1:13:A:LEU:C	1:14:A:ALA:N	8	16.58
(2,14)	1:26:A:GLY:N	1:26:A:GLY:CA	1:26:A:GLY:C	1:27:A:GLY:N	12	16.57
(1,91)	1:170:A:ALA:C	1:171:A:PHE:N	1:171:A:PHE:CA	1:171:A:PHE:C	4	16.54
(1,18)	1:34:A:ARG:N	1:34:A:ARG:CA	1:34:A:ARG:C	1:35:A:LEU:N	3	16.54
(1,9)	1:10:A:HIS:C	1:11:A:LYS:N	1:11:A:LYS:CA	1:11:A:LYS:C	7	16.53
(2,111)	1:183:A:HIS:C	1:184:A:HIS:N	1:184:A:HIS:CA	1:184:A:HIS:C	5	16.48
(2,13)	1:25:A:ILE:C	1:26:A:GLY:N	1:26:A:GLY:CA	1:26:A:GLY:C	11	16.47
(1,18)	1:34:A:ARG:N	1:34:A:ARG:CA	1:34:A:ARG:C	1:35:A:LEU:N	4	16.47
(1,9)	1:10:A:HIS:C	1:11:A:LYS:N	1:11:A:LYS:CA	1:11:A:LYS:C	6	16.45
(2,44)	1:59:A:ALA:N	1:59:A:ALA:CA	1:59:A:ALA:C	1:60:A:ILE:N	14	16.44
(1,34)	1:58:A:GLU:N	1:58:A:GLU:CA	1:58:A:GLU:C	1:59:A:ALA:N	3	16.44
(2,43)	1:58:A:GLU:C	1:59:A:ALA:N	1:59:A:ALA:CA	1:59:A:ALA:C	15	16.37
(2,24)	1:37:A:ARG:N	1:37:A:ARG:CA	1:37:A:ARG:C	1:38:A:VAL:N	9	16.36
(1,9)	1:10:A:HIS:C	1:11:A:LYS:N	1:11:A:LYS:CA	1:11:A:LYS:C	8	16.32
(2,30)	1:41:A:LYS:N	1:41:A:LYS:CA	1:41:A:LYS:C	1:42:A:HIS:N	14	16.29
(2,32)	1:42:A:HIS:N	1:42:A:HIS:CA	1:42:A:HIS:C	1:43:A:ASP:N	4	16.18
(2,8)	1:13:A:LEU:N	1:13:A:LEU:CA	1:13:A:LEU:C	1:14:A:ALA:N	10	16.18
(2,95)	1:170:A:ALA:C	1:171:A:PHE:N	1:171:A:PHE:CA	1:171:A:PHE:C	2	16.15
(1,35)	1:71:A:GLU:C	1:72:A:LEU:N	1:72:A:LEU:CA	1:72:A:LEU:C	7	16.15
(1,35)	1:71:A:GLU:C	1:72:A:LEU:N	1:72:A:LEU:CA	1:72:A:LEU:C	15	16.13
(1,18)	1:34:A:ARG:N	1:34:A:ARG:CA	1:34:A:ARG:C	1:35:A:LEU:N	5	16.11
(2,81)	1:158:A:SER:C	1:159:A:LEU:N	1:159:A:LEU:CA	1:159:A:LEU:C	15	16.1
(2,35)	1:47:A:LEU:C	1:48:A:THR:N	1:48:A:THR:CA	1:48:A:THR:C	5	16.09
(2,8)	1:13:A:LEU:N	1:13:A:LEU:CA	1:13:A:LEU:C	1:14:A:ALA:N	7	16.06
(1,18)	1:34:A:ARG:N	1:34:A:ARG:CA	1:34:A:ARG:C	1:35:A:LEU:N	2	16.06
(2,43)	1:58:A:GLU:C	1:59:A:ALA:N	1:59:A:ALA:CA	1:59:A:ALA:C	14	16.05

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(2,12)	1:19:A:ARG:N	1:19:A:ARG:CA	1:19:A:ARG:C	1:20:A:ASN:N	11	16.04
(1,36)	1:72:A:LEU:N	1:72:A:LEU:CA	1:72:A:LEU:C	1:73:A:ASP:N	8	15.99
(1,21)	1:40:A:ARG:C	1:41:A:LYS:N	1:41:A:LYS:CA	1:41:A:LYS:C	3	15.98
(2,35)	1:47:A:LEU:C	1:48:A:THR:N	1:48:A:THR:CA	1:48:A:THR:C	1	15.96
(2,81)	1:158:A:SER:C	1:159:A:LEU:N	1:159:A:LEU:CA	1:159:A:LEU:C	13	15.95
(1,36)	1:72:A:LEU:N	1:72:A:LEU:CA	1:72:A:LEU:C	1:73:A:ASP:N	4	15.86
(2,8)	1:13:A:LEU:N	1:13:A:LEU:CA	1:13:A:LEU:C	1:14:A:ALA:N	1	15.84
(2,32)	1:42:A:HIS:N	1:42:A:HIS:CA	1:42:A:HIS:C	1:43:A:ASP:N	9	15.83
(2,8)	1:13:A:LEU:N	1:13:A:LEU:CA	1:13:A:LEU:C	1:14:A:ALA:N	3	15.83
(2,45)	1:68:A:VAL:C	1:69:A:MET:N	1:69:A:MET:CA	1:69:A:MET:C	10	15.82
(2,95)	1:170:A:ALA:C	1:171:A:PHE:N	1:171:A:PHE:CA	1:171:A:PHE:C	15	15.81
(2,37)	1:48:A:THR:C	1:49:A:PHE:N	1:49:A:PHE:CA	1:49:A:PHE:C	14	15.81
(1,34)	1:58:A:GLU:N	1:58:A:GLU:CA	1:58:A:GLU:C	1:59:A:ALA:N	13	15.8
(2,81)	1:158:A:SER:C	1:159:A:LEU:N	1:159:A:LEU:CA	1:159:A:LEU:C	12	15.79
(2,43)	1:58:A:GLU:C	1:59:A:ALA:N	1:59:A:ALA:CA	1:59:A:ALA:C	4	15.78
(2,111)	1:183:A:HIS:C	1:184:A:HIS:N	1:184:A:HIS:CA	1:184:A:HIS:C	12	15.76
(1,18)	1:34:A:ARG:N	1:34:A:ARG:CA	1:34:A:ARG:C	1:35:A:LEU:N	1	15.76
(1,36)	1:72:A:LEU:N	1:72:A:LEU:CA	1:72:A:LEU:C	1:73:A:ASP:N	6	15.7
(1,91)	1:170:A:ALA:C	1:171:A:PHE:N	1:171:A:PHE:CA	1:171:A:PHE:C	3	15.66
(1,34)	1:58:A:GLU:N	1:58:A:GLU:CA	1:58:A:GLU:C	1:59:A:ALA:N	12	15.64
(1,21)	1:40:A:ARG:C	1:41:A:LYS:N	1:41:A:LYS:CA	1:41:A:LYS:C	5	15.64
(1,34)	1:58:A:GLU:N	1:58:A:GLU:CA	1:58:A:GLU:C	1:59:A:ALA:N	11	15.62
(1,66)	1:139:A:VAL:N	1:139:A:VAL:CA	1:139:A:VAL:C	1:140:A:PRO:N	5	15.56
(2,45)	1:68:A:VAL:C	1:69:A:MET:N	1:69:A:MET:CA	1:69:A:MET:C	6	15.53
(2,45)	1:68:A:VAL:C	1:69:A:MET:N	1:69:A:MET:CA	1:69:A:MET:C	11	15.53
(2,43)	1:58:A:GLU:C	1:59:A:ALA:N	1:59:A:ALA:CA	1:59:A:ALA:C	5	15.52
(1,24)	1:42:A:HIS:N	1:42:A:HIS:CA	1:42:A:HIS:C	1:43:A:ASP:N	12	15.49
(1,34)	1:58:A:GLU:N	1:58:A:GLU:CA	1:58:A:GLU:C	1:59:A:ALA:N	15	15.43
(1,36)	1:72:A:LEU:N	1:72:A:LEU:CA	1:72:A:LEU:C	1:73:A:ASP:N	2	15.37
(2,16)	1:27:A:GLY:N	1:27:A:GLY:CA	1:27:A:GLY:C	1:28:A:GLY:N	15	15.33
(2,51)	1:81:A:GLY:C	1:82:A:ASP:N	1:82:A:ASP:CA	1:82:A:ASP:C	6	15.31
(2,30)	1:41:A:LYS:N	1:41:A:LYS:CA	1:41:A:LYS:C	1:42:A:HIS:N	15	15.29
(1,9)	1:10:A:HIS:C	1:11:A:LYS:N	1:11:A:LYS:CA	1:11:A:LYS:C	15	15.26
(2,45)	1:68:A:VAL:C	1:69:A:MET:N	1:69:A:MET:CA	1:69:A:MET:C	9	15.25
(2,45)	1:68:A:VAL:C	1:69:A:MET:N	1:69:A:MET:CA	1:69:A:MET:C	4	15.24
(2,37)	1:48:A:THR:C	1:49:A:PHE:N	1:49:A:PHE:CA	1:49:A:PHE:C	9	15.24
(2,12)	1:19:A:ARG:N	1:19:A:ARG:CA	1:19:A:ARG:C	1:20:A:ASN:N	4	15.22
(1,21)	1:40:A:ARG:C	1:41:A:LYS:N	1:41:A:LYS:CA	1:41:A:LYS:C	1	15.17
(1,36)	1:72:A:LEU:N	1:72:A:LEU:CA	1:72:A:LEU:C	1:73:A:ASP:N	3	15.12
(2,64)	1:122:A:CYS:N	1:122:A:CYS:CA	1:122:A:CYS:C	1:123:A:ASN:N	13	15.08
(2,56)	1:105:A:GLY:N	1:105:A:GLY:CA	1:105:A:GLY:C	1:106:A:SER:N	5	15.01
(1,24)	1:42:A:HIS:N	1:42:A:HIS:CA	1:42:A:HIS:C	1:43:A:ASP:N	13	14.99
(2,95)	1:170:A:ALA:C	1:171:A:PHE:N	1:171:A:PHE:CA	1:171:A:PHE:C	1	14.98
(2,24)	1:37:A:ARG:N	1:37:A:ARG:CA	1:37:A:ARG:C	1:38:A:VAL:N	2	14.97
(1,9)	1:10:A:HIS:C	1:11:A:LYS:N	1:11:A:LYS:CA	1:11:A:LYS:C	11	14.97
(2,45)	1:68:A:VAL:C	1:69:A:MET:N	1:69:A:MET:CA	1:69:A:MET:C	8	14.95
(1,9)	1:10:A:HIS:C	1:11:A:LYS:N	1:11:A:LYS:CA	1:11:A:LYS:C	13	14.93
(1,9)	1:10:A:HIS:C	1:11:A:LYS:N	1:11:A:LYS:CA	1:11:A:LYS:C	14	14.85
(1,9)	1:10:A:HIS:C	1:11:A:LYS:N	1:11:A:LYS:CA	1:11:A:LYS:C	12	14.83
(2,45)	1:68:A:VAL:C	1:69:A:MET:N	1:69:A:MET:CA	1:69:A:MET:C	7	14.79
(1,49)	1:112:A:GLU:C	1:113:A:GLY:N	1:113:A:GLY:CA	1:113:A:GLY:C	12	14.79

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(2,56)	1:105:A:GLY:N	1:105:A:GLY:CA	1:105:A:GLY:C	1:106:A:SER:N	3	14.75
(2,51)	1:81:A:GLY:C	1:82:A:ASP:N	1:82:A:ASP:CA	1:82:A:ASP:C	4	14.75
(2,43)	1:58:A:GLU:C	1:59:A:ALA:N	1:59:A:ALA:CA	1:59:A:ALA:C	3	14.73
(1,66)	1:139:A:VAL:N	1:139:A:VAL:CA	1:139:A:VAL:C	1:140:A:PRO:N	4	14.7
(1,34)	1:58:A:GLU:N	1:58:A:GLU:CA	1:58:A:GLU:C	1:59:A:ALA:N	4	14.68
(2,35)	1:47:A:LEU:C	1:48:A:THR:N	1:48:A:THR:CA	1:48:A:THR:C	10	14.61
(1,34)	1:58:A:GLU:N	1:58:A:GLU:CA	1:58:A:GLU:C	1:59:A:ALA:N	14	14.61
(2,45)	1:68:A:VAL:C	1:69:A:MET:N	1:69:A:MET:CA	1:69:A:MET:C	5	14.6
(2,45)	1:68:A:VAL:C	1:69:A:MET:N	1:69:A:MET:CA	1:69:A:MET:C	2	14.57
(1,36)	1:72:A:LEU:N	1:72:A:LEU:CA	1:72:A:LEU:C	1:73:A:ASP:N	7	14.49
(2,56)	1:105:A:GLY:N	1:105:A:GLY:CA	1:105:A:GLY:C	1:106:A:SER:N	2	14.42
(1,91)	1:170:A:ALA:C	1:171:A:PHE:N	1:171:A:PHE:CA	1:171:A:PHE:C	5	14.3
(1,9)	1:10:A:HIS:C	1:11:A:LYS:N	1:11:A:LYS:CA	1:11:A:LYS:C	5	14.23
(2,45)	1:68:A:VAL:C	1:69:A:MET:N	1:69:A:MET:CA	1:69:A:MET:C	3	14.15
(1,35)	1:71:A:GLU:C	1:72:A:LEU:N	1:72:A:LEU:CA	1:72:A:LEU:C	8	14.13
(2,8)	1:13:A:LEU:N	1:13:A:LEU:CA	1:13:A:LEU:C	1:14:A:ALA:N	9	14.11
(1,9)	1:10:A:HIS:C	1:11:A:LYS:N	1:11:A:LYS:CA	1:11:A:LYS:C	2	14.11
(1,24)	1:42:A:HIS:N	1:42:A:HIS:CA	1:42:A:HIS:C	1:43:A:ASP:N	6	14.05
(1,54)	1:121:A:ARG:N	1:121:A:ARG:CA	1:121:A:ARG:C	1:122:A:CYS:N	1	14.03
(2,37)	1:48:A:THR:C	1:49:A:PHE:N	1:49:A:PHE:CA	1:49:A:PHE:C	6	14.02
(1,34)	1:58:A:GLU:N	1:58:A:GLU:CA	1:58:A:GLU:C	1:59:A:ALA:N	5	14.02
(1,24)	1:42:A:HIS:N	1:42:A:HIS:CA	1:42:A:HIS:C	1:43:A:ASP:N	1	14.0
(1,24)	1:42:A:HIS:N	1:42:A:HIS:CA	1:42:A:HIS:C	1:43:A:ASP:N	5	13.97
(2,8)	1:13:A:LEU:N	1:13:A:LEU:CA	1:13:A:LEU:C	1:14:A:ALA:N	5	13.96
(1,36)	1:72:A:LEU:N	1:72:A:LEU:CA	1:72:A:LEU:C	1:73:A:ASP:N	13	13.89
(2,8)	1:13:A:LEU:N	1:13:A:LEU:CA	1:13:A:LEU:C	1:14:A:ALA:N	2	13.86
(1,14)	1:19:A:ARG:N	1:19:A:ARG:CA	1:19:A:ARG:C	1:20:A:ASN:N	2	13.8
(1,14)	1:19:A:ARG:N	1:19:A:ARG:CA	1:19:A:ARG:C	1:20:A:ASN:N	14	13.77
(2,37)	1:48:A:THR:C	1:49:A:PHE:N	1:49:A:PHE:CA	1:49:A:PHE:C	15	13.73
(1,9)	1:10:A:HIS:C	1:11:A:LYS:N	1:11:A:LYS:CA	1:11:A:LYS:C	4	13.73
(1,91)	1:170:A:ALA:C	1:171:A:PHE:N	1:171:A:PHE:CA	1:171:A:PHE:C	13	13.68
(2,8)	1:13:A:LEU:N	1:13:A:LEU:CA	1:13:A:LEU:C	1:14:A:ALA:N	6	13.66
(2,51)	1:81:A:GLY:C	1:82:A:ASP:N	1:82:A:ASP:CA	1:82:A:ASP:C	8	13.63
(2,51)	1:81:A:GLY:C	1:82:A:ASP:N	1:82:A:ASP:CA	1:82:A:ASP:C	3	13.61
(2,80)	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	1:156:A:CYS:N	8	13.59
(2,26)	1:38:A:VAL:N	1:38:A:VAL:CA	1:38:A:VAL:C	1:39:A:THR:N	13	13.57
(1,36)	1:72:A:LEU:N	1:72:A:LEU:CA	1:72:A:LEU:C	1:73:A:ASP:N	11	13.57
(1,91)	1:170:A:ALA:C	1:171:A:PHE:N	1:171:A:PHE:CA	1:171:A:PHE:C	7	13.54
(1,91)	1:170:A:ALA:C	1:171:A:PHE:N	1:171:A:PHE:CA	1:171:A:PHE:C	8	13.54
(1,14)	1:19:A:ARG:N	1:19:A:ARG:CA	1:19:A:ARG:C	1:20:A:ASN:N	13	13.54
(1,91)	1:170:A:ALA:C	1:171:A:PHE:N	1:171:A:PHE:CA	1:171:A:PHE:C	10	13.52
(2,45)	1:68:A:VAL:C	1:69:A:MET:N	1:69:A:MET:CA	1:69:A:MET:C	14	13.5
(1,35)	1:71:A:GLU:C	1:72:A:LEU:N	1:72:A:LEU:CA	1:72:A:LEU:C	12	13.48
(2,111)	1:183:A:HIS:C	1:184:A:HIS:N	1:184:A:HIS:CA	1:184:A:HIS:C	11	13.47
(1,24)	1:42:A:HIS:N	1:42:A:HIS:CA	1:42:A:HIS:C	1:43:A:ASP:N	7	13.43
(1,79)	1:158:A:SER:C	1:159:A:LEU:N	1:159:A:LEU:CA	1:159:A:LEU:C	6	13.38
(2,13)	1:25:A:ILE:C	1:26:A:GLY:N	1:26:A:GLY:CA	1:26:A:GLY:C	13	13.34
(1,76)	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	1:156:A:CYS:N	8	13.33
(2,80)	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	1:156:A:CYS:N	9	13.32
(1,14)	1:19:A:ARG:N	1:19:A:ARG:CA	1:19:A:ARG:C	1:20:A:ASN:N	5	13.32
(2,80)	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	1:156:A:CYS:N	10	13.31

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(2,80)	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	1:156:A:CYS:N	6	13.27
(2,45)	1:68:A:VAL:C	1:69:A:MET:N	1:69:A:MET:CA	1:69:A:MET:C	1	13.26
(1,24)	1:42:A:HIS:N	1:42:A:HIS:CA	1:42:A:HIS:C	1:43:A:ASP:N	3	13.26
(2,8)	1:13:A:LEU:N	1:13:A:LEU:CA	1:13:A:LEU:C	1:14:A:ALA:N	4	13.22
(2,18)	1:29:A:TRP:N	1:29:A:TRP:CA	1:29:A:TRP:C	1:30:A:ALA:N	3	13.19
(1,91)	1:170:A:ALA:C	1:171:A:PHE:N	1:171:A:PHE:CA	1:171:A:PHE:C	9	13.18
(2,80)	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	1:156:A:CYS:N	2	13.16
(2,80)	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	1:156:A:CYS:N	7	13.16
(1,79)	1:158:A:SER:C	1:159:A:LEU:N	1:159:A:LEU:CA	1:159:A:LEU:C	8	13.16
(1,79)	1:158:A:SER:C	1:159:A:LEU:N	1:159:A:LEU:CA	1:159:A:LEU:C	10	13.12
(1,79)	1:158:A:SER:C	1:159:A:LEU:N	1:159:A:LEU:CA	1:159:A:LEU:C	7	13.11
(1,66)	1:139:A:VAL:N	1:139:A:VAL:CA	1:139:A:VAL:C	1:140:A:PRO:N	2	13.11
(1,91)	1:170:A:ALA:C	1:171:A:PHE:N	1:171:A:PHE:CA	1:171:A:PHE:C	14	13.09
(1,91)	1:170:A:ALA:C	1:171:A:PHE:N	1:171:A:PHE:CA	1:171:A:PHE:C	12	13.07
(2,51)	1:81:A:GLY:C	1:82:A:ASP:N	1:82:A:ASP:CA	1:82:A:ASP:C	2	13.06
(1,24)	1:42:A:HIS:N	1:42:A:HIS:CA	1:42:A:HIS:C	1:43:A:ASP:N	8	13.06
(1,79)	1:158:A:SER:C	1:159:A:LEU:N	1:159:A:LEU:CA	1:159:A:LEU:C	9	13.05
(1,76)	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	1:156:A:CYS:N	9	13.05
(1,76)	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	1:156:A:CYS:N	10	13.04
(1,9)	1:10:A:HIS:C	1:11:A:LYS:N	1:11:A:LYS:CA	1:11:A:LYS:C	3	13.02
(1,76)	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	1:156:A:CYS:N	6	13.01
(2,64)	1:122:A:CYS:N	1:122:A:CYS:CA	1:122:A:CYS:C	1:123:A:ASN:N	11	12.96
(1,91)	1:170:A:ALA:C	1:171:A:PHE:N	1:171:A:PHE:CA	1:171:A:PHE:C	6	12.96
(1,76)	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	1:156:A:CYS:N	2	12.9
(1,76)	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	1:156:A:CYS:N	7	12.9
(2,18)	1:29:A:TRP:N	1:29:A:TRP:CA	1:29:A:TRP:C	1:30:A:ALA:N	9	12.87
(2,80)	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	1:156:A:CYS:N	5	12.85
(2,64)	1:122:A:CYS:N	1:122:A:CYS:CA	1:122:A:CYS:C	1:123:A:ASN:N	14	12.85
(1,79)	1:158:A:SER:C	1:159:A:LEU:N	1:159:A:LEU:CA	1:159:A:LEU:C	1	12.85
(1,66)	1:139:A:VAL:N	1:139:A:VAL:CA	1:139:A:VAL:C	1:140:A:PRO:N	10	12.77
(1,36)	1:72:A:LEU:N	1:72:A:LEU:CA	1:72:A:LEU:C	1:73:A:ASP:N	14	12.77
(1,36)	1:72:A:LEU:N	1:72:A:LEU:CA	1:72:A:LEU:C	1:73:A:ASP:N	5	12.75
(1,66)	1:139:A:VAL:N	1:139:A:VAL:CA	1:139:A:VAL:C	1:140:A:PRO:N	1	12.73
(2,64)	1:122:A:CYS:N	1:122:A:CYS:CA	1:122:A:CYS:C	1:123:A:ASN:N	12	12.72
(1,66)	1:139:A:VAL:N	1:139:A:VAL:CA	1:139:A:VAL:C	1:140:A:PRO:N	6	12.7
(2,80)	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	1:156:A:CYS:N	1	12.67
(1,79)	1:158:A:SER:C	1:159:A:LEU:N	1:159:A:LEU:CA	1:159:A:LEU:C	3	12.63
(1,91)	1:170:A:ALA:C	1:171:A:PHE:N	1:171:A:PHE:CA	1:171:A:PHE:C	11	12.61
(1,76)	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	1:156:A:CYS:N	5	12.59
(1,66)	1:139:A:VAL:N	1:139:A:VAL:CA	1:139:A:VAL:C	1:140:A:PRO:N	8	12.58
(1,9)	1:10:A:HIS:C	1:11:A:LYS:N	1:11:A:LYS:CA	1:11:A:LYS:C	1	12.58
(1,66)	1:139:A:VAL:N	1:139:A:VAL:CA	1:139:A:VAL:C	1:140:A:PRO:N	7	12.56
(1,66)	1:139:A:VAL:N	1:139:A:VAL:CA	1:139:A:VAL:C	1:140:A:PRO:N	9	12.56
(2,51)	1:81:A:GLY:C	1:82:A:ASP:N	1:82:A:ASP:CA	1:82:A:ASP:C	9	12.48
(2,24)	1:37:A:ARG:N	1:37:A:ARG:CA	1:37:A:ARG:C	1:38:A:VAL:N	14	12.48
(2,81)	1:158:A:SER:C	1:159:A:LEU:N	1:159:A:LEU:CA	1:159:A:LEU:C	6	12.45
(2,80)	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	1:156:A:CYS:N	3	12.45
(1,76)	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	1:156:A:CYS:N	1	12.4
(2,79)	1:154:A:LEU:C	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	10	12.37
(1,66)	1:139:A:VAL:N	1:139:A:VAL:CA	1:139:A:VAL:C	1:140:A:PRO:N	3	12.36
(1,14)	1:19:A:ARG:N	1:19:A:ARG:CA	1:19:A:ARG:C	1:20:A:ASN:N	1	12.36

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,35)	1:71:A:GLU:C	1:72:A:LEU:N	1:72:A:LEU:CA	1:72:A:LEU:C	6	12.34
(1,79)	1:158:A:SER:C	1:159:A:LEU:N	1:159:A:LEU:CA	1:159:A:LEU:C	2	12.31
(1,26)	1:48:A:THR:N	1:48:A:THR:CA	1:48:A:THR:C	1:49:A:PHE:N	3	12.24
(2,81)	1:158:A:SER:C	1:159:A:LEU:N	1:159:A:LEU:CA	1:159:A:LEU:C	8	12.23
(2,37)	1:48:A:THR:C	1:49:A:PHE:N	1:49:A:PHE:CA	1:49:A:PHE:C	10	12.23
(1,79)	1:158:A:SER:C	1:159:A:LEU:N	1:159:A:LEU:CA	1:159:A:LEU:C	4	12.23
(2,80)	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	1:156:A:CYS:N	4	12.22
(2,81)	1:158:A:SER:C	1:159:A:LEU:N	1:159:A:LEU:CA	1:159:A:LEU:C	10	12.19
(2,51)	1:81:A:GLY:C	1:82:A:ASP:N	1:82:A:ASP:CA	1:82:A:ASP:C	7	12.19
(1,76)	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	1:156:A:CYS:N	3	12.19
(2,81)	1:158:A:SER:C	1:159:A:LEU:N	1:159:A:LEU:CA	1:159:A:LEU:C	7	12.18
(2,18)	1:29:A:TRP:N	1:29:A:TRP:CA	1:29:A:TRP:C	1:30:A:ALA:N	4	12.18
(2,18)	1:29:A:TRP:N	1:29:A:TRP:CA	1:29:A:TRP:C	1:30:A:ALA:N	12	12.17
(2,45)	1:68:A:VAL:C	1:69:A:MET:N	1:69:A:MET:CA	1:69:A:MET:C	13	12.15
(1,54)	1:121:A:ARG:N	1:121:A:ARG:CA	1:121:A:ARG:C	1:122:A:CYS:N	5	12.13
(2,81)	1:158:A:SER:C	1:159:A:LEU:N	1:159:A:LEU:CA	1:159:A:LEU:C	9	12.12
(1,16)	1:33:A:ALA:N	1:33:A:ALA:CA	1:33:A:ALA:C	1:34:A:ARG:N	6	12.1
(2,18)	1:29:A:TRP:N	1:29:A:TRP:CA	1:29:A:TRP:C	1:30:A:ALA:N	7	12.09
(2,30)	1:41:A:LYS:N	1:41:A:LYS:CA	1:41:A:LYS:C	1:42:A:HIS:N	6	12.07
(1,16)	1:33:A:ALA:N	1:33:A:ALA:CA	1:33:A:ALA:C	1:34:A:ARG:N	10	12.03
(2,45)	1:68:A:VAL:C	1:69:A:MET:N	1:69:A:MET:CA	1:69:A:MET:C	12	12.02
(1,24)	1:42:A:HIS:N	1:42:A:HIS:CA	1:42:A:HIS:C	1:43:A:ASP:N	2	12.01
(2,18)	1:29:A:TRP:N	1:29:A:TRP:CA	1:29:A:TRP:C	1:30:A:ALA:N	11	11.98
(2,37)	1:48:A:THR:C	1:49:A:PHE:N	1:49:A:PHE:CA	1:49:A:PHE:C	2	11.95
(2,18)	1:29:A:TRP:N	1:29:A:TRP:CA	1:29:A:TRP:C	1:30:A:ALA:N	10	11.95
(1,76)	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	1:156:A:CYS:N	4	11.95
(1,16)	1:33:A:ALA:N	1:33:A:ALA:CA	1:33:A:ALA:C	1:34:A:ARG:N	8	11.95
(2,37)	1:48:A:THR:C	1:49:A:PHE:N	1:49:A:PHE:CA	1:49:A:PHE:C	7	11.94
(2,18)	1:29:A:TRP:N	1:29:A:TRP:CA	1:29:A:TRP:C	1:30:A:ALA:N	14	11.93
(1,91)	1:170:A:ALA:C	1:171:A:PHE:N	1:171:A:PHE:CA	1:171:A:PHE:C	2	11.93
(2,81)	1:158:A:SER:C	1:159:A:LEU:N	1:159:A:LEU:CA	1:159:A:LEU:C	1	11.92
(1,16)	1:33:A:ALA:N	1:33:A:ALA:CA	1:33:A:ALA:C	1:34:A:ARG:N	9	11.92
(1,24)	1:42:A:HIS:N	1:42:A:HIS:CA	1:42:A:HIS:C	1:43:A:ASP:N	10	11.88
(2,44)	1:59:A:ALA:N	1:59:A:ALA:CA	1:59:A:ALA:C	1:60:A:ILE:N	3	11.83
(1,52)	1:119:A:PRO:N	1:119:A:PRO:CA	1:119:A:PRO:C	1:120:A:VAL:N	14	11.82
(1,42)	1:89:A:PRO:N	1:89:A:PRO:CA	1:89:A:PRO:C	1:90:A:ALA:N	3	11.79
(1,26)	1:48:A:THR:N	1:48:A:THR:CA	1:48:A:THR:C	1:49:A:PHE:N	1	11.78
(1,20)	1:38:A:VAL:N	1:38:A:VAL:CA	1:38:A:VAL:C	1:39:A:THR:N	13	11.74
(2,81)	1:158:A:SER:C	1:159:A:LEU:N	1:159:A:LEU:CA	1:159:A:LEU:C	3	11.7
(2,45)	1:68:A:VAL:C	1:69:A:MET:N	1:69:A:MET:CA	1:69:A:MET:C	15	11.62
(2,94)	1:170:A:ALA:N	1:170:A:ALA:CA	1:170:A:ALA:C	1:171:A:PHE:N	1	11.59
(2,18)	1:29:A:TRP:N	1:29:A:TRP:CA	1:29:A:TRP:C	1:30:A:ALA:N	13	11.59
(1,91)	1:170:A:ALA:C	1:171:A:PHE:N	1:171:A:PHE:CA	1:171:A:PHE:C	15	11.59
(1,16)	1:33:A:ALA:N	1:33:A:ALA:CA	1:33:A:ALA:C	1:34:A:ARG:N	7	11.56
(2,18)	1:29:A:TRP:N	1:29:A:TRP:CA	1:29:A:TRP:C	1:30:A:ALA:N	1	11.55
(1,79)	1:158:A:SER:C	1:159:A:LEU:N	1:159:A:LEU:CA	1:159:A:LEU:C	5	11.54
(2,80)	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	1:156:A:CYS:N	11	11.44
(2,19)	1:30:A:ALA:C	1:31:A:ILE:N	1:31:A:ILE:CA	1:31:A:ILE:C	10	11.41
(2,81)	1:158:A:SER:C	1:159:A:LEU:N	1:159:A:LEU:CA	1:159:A:LEU:C	2	11.38
(2,26)	1:38:A:VAL:N	1:38:A:VAL:CA	1:38:A:VAL:C	1:39:A:THR:N	12	11.38
(1,52)	1:119:A:PRO:N	1:119:A:PRO:CA	1:119:A:PRO:C	1:120:A:VAL:N	15	11.38

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(2,56)	1:105:A:GLY:N	1:105:A:GLY:CA	1:105:A:GLY:C	1:106:A:SER:N	8	11.37
(1,44)	1:106:A:SER:N	1:106:A:SER:CA	1:106:A:SER:C	1:107:A:CYS:N	4	11.31
(2,81)	1:158:A:SER:C	1:159:A:LEU:N	1:159:A:LEU:CA	1:159:A:LEU:C	4	11.3
(1,26)	1:48:A:THR:N	1:48:A:THR:CA	1:48:A:THR:C	1:49:A:PHE:N	5	11.3
(1,97)	1:176:A:ALA:C	1:177:A:ALA:N	1:177:A:ALA:CA	1:177:A:ALA:C	5	11.28
(1,97)	1:176:A:ALA:C	1:177:A:ALA:N	1:177:A:ALA:CA	1:177:A:ALA:C	1	11.27
(1,8)	1:10:A:HIS:N	1:10:A:HIS:CA	1:10:A:HIS:C	1:11:A:LYS:N	13	11.23
(1,76)	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	1:156:A:CYS:N	11	11.18
(1,8)	1:10:A:HIS:N	1:10:A:HIS:CA	1:10:A:HIS:C	1:11:A:LYS:N	11	11.17
(1,8)	1:10:A:HIS:N	1:10:A:HIS:CA	1:10:A:HIS:C	1:11:A:LYS:N	12	11.17
(2,79)	1:154:A:LEU:C	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	9	11.16
(1,16)	1:33:A:ALA:N	1:33:A:ALA:CA	1:33:A:ALA:C	1:34:A:ARG:N	5	11.13
(2,18)	1:29:A:TRP:N	1:29:A:TRP:CA	1:29:A:TRP:C	1:30:A:ALA:N	8	11.11
(2,79)	1:154:A:LEU:C	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	2	11.1
(2,64)	1:122:A:CYS:N	1:122:A:CYS:CA	1:122:A:CYS:C	1:123:A:ASN:N	5	11.03
(1,42)	1:89:A:PRO:N	1:89:A:PRO:CA	1:89:A:PRO:C	1:90:A:ALA:N	1	11.02
(1,16)	1:33:A:ALA:N	1:33:A:ALA:CA	1:33:A:ALA:C	1:34:A:ARG:N	1	10.99
(1,16)	1:33:A:ALA:N	1:33:A:ALA:CA	1:33:A:ALA:C	1:34:A:ARG:N	3	10.98
(1,16)	1:33:A:ALA:N	1:33:A:ALA:CA	1:33:A:ALA:C	1:34:A:ARG:N	4	10.97
(2,80)	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	1:156:A:CYS:N	12	10.96
(1,100)	1:180:A:HIS:N	1:180:A:HIS:CA	1:180:A:HIS:C	1:181:A:HIS:N	15	10.96
(1,97)	1:176:A:ALA:C	1:177:A:ALA:N	1:177:A:ALA:CA	1:177:A:ALA:C	7	10.94
(2,18)	1:29:A:TRP:N	1:29:A:TRP:CA	1:29:A:TRP:C	1:30:A:ALA:N	6	10.93
(2,30)	1:41:A:LYS:N	1:41:A:LYS:CA	1:41:A:LYS:C	1:42:A:HIS:N	12	10.92
(2,80)	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	1:156:A:CYS:N	15	10.9
(2,79)	1:154:A:LEU:C	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	11	10.87
(2,19)	1:30:A:ALA:C	1:31:A:ILE:N	1:31:A:ILE:CA	1:31:A:ILE:C	1	10.87
(1,25)	1:47:A:LEU:C	1:48:A:THR:N	1:48:A:THR:CA	1:48:A:THR:C	3	10.87
(2,94)	1:170:A:ALA:N	1:170:A:ALA:CA	1:170:A:ALA:C	1:171:A:PHE:N	2	10.86
(1,19)	1:37:A:ARG:C	1:38:A:VAL:N	1:38:A:VAL:CA	1:38:A:VAL:C	15	10.86
(2,80)	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	1:156:A:CYS:N	13	10.85
(2,19)	1:30:A:ALA:C	1:31:A:ILE:N	1:31:A:ILE:CA	1:31:A:ILE:C	7	10.83
(2,37)	1:48:A:THR:C	1:49:A:PHE:N	1:49:A:PHE:CA	1:49:A:PHE:C	8	10.82
(1,25)	1:47:A:LEU:C	1:48:A:THR:N	1:48:A:THR:CA	1:48:A:THR:C	9	10.81
(2,79)	1:154:A:LEU:C	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	12	10.78
(2,19)	1:30:A:ALA:C	1:31:A:ILE:N	1:31:A:ILE:CA	1:31:A:ILE:C	8	10.77
(1,91)	1:170:A:ALA:C	1:171:A:PHE:N	1:171:A:PHE:CA	1:171:A:PHE:C	1	10.77
(1,36)	1:72:A:LEU:N	1:72:A:LEU:CA	1:72:A:LEU:C	1:73:A:ASP:N	12	10.73
(1,8)	1:10:A:HIS:N	1:10:A:HIS:CA	1:10:A:HIS:C	1:11:A:LYS:N	15	10.73
(2,19)	1:30:A:ALA:C	1:31:A:ILE:N	1:31:A:ILE:CA	1:31:A:ILE:C	9	10.71
(1,97)	1:176:A:ALA:C	1:177:A:ALA:N	1:177:A:ALA:CA	1:177:A:ALA:C	4	10.7
(1,76)	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	1:156:A:CYS:N	12	10.7
(1,8)	1:10:A:HIS:N	1:10:A:HIS:CA	1:10:A:HIS:C	1:11:A:LYS:N	14	10.7
(2,79)	1:154:A:LEU:C	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	5	10.69
(1,97)	1:176:A:ALA:C	1:177:A:ALA:N	1:177:A:ALA:CA	1:177:A:ALA:C	9	10.69
(1,97)	1:176:A:ALA:C	1:177:A:ALA:N	1:177:A:ALA:CA	1:177:A:ALA:C	14	10.69
(1,82)	1:161:A:ALA:N	1:161:A:ALA:CA	1:161:A:ALA:C	1:162:A:GLU:N	4	10.66
(2,30)	1:41:A:LYS:N	1:41:A:LYS:CA	1:41:A:LYS:C	1:42:A:HIS:N	8	10.65
(1,76)	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	1:156:A:CYS:N	15	10.64
(2,79)	1:154:A:LEU:C	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	14	10.63
(1,8)	1:10:A:HIS:N	1:10:A:HIS:CA	1:10:A:HIS:C	1:11:A:LYS:N	4	10.63

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(2,81)	1:158:A:SER:C	1:159:A:LEU:N	1:159:A:LEU:CA	1:159:A:LEU:C	5	10.61
(2,79)	1:154:A:LEU:C	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	6	10.6
(2,51)	1:81:A:GLY:C	1:82:A:ASP:N	1:82:A:ASP:CA	1:82:A:ASP:C	10	10.6
(1,97)	1:176:A:ALA:C	1:177:A:ALA:N	1:177:A:ALA:CA	1:177:A:ALA:C	6	10.6
(1,97)	1:176:A:ALA:C	1:177:A:ALA:N	1:177:A:ALA:CA	1:177:A:ALA:C	8	10.6
(1,8)	1:10:A:HIS:N	1:10:A:HIS:CA	1:10:A:HIS:C	1:11:A:LYS:N	5	10.6
(1,97)	1:176:A:ALA:C	1:177:A:ALA:N	1:177:A:ALA:CA	1:177:A:ALA:C	3	10.59
(1,24)	1:42:A:HIS:N	1:42:A:HIS:CA	1:42:A:HIS:C	1:43:A:ASP:N	4	10.59
(1,97)	1:176:A:ALA:C	1:177:A:ALA:N	1:177:A:ALA:CA	1:177:A:ALA:C	10	10.58
(1,76)	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	1:156:A:CYS:N	13	10.58
(2,19)	1:30:A:ALA:C	1:31:A:ILE:N	1:31:A:ILE:CA	1:31:A:ILE:C	6	10.56
(2,19)	1:30:A:ALA:C	1:31:A:ILE:N	1:31:A:ILE:CA	1:31:A:ILE:C	13	10.55
(2,19)	1:30:A:ALA:C	1:31:A:ILE:N	1:31:A:ILE:CA	1:31:A:ILE:C	12	10.54
(2,64)	1:122:A:CYS:N	1:122:A:CYS:CA	1:122:A:CYS:C	1:123:A:ASN:N	2	10.52
(1,97)	1:176:A:ALA:C	1:177:A:ALA:N	1:177:A:ALA:CA	1:177:A:ALA:C	2	10.51
(1,46)	1:108:A:PRO:N	1:108:A:PRO:CA	1:108:A:PRO:C	1:109:A:GLU:N	7	10.5
(2,79)	1:154:A:LEU:C	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	7	10.49
(2,79)	1:154:A:LEU:C	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	15	10.49
(2,79)	1:154:A:LEU:C	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	8	10.43
(2,79)	1:154:A:LEU:C	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	1	10.39
(2,94)	1:170:A:ALA:N	1:170:A:ALA:CA	1:170:A:ALA:C	1:171:A:PHE:N	5	10.36
(1,100)	1:180:A:HIS:N	1:180:A:HIS:CA	1:180:A:HIS:C	1:181:A:HIS:N	12	10.35
(1,52)	1:119:A:PRO:N	1:119:A:PRO:CA	1:119:A:PRO:C	1:120:A:VAL:N	11	10.34
(1,44)	1:106:A:SER:N	1:106:A:SER:CA	1:106:A:SER:C	1:107:A:CYS:N	5	10.34
(2,18)	1:29:A:TRP:N	1:29:A:TRP:CA	1:29:A:TRP:C	1:30:A:ALA:N	15	10.33
(1,8)	1:10:A:HIS:N	1:10:A:HIS:CA	1:10:A:HIS:C	1:11:A:LYS:N	2	10.33
(1,47)	1:108:A:PRO:C	1:109:A:GLU:N	1:109:A:GLU:CA	1:109:A:GLU:C	11	10.32
(2,18)	1:29:A:TRP:N	1:29:A:TRP:CA	1:29:A:TRP:C	1:30:A:ALA:N	2	10.29
(2,13)	1:25:A:ILE:C	1:26:A:GLY:N	1:26:A:GLY:CA	1:26:A:GLY:C	1	10.29
(1,82)	1:161:A:ALA:N	1:161:A:ALA:CA	1:161:A:ALA:C	1:162:A:GLU:N	7	10.28
(1,16)	1:33:A:ALA:N	1:33:A:ALA:CA	1:33:A:ALA:C	1:34:A:ARG:N	2	10.28
(1,24)	1:42:A:HIS:N	1:42:A:HIS:CA	1:42:A:HIS:C	1:43:A:ASP:N	9	10.24
(1,74)	1:154:A:LEU:N	1:154:A:LEU:CA	1:154:A:LEU:C	1:155:A:ALA:N	1	10.23
(1,26)	1:48:A:THR:N	1:48:A:THR:CA	1:48:A:THR:C	1:49:A:PHE:N	2	10.2
(1,97)	1:176:A:ALA:C	1:177:A:ALA:N	1:177:A:ALA:CA	1:177:A:ALA:C	11	10.18
(1,74)	1:154:A:LEU:N	1:154:A:LEU:CA	1:154:A:LEU:C	1:155:A:ALA:N	5	10.17
(1,82)	1:161:A:ALA:N	1:161:A:ALA:CA	1:161:A:ALA:C	1:162:A:GLU:N	8	10.16
(2,30)	1:41:A:LYS:N	1:41:A:LYS:CA	1:41:A:LYS:C	1:42:A:HIS:N	7	10.15
(1,97)	1:176:A:ALA:C	1:177:A:ALA:N	1:177:A:ALA:CA	1:177:A:ALA:C	12	10.15
(2,79)	1:154:A:LEU:C	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	3	10.14
(2,79)	1:154:A:LEU:C	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	4	10.12
(1,35)	1:71:A:GLU:C	1:72:A:LEU:N	1:72:A:LEU:CA	1:72:A:LEU:C	14	10.11
(2,13)	1:25:A:ILE:C	1:26:A:GLY:N	1:26:A:GLY:CA	1:26:A:GLY:C	3	10.08
(1,82)	1:161:A:ALA:N	1:161:A:ALA:CA	1:161:A:ALA:C	1:162:A:GLU:N	6	10.08
(1,33)	1:57:A:LEU:C	1:58:A:GLU:N	1:58:A:GLU:CA	1:58:A:GLU:C	1	10.08
(2,79)	1:154:A:LEU:C	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	13	10.07
(1,19)	1:37:A:ARG:C	1:38:A:VAL:N	1:38:A:VAL:CA	1:38:A:VAL:C	12	10.07
(2,94)	1:170:A:ALA:N	1:170:A:ALA:CA	1:170:A:ALA:C	1:171:A:PHE:N	3	10.04
(1,82)	1:161:A:ALA:N	1:161:A:ALA:CA	1:161:A:ALA:C	1:162:A:GLU:N	2	10.01
(1,35)	1:71:A:GLU:C	1:72:A:LEU:N	1:72:A:LEU:CA	1:72:A:LEU:C	11	9.99
(2,26)	1:38:A:VAL:N	1:38:A:VAL:CA	1:38:A:VAL:C	1:39:A:THR:N	11	9.96

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,82)	1:161:A:ALA:N	1:161:A:ALA:CA	1:161:A:ALA:C	1:162:A:GLU:N	9	9.95
(2,94)	1:170:A:ALA:N	1:170:A:ALA:CA	1:170:A:ALA:C	1:171:A:PHE:N	4	9.94
(2,13)	1:25:A:ILE:C	1:26:A:GLY:N	1:26:A:GLY:CA	1:26:A:GLY:C	5	9.94
(1,97)	1:176:A:ALA:C	1:177:A:ALA:N	1:177:A:ALA:CA	1:177:A:ALA:C	15	9.94
(2,37)	1:48:A:THR:C	1:49:A:PHE:N	1:49:A:PHE:CA	1:49:A:PHE:C	4	9.93
(1,97)	1:176:A:ALA:C	1:177:A:ALA:N	1:177:A:ALA:CA	1:177:A:ALA:C	13	9.88
(2,19)	1:30:A:ALA:C	1:31:A:ILE:N	1:31:A:ILE:CA	1:31:A:ILE:C	5	9.86
(1,82)	1:161:A:ALA:N	1:161:A:ALA:CA	1:161:A:ALA:C	1:162:A:GLU:N	12	9.83
(1,82)	1:161:A:ALA:N	1:161:A:ALA:CA	1:161:A:ALA:C	1:162:A:GLU:N	5	9.8
(1,8)	1:10:A:HIS:N	1:10:A:HIS:CA	1:10:A:HIS:C	1:11:A:LYS:N	1	9.8
(1,82)	1:161:A:ALA:N	1:161:A:ALA:CA	1:161:A:ALA:C	1:162:A:GLU:N	10	9.78
(2,80)	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	1:156:A:CYS:N	14	9.75
(1,74)	1:154:A:LEU:N	1:154:A:LEU:CA	1:154:A:LEU:C	1:155:A:ALA:N	3	9.75
(1,25)	1:47:A:LEU:C	1:48:A:THR:N	1:48:A:THR:CA	1:48:A:THR:C	8	9.74
(1,82)	1:161:A:ALA:N	1:161:A:ALA:CA	1:161:A:ALA:C	1:162:A:GLU:N	1	9.72
(2,8)	1:13:A:LEU:N	1:13:A:LEU:CA	1:13:A:LEU:C	1:14:A:ALA:N	13	9.71
(1,33)	1:57:A:LEU:C	1:58:A:GLU:N	1:58:A:GLU:CA	1:58:A:GLU:C	2	9.68
(1,8)	1:10:A:HIS:N	1:10:A:HIS:CA	1:10:A:HIS:C	1:11:A:LYS:N	6	9.68
(2,18)	1:29:A:TRP:N	1:29:A:TRP:CA	1:29:A:TRP:C	1:30:A:ALA:N	5	9.67
(2,26)	1:38:A:VAL:N	1:38:A:VAL:CA	1:38:A:VAL:C	1:39:A:THR:N	15	9.66
(1,8)	1:10:A:HIS:N	1:10:A:HIS:CA	1:10:A:HIS:C	1:11:A:LYS:N	3	9.66
(2,12)	1:19:A:ARG:N	1:19:A:ARG:CA	1:19:A:ARG:C	1:20:A:ASN:N	2	9.64
(2,8)	1:13:A:LEU:N	1:13:A:LEU:CA	1:13:A:LEU:C	1:14:A:ALA:N	11	9.64
(2,60)	1:120:A:VAL:N	1:120:A:VAL:CA	1:120:A:VAL:C	1:121:A:ARG:N	12	9.63
(1,14)	1:19:A:ARG:N	1:19:A:ARG:CA	1:19:A:ARG:C	1:20:A:ASN:N	12	9.63
(2,12)	1:19:A:ARG:N	1:19:A:ARG:CA	1:19:A:ARG:C	1:20:A:ASN:N	14	9.62
(1,82)	1:161:A:ALA:N	1:161:A:ALA:CA	1:161:A:ALA:C	1:162:A:GLU:N	3	9.62
(1,82)	1:161:A:ALA:N	1:161:A:ALA:CA	1:161:A:ALA:C	1:162:A:GLU:N	15	9.59
(1,16)	1:33:A:ALA:N	1:33:A:ALA:CA	1:33:A:ALA:C	1:34:A:ARG:N	12	9.59
(1,100)	1:180:A:HIS:N	1:180:A:HIS:CA	1:180:A:HIS:C	1:181:A:HIS:N	11	9.57
(1,33)	1:57:A:LEU:C	1:58:A:GLU:N	1:58:A:GLU:CA	1:58:A:GLU:C	8	9.56
(1,20)	1:38:A:VAL:N	1:38:A:VAL:CA	1:38:A:VAL:C	1:39:A:THR:N	12	9.55
(1,74)	1:154:A:LEU:N	1:154:A:LEU:CA	1:154:A:LEU:C	1:155:A:ALA:N	8	9.54
(1,25)	1:47:A:LEU:C	1:48:A:THR:N	1:48:A:THR:CA	1:48:A:THR:C	6	9.5
(2,94)	1:170:A:ALA:N	1:170:A:ALA:CA	1:170:A:ALA:C	1:171:A:PHE:N	13	9.48
(1,76)	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	1:156:A:CYS:N	14	9.48
(1,8)	1:10:A:HIS:N	1:10:A:HIS:CA	1:10:A:HIS:C	1:11:A:LYS:N	8	9.46
(2,12)	1:19:A:ARG:N	1:19:A:ARG:CA	1:19:A:ARG:C	1:20:A:ASN:N	13	9.38
(1,33)	1:57:A:LEU:C	1:58:A:GLU:N	1:58:A:GLU:CA	1:58:A:GLU:C	9	9.38
(1,74)	1:154:A:LEU:N	1:154:A:LEU:CA	1:154:A:LEU:C	1:155:A:ALA:N	6	9.37
(1,8)	1:10:A:HIS:N	1:10:A:HIS:CA	1:10:A:HIS:C	1:11:A:LYS:N	7	9.37
(2,37)	1:48:A:THR:C	1:49:A:PHE:N	1:49:A:PHE:CA	1:49:A:PHE:C	1	9.36
(1,16)	1:33:A:ALA:N	1:33:A:ALA:CA	1:33:A:ALA:C	1:34:A:ARG:N	13	9.35
(1,16)	1:33:A:ALA:N	1:33:A:ALA:CA	1:33:A:ALA:C	1:34:A:ARG:N	14	9.35
(1,8)	1:10:A:HIS:N	1:10:A:HIS:CA	1:10:A:HIS:C	1:11:A:LYS:N	9	9.35
(1,52)	1:119:A:PRO:N	1:119:A:PRO:CA	1:119:A:PRO:C	1:120:A:VAL:N	13	9.33
(1,33)	1:57:A:LEU:C	1:58:A:GLU:N	1:58:A:GLU:CA	1:58:A:GLU:C	10	9.33
(1,74)	1:154:A:LEU:N	1:154:A:LEU:CA	1:154:A:LEU:C	1:155:A:ALA:N	7	9.32
(1,25)	1:47:A:LEU:C	1:48:A:THR:N	1:48:A:THR:CA	1:48:A:THR:C	7	9.3
(1,33)	1:57:A:LEU:C	1:58:A:GLU:N	1:58:A:GLU:CA	1:58:A:GLU:C	12	9.28
(1,75)	1:154:A:LEU:C	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	10	9.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,16)	1:33:A:ALA:N	1:33:A:ALA:CA	1:33:A:ALA:C	1:34:A:ARG:N	11	9.26
(1,100)	1:180:A:HIS:N	1:180:A:HIS:CA	1:180:A:HIS:C	1:181:A:HIS:N	14	9.22
(1,82)	1:161:A:ALA:N	1:161:A:ALA:CA	1:161:A:ALA:C	1:162:A:GLU:N	13	9.22
(1,44)	1:106:A:SER:N	1:106:A:SER:CA	1:106:A:SER:C	1:107:A:CYS:N	2	9.21
(1,74)	1:154:A:LEU:N	1:154:A:LEU:CA	1:154:A:LEU:C	1:155:A:ALA:N	2	9.2
(2,8)	1:13:A:LEU:N	1:13:A:LEU:CA	1:13:A:LEU:C	1:14:A:ALA:N	12	9.18
(2,30)	1:41:A:LYS:N	1:41:A:LYS:CA	1:41:A:LYS:C	1:42:A:HIS:N	13	9.17
(2,12)	1:19:A:ARG:N	1:19:A:ARG:CA	1:19:A:ARG:C	1:20:A:ASN:N	5	9.16
(2,60)	1:120:A:VAL:N	1:120:A:VAL:CA	1:120:A:VAL:C	1:121:A:ARG:N	13	9.13
(1,52)	1:119:A:PRO:N	1:119:A:PRO:CA	1:119:A:PRO:C	1:120:A:VAL:N	10	9.1
(1,33)	1:57:A:LEU:C	1:58:A:GLU:N	1:58:A:GLU:CA	1:58:A:GLU:C	3	9.05
(1,33)	1:57:A:LEU:C	1:58:A:GLU:N	1:58:A:GLU:CA	1:58:A:GLU:C	4	9.02
(1,14)	1:19:A:ARG:N	1:19:A:ARG:CA	1:19:A:ARG:C	1:20:A:ASN:N	15	9.02
(2,74)	1:138:A:GLU:N	1:138:A:GLU:CA	1:138:A:GLU:C	1:139:A:VAL:N	14	9.0
(2,19)	1:30:A:ALA:C	1:31:A:ILE:N	1:31:A:ILE:CA	1:31:A:ILE:C	3	9.0
(2,19)	1:30:A:ALA:C	1:31:A:ILE:N	1:31:A:ILE:CA	1:31:A:ILE:C	4	8.98
(2,30)	1:41:A:LYS:N	1:41:A:LYS:CA	1:41:A:LYS:C	1:42:A:HIS:N	10	8.96
(1,47)	1:108:A:PRO:C	1:109:A:GLU:N	1:109:A:GLU:CA	1:109:A:GLU:C	15	8.96
(1,33)	1:57:A:LEU:C	1:58:A:GLU:N	1:58:A:GLU:CA	1:58:A:GLU:C	7	8.94
(2,54)	1:104:A:GLN:N	1:104:A:GLN:CA	1:104:A:GLN:C	1:105:A:GLY:N	2	8.93
(1,16)	1:33:A:ALA:N	1:33:A:ALA:CA	1:33:A:ALA:C	1:34:A:ARG:N	15	8.93
(1,44)	1:106:A:SER:N	1:106:A:SER:CA	1:106:A:SER:C	1:107:A:CYS:N	1	8.9
(1,19)	1:37:A:ARG:C	1:38:A:VAL:N	1:38:A:VAL:CA	1:38:A:VAL:C	13	8.9
(1,74)	1:154:A:LEU:N	1:154:A:LEU:CA	1:154:A:LEU:C	1:155:A:ALA:N	4	8.89
(1,52)	1:119:A:PRO:N	1:119:A:PRO:CA	1:119:A:PRO:C	1:120:A:VAL:N	12	8.88
(1,8)	1:10:A:HIS:N	1:10:A:HIS:CA	1:10:A:HIS:C	1:11:A:LYS:N	10	8.87
(2,54)	1:104:A:GLN:N	1:104:A:GLN:CA	1:104:A:GLN:C	1:105:A:GLY:N	5	8.86
(1,52)	1:119:A:PRO:N	1:119:A:PRO:CA	1:119:A:PRO:C	1:120:A:VAL:N	7	8.85
(2,94)	1:170:A:ALA:N	1:170:A:ALA:CA	1:170:A:ALA:C	1:171:A:PHE:N	8	8.84
(2,30)	1:41:A:LYS:N	1:41:A:LYS:CA	1:41:A:LYS:C	1:42:A:HIS:N	9	8.78
(1,26)	1:48:A:THR:N	1:48:A:THR:CA	1:48:A:THR:C	1:49:A:PHE:N	4	8.75
(1,100)	1:180:A:HIS:N	1:180:A:HIS:CA	1:180:A:HIS:C	1:181:A:HIS:N	13	8.69
(1,74)	1:154:A:LEU:N	1:154:A:LEU:CA	1:154:A:LEU:C	1:155:A:ALA:N	9	8.68
(1,64)	1:138:A:GLU:N	1:138:A:GLU:CA	1:138:A:GLU:C	1:139:A:VAL:N	14	8.67
(1,43)	1:105:A:GLY:C	1:106:A:SER:N	1:106:A:SER:CA	1:106:A:SER:C	2	8.67
(2,56)	1:105:A:GLY:N	1:105:A:GLY:CA	1:105:A:GLY:C	1:106:A:SER:N	1	8.66
(2,13)	1:25:A:ILE:C	1:26:A:GLY:N	1:26:A:GLY:CA	1:26:A:GLY:C	4	8.65
(2,74)	1:138:A:GLU:N	1:138:A:GLU:CA	1:138:A:GLU:C	1:139:A:VAL:N	15	8.64
(1,74)	1:154:A:LEU:N	1:154:A:LEU:CA	1:154:A:LEU:C	1:155:A:ALA:N	13	8.63
(1,33)	1:57:A:LEU:C	1:58:A:GLU:N	1:58:A:GLU:CA	1:58:A:GLU:C	14	8.63
(2,94)	1:170:A:ALA:N	1:170:A:ALA:CA	1:170:A:ALA:C	1:171:A:PHE:N	9	8.61
(1,33)	1:57:A:LEU:C	1:58:A:GLU:N	1:58:A:GLU:CA	1:58:A:GLU:C	5	8.59
(1,33)	1:57:A:LEU:C	1:58:A:GLU:N	1:58:A:GLU:CA	1:58:A:GLU:C	6	8.59
(2,56)	1:105:A:GLY:N	1:105:A:GLY:CA	1:105:A:GLY:C	1:106:A:SER:N	7	8.57
(2,37)	1:48:A:THR:C	1:49:A:PHE:N	1:49:A:PHE:CA	1:49:A:PHE:C	5	8.55
(1,54)	1:121:A:ARG:N	1:121:A:ARG:CA	1:121:A:ARG:C	1:122:A:CYS:N	2	8.55
(2,8)	1:13:A:LEU:N	1:13:A:LEU:CA	1:13:A:LEU:C	1:14:A:ALA:N	15	8.54
(1,33)	1:57:A:LEU:C	1:58:A:GLU:N	1:58:A:GLU:CA	1:58:A:GLU:C	13	8.49
(2,30)	1:41:A:LYS:N	1:41:A:LYS:CA	1:41:A:LYS:C	1:42:A:HIS:N	3	8.48
(1,47)	1:108:A:PRO:C	1:109:A:GLU:N	1:109:A:GLU:CA	1:109:A:GLU:C	6	8.48
(1,33)	1:57:A:LEU:C	1:58:A:GLU:N	1:58:A:GLU:CA	1:58:A:GLU:C	11	8.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,74)	1:154:A:LEU:N	1:154:A:LEU:CA	1:154:A:LEU:C	1:155:A:ALA:N	14	8.42
(1,52)	1:119:A:PRO:N	1:119:A:PRO:CA	1:119:A:PRO:C	1:120:A:VAL:N	8	8.36
(1,33)	1:57:A:LEU:C	1:58:A:GLU:N	1:58:A:GLU:CA	1:58:A:GLU:C	15	8.36
(2,54)	1:104:A:GLN:N	1:104:A:GLN:CA	1:104:A:GLN:C	1:105:A:GLY:N	4	8.34
(1,44)	1:106:A:SER:N	1:106:A:SER:CA	1:106:A:SER:C	1:107:A:CYS:N	3	8.34
(2,19)	1:30:A:ALA:C	1:31:A:ILE:N	1:31:A:ILE:CA	1:31:A:ILE:C	14	8.31
(1,64)	1:138:A:GLU:N	1:138:A:GLU:CA	1:138:A:GLU:C	1:139:A:VAL:N	15	8.31
(1,52)	1:119:A:PRO:N	1:119:A:PRO:CA	1:119:A:PRO:C	1:120:A:VAL:N	1	8.31
(1,74)	1:154:A:LEU:N	1:154:A:LEU:CA	1:154:A:LEU:C	1:155:A:ALA:N	12	8.3
(1,42)	1:89:A:PRO:N	1:89:A:PRO:CA	1:89:A:PRO:C	1:90:A:ALA:N	4	8.3
(1,42)	1:89:A:PRO:N	1:89:A:PRO:CA	1:89:A:PRO:C	1:90:A:ALA:N	2	8.29
(2,94)	1:170:A:ALA:N	1:170:A:ALA:CA	1:170:A:ALA:C	1:171:A:PHE:N	6	8.28
(2,90)	1:168:A:ARG:N	1:168:A:ARG:CA	1:168:A:ARG:C	1:169:A:ALA:N	1	8.28
(1,52)	1:119:A:PRO:N	1:119:A:PRO:CA	1:119:A:PRO:C	1:120:A:VAL:N	9	8.25
(2,94)	1:170:A:ALA:N	1:170:A:ALA:CA	1:170:A:ALA:C	1:171:A:PHE:N	10	8.2
(2,36)	1:48:A:THR:N	1:48:A:THR:CA	1:48:A:THR:C	1:49:A:PHE:N	3	8.2
(2,19)	1:30:A:ALA:C	1:31:A:ILE:N	1:31:A:ILE:CA	1:31:A:ILE:C	2	8.2
(2,12)	1:19:A:ARG:N	1:19:A:ARG:CA	1:19:A:ARG:C	1:20:A:ASN:N	1	8.2
(1,74)	1:154:A:LEU:N	1:154:A:LEU:CA	1:154:A:LEU:C	1:155:A:ALA:N	15	8.2
(2,54)	1:104:A:GLN:N	1:104:A:GLN:CA	1:104:A:GLN:C	1:105:A:GLY:N	3	8.18
(2,94)	1:170:A:ALA:N	1:170:A:ALA:CA	1:170:A:ALA:C	1:171:A:PHE:N	7	8.17
(2,13)	1:25:A:ILE:C	1:26:A:GLY:N	1:26:A:GLY:CA	1:26:A:GLY:C	15	8.14
(1,43)	1:105:A:GLY:C	1:106:A:SER:N	1:106:A:SER:CA	1:106:A:SER:C	5	8.13
(1,46)	1:108:A:PRO:N	1:108:A:PRO:CA	1:108:A:PRO:C	1:109:A:GLU:N	8	8.12
(1,20)	1:38:A:VAL:N	1:38:A:VAL:CA	1:38:A:VAL:C	1:39:A:THR:N	11	8.12
(1,75)	1:154:A:LEU:C	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	9	8.05
(2,54)	1:104:A:GLN:N	1:104:A:GLN:CA	1:104:A:GLN:C	1:105:A:GLY:N	1	8.03
(2,90)	1:168:A:ARG:N	1:168:A:ARG:CA	1:168:A:ARG:C	1:169:A:ALA:N	5	7.99
(1,75)	1:154:A:LEU:C	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	2	7.99
(2,19)	1:30:A:ALA:C	1:31:A:ILE:N	1:31:A:ILE:CA	1:31:A:ILE:C	15	7.97
(1,43)	1:105:A:GLY:C	1:106:A:SER:N	1:106:A:SER:CA	1:106:A:SER:C	4	7.95
(2,60)	1:120:A:VAL:N	1:120:A:VAL:CA	1:120:A:VAL:C	1:121:A:ARG:N	2	7.94
(1,47)	1:108:A:PRO:C	1:109:A:GLU:N	1:109:A:GLU:CA	1:109:A:GLU:C	9	7.93
(2,74)	1:138:A:GLU:N	1:138:A:GLU:CA	1:138:A:GLU:C	1:139:A:VAL:N	13	7.92
(1,46)	1:108:A:PRO:N	1:108:A:PRO:CA	1:108:A:PRO:C	1:109:A:GLU:N	14	7.9
(1,43)	1:105:A:GLY:C	1:106:A:SER:N	1:106:A:SER:CA	1:106:A:SER:C	1	7.83
(1,20)	1:38:A:VAL:N	1:38:A:VAL:CA	1:38:A:VAL:C	1:39:A:THR:N	15	7.83
(2,90)	1:168:A:ARG:N	1:168:A:ARG:CA	1:168:A:ARG:C	1:169:A:ALA:N	11	7.8
(2,90)	1:168:A:ARG:N	1:168:A:ARG:CA	1:168:A:ARG:C	1:169:A:ALA:N	12	7.8
(1,75)	1:154:A:LEU:C	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	11	7.76
(2,90)	1:168:A:ARG:N	1:168:A:ARG:CA	1:168:A:ARG:C	1:169:A:ALA:N	13	7.75
(2,36)	1:48:A:THR:N	1:48:A:THR:CA	1:48:A:THR:C	1:49:A:PHE:N	1	7.74
(2,90)	1:168:A:ARG:N	1:168:A:ARG:CA	1:168:A:ARG:C	1:169:A:ALA:N	2	7.73
(2,8)	1:13:A:LEU:N	1:13:A:LEU:CA	1:13:A:LEU:C	1:14:A:ALA:N	14	7.69
(2,30)	1:41:A:LYS:N	1:41:A:LYS:CA	1:41:A:LYS:C	1:42:A:HIS:N	11	7.68
(1,75)	1:154:A:LEU:C	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	12	7.67
(1,74)	1:154:A:LEU:N	1:154:A:LEU:CA	1:154:A:LEU:C	1:155:A:ALA:N	10	7.66
(2,94)	1:170:A:ALA:N	1:170:A:ALA:CA	1:170:A:ALA:C	1:171:A:PHE:N	11	7.65
(1,54)	1:121:A:ARG:N	1:121:A:ARG:CA	1:121:A:ARG:C	1:122:A:CYS:N	6	7.64
(2,60)	1:120:A:VAL:N	1:120:A:VAL:CA	1:120:A:VAL:C	1:121:A:ARG:N	14	7.62
(1,75)	1:154:A:LEU:C	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	5	7.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,64)	1:138:A:GLU:N	1:138:A:GLU:CA	1:138:A:GLU:C	1:139:A:VAL:N	13	7.58
(2,33)	1:46:A:ASP:C	1:47:A:LEU:N	1:47:A:LEU:CA	1:47:A:LEU:C	9	7.57
(1,90)	1:170:A:ALA:N	1:170:A:ALA:CA	1:170:A:ALA:C	1:171:A:PHE:N	1	7.55
(2,64)	1:122:A:CYS:N	1:122:A:CYS:CA	1:122:A:CYS:C	1:123:A:ASN:N	4	7.52
(1,75)	1:154:A:LEU:C	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	14	7.52
(1,19)	1:37:A:ARG:C	1:38:A:VAL:N	1:38:A:VAL:CA	1:38:A:VAL:C	11	7.5
(1,75)	1:154:A:LEU:C	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	6	7.48
(2,19)	1:30:A:ALA:C	1:31:A:ILE:N	1:31:A:ILE:CA	1:31:A:ILE:C	11	7.43
(1,74)	1:154:A:LEU:N	1:154:A:LEU:CA	1:154:A:LEU:C	1:155:A:ALA:N	11	7.43
(1,81)	1:160:A:GLY:C	1:161:A:ALA:N	1:161:A:ALA:CA	1:161:A:ALA:C	12	7.38
(1,75)	1:154:A:LEU:C	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	7	7.38
(1,75)	1:154:A:LEU:C	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	15	7.38
(1,81)	1:160:A:GLY:C	1:161:A:ALA:N	1:161:A:ALA:CA	1:161:A:ALA:C	11	7.37
(1,43)	1:105:A:GLY:C	1:106:A:SER:N	1:106:A:SER:CA	1:106:A:SER:C	10	7.34
(2,90)	1:168:A:ARG:N	1:168:A:ARG:CA	1:168:A:ARG:C	1:169:A:ALA:N	14	7.33
(1,75)	1:154:A:LEU:C	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	8	7.31
(2,59)	1:119:A:PRO:C	1:120:A:VAL:N	1:120:A:VAL:CA	1:120:A:VAL:C	5	7.3
(1,75)	1:154:A:LEU:C	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	1	7.27
(1,47)	1:108:A:PRO:C	1:109:A:GLU:N	1:109:A:GLU:CA	1:109:A:GLU:C	12	7.27
(2,36)	1:48:A:THR:N	1:48:A:THR:CA	1:48:A:THR:C	1:49:A:PHE:N	5	7.26
(1,6)	1:9:A:ILE:N	1:9:A:ILE:CA	1:9:A:ILE:C	1:10:A:HIS:N	10	7.26
(2,56)	1:105:A:GLY:N	1:105:A:GLY:CA	1:105:A:GLY:C	1:106:A:SER:N	10	7.25
(1,54)	1:121:A:ARG:N	1:121:A:ARG:CA	1:121:A:ARG:C	1:122:A:CYS:N	9	7.23
(1,52)	1:119:A:PRO:N	1:119:A:PRO:CA	1:119:A:PRO:C	1:120:A:VAL:N	5	7.23
(2,13)	1:25:A:ILE:C	1:26:A:GLY:N	1:26:A:GLY:CA	1:26:A:GLY:C	2	7.21
(2,33)	1:46:A:ASP:C	1:47:A:LEU:N	1:47:A:LEU:CA	1:47:A:LEU:C	4	7.2
(1,46)	1:108:A:PRO:N	1:108:A:PRO:CA	1:108:A:PRO:C	1:109:A:GLU:N	10	7.2
(1,52)	1:119:A:PRO:N	1:119:A:PRO:CA	1:119:A:PRO:C	1:120:A:VAL:N	6	7.18
(1,43)	1:105:A:GLY:C	1:106:A:SER:N	1:106:A:SER:CA	1:106:A:SER:C	9	7.18
(1,36)	1:72:A:LEU:N	1:72:A:LEU:CA	1:72:A:LEU:C	1:73:A:ASP:N	15	7.18
(2,56)	1:105:A:GLY:N	1:105:A:GLY:CA	1:105:A:GLY:C	1:106:A:SER:N	9	7.16
(1,54)	1:121:A:ARG:N	1:121:A:ARG:CA	1:121:A:ARG:C	1:122:A:CYS:N	7	7.13
(2,34)	1:47:A:LEU:N	1:47:A:LEU:CA	1:47:A:LEU:C	1:48:A:THR:N	13	7.1
(1,52)	1:119:A:PRO:N	1:119:A:PRO:CA	1:119:A:PRO:C	1:120:A:VAL:N	2	7.1
(1,6)	1:9:A:ILE:N	1:9:A:ILE:CA	1:9:A:ILE:C	1:10:A:HIS:N	9	7.09
(2,60)	1:120:A:VAL:N	1:120:A:VAL:CA	1:120:A:VAL:C	1:121:A:ARG:N	1	7.08
(2,37)	1:48:A:THR:C	1:49:A:PHE:N	1:49:A:PHE:CA	1:49:A:PHE:C	3	7.08
(2,33)	1:46:A:ASP:C	1:47:A:LEU:N	1:47:A:LEU:CA	1:47:A:LEU:C	7	7.07
(1,6)	1:9:A:ILE:N	1:9:A:ILE:CA	1:9:A:ILE:C	1:10:A:HIS:N	14	7.04
(1,75)	1:154:A:LEU:C	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	3	7.03
(1,75)	1:154:A:LEU:C	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	4	7.0
(2,90)	1:168:A:ARG:N	1:168:A:ARG:CA	1:168:A:ARG:C	1:169:A:ALA:N	6	6.97
(2,47)	1:75:A:GLY:C	1:76:A:PHE:N	1:76:A:PHE:CA	1:76:A:PHE:C	1	6.97
(1,75)	1:154:A:LEU:C	1:155:A:ALA:N	1:155:A:ALA:CA	1:155:A:ALA:C	13	6.96
(2,90)	1:168:A:ARG:N	1:168:A:ARG:CA	1:168:A:ARG:C	1:169:A:ALA:N	9	6.95
(1,26)	1:48:A:THR:N	1:48:A:THR:CA	1:48:A:THR:C	1:49:A:PHE:N	8	6.95
(1,6)	1:9:A:ILE:N	1:9:A:ILE:CA	1:9:A:ILE:C	1:10:A:HIS:N	8	6.93
(1,6)	1:9:A:ILE:N	1:9:A:ILE:CA	1:9:A:ILE:C	1:10:A:HIS:N	13	6.93
(2,74)	1:138:A:GLU:N	1:138:A:GLU:CA	1:138:A:GLU:C	1:139:A:VAL:N	12	6.92
(1,60)	1:132:A:TYR:N	1:132:A:TYR:CA	1:132:A:TYR:C	1:133:A:PHE:N	11	6.89
(1,6)	1:9:A:ILE:N	1:9:A:ILE:CA	1:9:A:ILE:C	1:10:A:HIS:N	11	6.86

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,43)	1:105:A:GLY:C	1:106:A:SER:N	1:106:A:SER:CA	1:106:A:SER:C	11	6.83
(2,90)	1:168:A:ARG:N	1:168:A:ARG:CA	1:168:A:ARG:C	1:169:A:ALA:N	4	6.82
(1,90)	1:170:A:ALA:N	1:170:A:ALA:CA	1:170:A:ALA:C	1:171:A:PHE:N	2	6.82
(1,14)	1:19:A:ARG:N	1:19:A:ARG:CA	1:19:A:ARG:C	1:20:A:ASN:N	7	6.8
(1,43)	1:105:A:GLY:C	1:106:A:SER:N	1:106:A:SER:CA	1:106:A:SER:C	6	6.79
(1,52)	1:119:A:PRO:N	1:119:A:PRO:CA	1:119:A:PRO:C	1:120:A:VAL:N	4	6.74
(2,90)	1:168:A:ARG:N	1:168:A:ARG:CA	1:168:A:ARG:C	1:169:A:ALA:N	7	6.73
(1,43)	1:105:A:GLY:C	1:106:A:SER:N	1:106:A:SER:CA	1:106:A:SER:C	7	6.72
(1,6)	1:9:A:ILE:N	1:9:A:ILE:CA	1:9:A:ILE:C	1:10:A:HIS:N	12	6.71
(1,25)	1:47:A:LEU:C	1:48:A:THR:N	1:48:A:THR:CA	1:48:A:THR:C	2	6.66
(1,6)	1:9:A:ILE:N	1:9:A:ILE:CA	1:9:A:ILE:C	1:10:A:HIS:N	7	6.66
(1,6)	1:9:A:ILE:N	1:9:A:ILE:CA	1:9:A:ILE:C	1:10:A:HIS:N	6	6.63
(1,26)	1:48:A:THR:N	1:48:A:THR:CA	1:48:A:THR:C	1:49:A:PHE:N	10	6.61
(1,64)	1:138:A:GLU:N	1:138:A:GLU:CA	1:138:A:GLU:C	1:139:A:VAL:N	12	6.59
(1,6)	1:9:A:ILE:N	1:9:A:ILE:CA	1:9:A:ILE:C	1:10:A:HIS:N	15	6.59
(2,48)	1:76:A:PHE:N	1:76:A:PHE:CA	1:76:A:PHE:C	1:77:A:LEU:N	4	6.58
(2,33)	1:46:A:ASP:C	1:47:A:LEU:N	1:47:A:LEU:CA	1:47:A:LEU:C	5	6.56
(1,63)	1:137:A:ASP:C	1:138:A:GLU:N	1:138:A:GLU:CA	1:138:A:GLU:C	4	6.54
(2,90)	1:168:A:ARG:N	1:168:A:ARG:CA	1:168:A:ARG:C	1:169:A:ALA:N	10	6.53
(1,100)	1:180:A:HIS:N	1:180:A:HIS:CA	1:180:A:HIS:C	1:181:A:HIS:N	5	6.53
(1,19)	1:37:A:ARG:C	1:38:A:VAL:N	1:38:A:VAL:CA	1:38:A:VAL:C	14	6.49
(1,54)	1:121:A:ARG:N	1:121:A:ARG:CA	1:121:A:ARG:C	1:122:A:CYS:N	8	6.47
(2,60)	1:120:A:VAL:N	1:120:A:VAL:CA	1:120:A:VAL:C	1:121:A:ARG:N	11	6.46
(1,43)	1:105:A:GLY:C	1:106:A:SER:N	1:106:A:SER:CA	1:106:A:SER:C	8	6.44
(2,59)	1:119:A:PRO:C	1:120:A:VAL:N	1:120:A:VAL:CA	1:120:A:VAL:C	7	6.43
(2,33)	1:46:A:ASP:C	1:47:A:LEU:N	1:47:A:LEU:CA	1:47:A:LEU:C	8	6.43
(1,43)	1:105:A:GLY:C	1:106:A:SER:N	1:106:A:SER:CA	1:106:A:SER:C	3	6.43
(2,90)	1:168:A:ARG:N	1:168:A:ARG:CA	1:168:A:ARG:C	1:169:A:ALA:N	8	6.41
(1,78)	1:158:A:SER:N	1:158:A:SER:CA	1:158:A:SER:C	1:159:A:LEU:N	4	6.39
(1,81)	1:160:A:GLY:C	1:161:A:ALA:N	1:161:A:ALA:CA	1:161:A:ALA:C	15	6.38
(1,25)	1:47:A:LEU:C	1:48:A:THR:N	1:48:A:THR:CA	1:48:A:THR:C	4	6.38
(1,100)	1:180:A:HIS:N	1:180:A:HIS:CA	1:180:A:HIS:C	1:181:A:HIS:N	1	6.34
(2,94)	1:170:A:ALA:N	1:170:A:ALA:CA	1:170:A:ALA:C	1:171:A:PHE:N	14	6.33
(2,64)	1:122:A:CYS:N	1:122:A:CYS:CA	1:122:A:CYS:C	1:123:A:ASN:N	3	6.32
(1,90)	1:170:A:ALA:N	1:170:A:ALA:CA	1:170:A:ALA:C	1:171:A:PHE:N	5	6.32
(1,60)	1:132:A:TYR:N	1:132:A:TYR:CA	1:132:A:TYR:C	1:133:A:PHE:N	13	6.28
(1,52)	1:119:A:PRO:N	1:119:A:PRO:CA	1:119:A:PRO:C	1:120:A:VAL:N	3	6.28
(1,6)	1:9:A:ILE:N	1:9:A:ILE:CA	1:9:A:ILE:C	1:10:A:HIS:N	3	6.27
(2,33)	1:46:A:ASP:C	1:47:A:LEU:N	1:47:A:LEU:CA	1:47:A:LEU:C	3	6.26
(2,22)	1:34:A:ARG:N	1:34:A:ARG:CA	1:34:A:ARG:C	1:35:A:LEU:N	15	6.25
(1,100)	1:180:A:HIS:N	1:180:A:HIS:CA	1:180:A:HIS:C	1:181:A:HIS:N	7	6.25
(1,47)	1:108:A:PRO:C	1:109:A:GLU:N	1:109:A:GLU:CA	1:109:A:GLU:C	10	6.23
(2,22)	1:34:A:ARG:N	1:34:A:ARG:CA	1:34:A:ARG:C	1:35:A:LEU:N	8	6.21
(1,100)	1:180:A:HIS:N	1:180:A:HIS:CA	1:180:A:HIS:C	1:181:A:HIS:N	4	6.21
(1,72)	1:153:A:ARG:N	1:153:A:ARG:CA	1:153:A:ARG:C	1:154:A:LEU:N	6	6.21
(1,100)	1:180:A:HIS:N	1:180:A:HIS:CA	1:180:A:HIS:C	1:181:A:HIS:N	9	6.2
(1,100)	1:180:A:HIS:N	1:180:A:HIS:CA	1:180:A:HIS:C	1:181:A:HIS:N	6	6.19
(1,6)	1:9:A:ILE:N	1:9:A:ILE:CA	1:9:A:ILE:C	1:10:A:HIS:N	5	6.19
(2,94)	1:170:A:ALA:N	1:170:A:ALA:CA	1:170:A:ALA:C	1:171:A:PHE:N	15	6.16
(2,36)	1:48:A:THR:N	1:48:A:THR:CA	1:48:A:THR:C	1:49:A:PHE:N	2	6.16
(1,100)	1:180:A:HIS:N	1:180:A:HIS:CA	1:180:A:HIS:C	1:181:A:HIS:N	3	6.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(2,22)	1:34:A:ARG:N	1:34:A:ARG:CA	1:34:A:ARG:C	1:35:A:LEU:N	12	6.14
(1,100)	1:180:A:HIS:N	1:180:A:HIS:CA	1:180:A:HIS:C	1:181:A:HIS:N	10	6.13
(1,46)	1:108:A:PRO:N	1:108:A:PRO:CA	1:108:A:PRO:C	1:109:A:GLU:N	1	6.12
(1,41)	1:88:A:GLU:C	1:89:A:PRO:N	1:89:A:PRO:CA	1:89:A:PRO:C	12	6.1
(2,94)	1:170:A:ALA:N	1:170:A:ALA:CA	1:170:A:ALA:C	1:171:A:PHE:N	12	6.07
(1,6)	1:9:A:ILE:N	1:9:A:ILE:CA	1:9:A:ILE:C	1:10:A:HIS:N	1	6.05
(1,63)	1:137:A:ASP:C	1:138:A:GLU:N	1:138:A:GLU:CA	1:138:A:GLU:C	3	6.03
(1,100)	1:180:A:HIS:N	1:180:A:HIS:CA	1:180:A:HIS:C	1:181:A:HIS:N	8	6.02
(1,90)	1:170:A:ALA:N	1:170:A:ALA:CA	1:170:A:ALA:C	1:171:A:PHE:N	3	6.01
(1,12)	1:13:A:LEU:N	1:13:A:LEU:CA	1:13:A:LEU:C	1:14:A:ALA:N	8	6.01
(1,72)	1:153:A:ARG:N	1:153:A:ARG:CA	1:153:A:ARG:C	1:154:A:LEU:N	9	6.0
(1,47)	1:108:A:PRO:C	1:109:A:GLU:N	1:109:A:GLU:CA	1:109:A:GLU:C	7	6.0
(1,46)	1:108:A:PRO:N	1:108:A:PRO:CA	1:108:A:PRO:C	1:109:A:GLU:N	4	6.0
(2,56)	1:105:A:GLY:N	1:105:A:GLY:CA	1:105:A:GLY:C	1:106:A:SER:N	6	5.99
(1,100)	1:180:A:HIS:N	1:180:A:HIS:CA	1:180:A:HIS:C	1:181:A:HIS:N	2	5.99
(2,60)	1:120:A:VAL:N	1:120:A:VAL:CA	1:120:A:VAL:C	1:121:A:ARG:N	3	5.98
(1,43)	1:105:A:GLY:C	1:106:A:SER:N	1:106:A:SER:CA	1:106:A:SER:C	12	5.98
(1,37)	1:75:A:GLY:C	1:76:A:PHE:N	1:76:A:PHE:CA	1:76:A:PHE:C	15	5.98
(2,90)	1:168:A:ARG:N	1:168:A:ARG:CA	1:168:A:ARG:C	1:169:A:ALA:N	15	5.95
(1,81)	1:160:A:GLY:C	1:161:A:ALA:N	1:161:A:ALA:CA	1:161:A:ALA:C	13	5.93
(2,59)	1:119:A:PRO:C	1:120:A:VAL:N	1:120:A:VAL:CA	1:120:A:VAL:C	8	5.92
(1,26)	1:48:A:THR:N	1:48:A:THR:CA	1:48:A:THR:C	1:49:A:PHE:N	7	5.92
(1,90)	1:170:A:ALA:N	1:170:A:ALA:CA	1:170:A:ALA:C	1:171:A:PHE:N	4	5.91
(1,6)	1:9:A:ILE:N	1:9:A:ILE:CA	1:9:A:ILE:C	1:10:A:HIS:N	4	5.91
(1,6)	1:9:A:ILE:N	1:9:A:ILE:CA	1:9:A:ILE:C	1:10:A:HIS:N	2	5.88
(1,50)	1:113:A:GLY:N	1:113:A:GLY:CA	1:113:A:GLY:C	1:114:A:VAL:N	5	5.87
(1,82)	1:161:A:ALA:N	1:161:A:ALA:CA	1:161:A:ALA:C	1:162:A:GLU:N	14	5.86
(1,35)	1:71:A:GLU:C	1:72:A:LEU:N	1:72:A:LEU:CA	1:72:A:LEU:C	13	5.86
(1,88)	1:169:A:ALA:N	1:169:A:ALA:CA	1:169:A:ALA:C	1:170:A:ALA:N	8	5.83
(1,54)	1:121:A:ARG:N	1:121:A:ARG:CA	1:121:A:ARG:C	1:122:A:CYS:N	10	5.82
(1,88)	1:169:A:ALA:N	1:169:A:ALA:CA	1:169:A:ALA:C	1:170:A:ALA:N	7	5.8
(1,47)	1:108:A:PRO:C	1:109:A:GLU:N	1:109:A:GLU:CA	1:109:A:GLU:C	8	5.8
(1,88)	1:169:A:ALA:N	1:169:A:ALA:CA	1:169:A:ALA:C	1:170:A:ALA:N	9	5.78
(1,72)	1:153:A:ARG:N	1:153:A:ARG:CA	1:153:A:ARG:C	1:154:A:LEU:N	2	5.77
(2,22)	1:34:A:ARG:N	1:34:A:ARG:CA	1:34:A:ARG:C	1:35:A:LEU:N	7	5.74
(1,88)	1:169:A:ALA:N	1:169:A:ALA:CA	1:169:A:ALA:C	1:170:A:ALA:N	10	5.72
(2,60)	1:120:A:VAL:N	1:120:A:VAL:CA	1:120:A:VAL:C	1:121:A:ARG:N	15	5.69
(2,22)	1:34:A:ARG:N	1:34:A:ARG:CA	1:34:A:ARG:C	1:35:A:LEU:N	13	5.69
(1,102)	1:182:A:HIS:N	1:182:A:HIS:CA	1:182:A:HIS:C	1:183:A:HIS:N	3	5.69
(1,82)	1:161:A:ALA:N	1:161:A:ALA:CA	1:161:A:ALA:C	1:162:A:GLU:N	11	5.67
(1,61)	1:136:A:ALA:C	1:137:A:ASP:N	1:137:A:ASP:CA	1:137:A:ASP:C	14	5.67
(1,88)	1:169:A:ALA:N	1:169:A:ALA:CA	1:169:A:ALA:C	1:170:A:ALA:N	5	5.65
(2,48)	1:76:A:PHE:N	1:76:A:PHE:CA	1:76:A:PHE:C	1:77:A:LEU:N	5	5.61
(1,12)	1:13:A:LEU:N	1:13:A:LEU:CA	1:13:A:LEU:C	1:14:A:ALA:N	10	5.61
(2,48)	1:76:A:PHE:N	1:76:A:PHE:CA	1:76:A:PHE:C	1:77:A:LEU:N	2	5.6
(2,33)	1:46:A:ASP:C	1:47:A:LEU:N	1:47:A:LEU:CA	1:47:A:LEU:C	2	5.6
(2,59)	1:119:A:PRO:C	1:120:A:VAL:N	1:120:A:VAL:CA	1:120:A:VAL:C	10	5.58
(1,47)	1:108:A:PRO:C	1:109:A:GLU:N	1:109:A:GLU:CA	1:109:A:GLU:C	13	5.57
(2,22)	1:34:A:ARG:N	1:34:A:ARG:CA	1:34:A:ARG:C	1:35:A:LEU:N	10	5.55
(2,33)	1:46:A:ASP:C	1:47:A:LEU:N	1:47:A:LEU:CA	1:47:A:LEU:C	6	5.53
(1,81)	1:160:A:GLY:C	1:161:A:ALA:N	1:161:A:ALA:CA	1:161:A:ALA:C	14	5.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,46)	1:108:A:PRO:N	1:108:A:PRO:CA	1:108:A:PRO:C	1:109:A:GLU:N	2	5.5
(1,12)	1:13:A:LEU:N	1:13:A:LEU:CA	1:13:A:LEU:C	1:14:A:ALA:N	7	5.49
(2,26)	1:38:A:VAL:N	1:38:A:VAL:CA	1:38:A:VAL:C	1:39:A:THR:N	14	5.48
(2,12)	1:19:A:ARG:N	1:19:A:ARG:CA	1:19:A:ARG:C	1:20:A:ASN:N	12	5.48
(1,25)	1:47:A:LEU:C	1:48:A:THR:N	1:48:A:THR:CA	1:48:A:THR:C	5	5.48
(1,72)	1:153:A:ARG:N	1:153:A:ARG:CA	1:153:A:ARG:C	1:154:A:LEU:N	10	5.47
(2,59)	1:119:A:PRO:C	1:120:A:VAL:N	1:120:A:VAL:CA	1:120:A:VAL:C	6	5.46
(2,68)	1:130:A:TRP:N	1:130:A:TRP:CA	1:130:A:TRP:C	1:131:A:ASP:N	5	5.45
(2,58)	1:113:A:GLY:N	1:113:A:GLY:CA	1:113:A:GLY:C	1:114:A:VAL:N	11	5.45
(2,33)	1:46:A:ASP:C	1:47:A:LEU:N	1:47:A:LEU:CA	1:47:A:LEU:C	1	5.45
(1,90)	1:170:A:ALA:N	1:170:A:ALA:CA	1:170:A:ALA:C	1:171:A:PHE:N	13	5.45
(1,38)	1:76:A:PHE:N	1:76:A:PHE:CA	1:76:A:PHE:C	1:77:A:LEU:N	4	5.44
(1,58)	1:129:A:ILE:N	1:129:A:ILE:CA	1:129:A:ILE:C	1:130:A:TRP:N	11	5.43
(1,78)	1:158:A:SER:N	1:158:A:SER:CA	1:158:A:SER:C	1:159:A:LEU:N	3	5.42
(2,64)	1:122:A:CYS:N	1:122:A:CYS:CA	1:122:A:CYS:C	1:123:A:ASN:N	1	5.41
(2,22)	1:34:A:ARG:N	1:34:A:ARG:CA	1:34:A:ARG:C	1:35:A:LEU:N	6	5.4
(1,47)	1:108:A:PRO:C	1:109:A:GLU:N	1:109:A:GLU:CA	1:109:A:GLU:C	14	5.4
(2,34)	1:47:A:LEU:N	1:47:A:LEU:CA	1:47:A:LEU:C	1:48:A:THR:N	12	5.38
(2,22)	1:34:A:ARG:N	1:34:A:ARG:CA	1:34:A:ARG:C	1:35:A:LEU:N	11	5.38
(1,43)	1:105:A:GLY:C	1:106:A:SER:N	1:106:A:SER:CA	1:106:A:SER:C	13	5.37
(1,88)	1:169:A:ALA:N	1:169:A:ALA:CA	1:169:A:ALA:C	1:170:A:ALA:N	3	5.36
(1,88)	1:169:A:ALA:N	1:169:A:ALA:CA	1:169:A:ALA:C	1:170:A:ALA:N	1	5.35
(1,25)	1:47:A:LEU:C	1:48:A:THR:N	1:48:A:THR:CA	1:48:A:THR:C	1	5.35
(2,30)	1:41:A:LYS:N	1:41:A:LYS:CA	1:41:A:LYS:C	1:42:A:HIS:N	5	5.33
(2,59)	1:119:A:PRO:C	1:120:A:VAL:N	1:120:A:VAL:CA	1:120:A:VAL:C	9	5.32
(2,111)	1:183:A:HIS:C	1:184:A:HIS:N	1:184:A:HIS:CA	1:184:A:HIS:C	13	5.31
(1,88)	1:169:A:ALA:N	1:169:A:ALA:CA	1:169:A:ALA:C	1:170:A:ALA:N	6	5.29
(1,61)	1:136:A:ALA:C	1:137:A:ASP:N	1:137:A:ASP:CA	1:137:A:ASP:C	13	5.28
(1,44)	1:106:A:SER:N	1:106:A:SER:CA	1:106:A:SER:C	1:107:A:CYS:N	9	5.28
(1,12)	1:13:A:LEU:N	1:13:A:LEU:CA	1:13:A:LEU:C	1:14:A:ALA:N	1	5.27
(1,88)	1:169:A:ALA:N	1:169:A:ALA:CA	1:169:A:ALA:C	1:170:A:ALA:N	2	5.26
(1,78)	1:158:A:SER:N	1:158:A:SER:CA	1:158:A:SER:C	1:159:A:LEU:N	5	5.26
(1,72)	1:153:A:ARG:N	1:153:A:ARG:CA	1:153:A:ARG:C	1:154:A:LEU:N	4	5.26
(1,12)	1:13:A:LEU:N	1:13:A:LEU:CA	1:13:A:LEU:C	1:14:A:ALA:N	3	5.26
(2,59)	1:119:A:PRO:C	1:120:A:VAL:N	1:120:A:VAL:CA	1:120:A:VAL:C	4	5.24
(1,72)	1:153:A:ARG:N	1:153:A:ARG:CA	1:153:A:ARG:C	1:154:A:LEU:N	8	5.2
(2,90)	1:168:A:ARG:N	1:168:A:ARG:CA	1:168:A:ARG:C	1:169:A:ALA:N	3	5.19
(1,88)	1:169:A:ALA:N	1:169:A:ALA:CA	1:169:A:ALA:C	1:170:A:ALA:N	4	5.19
(1,72)	1:153:A:ARG:N	1:153:A:ARG:CA	1:153:A:ARG:C	1:154:A:LEU:N	7	5.19
(1,41)	1:88:A:GLU:C	1:89:A:PRO:N	1:89:A:PRO:CA	1:89:A:PRO:C	15	5.18
(1,43)	1:105:A:GLY:C	1:106:A:SER:N	1:106:A:SER:CA	1:106:A:SER:C	14	5.13
(2,62)	1:121:A:ARG:N	1:121:A:ARG:CA	1:121:A:ARG:C	1:122:A:CYS:N	1	5.11
(2,34)	1:47:A:LEU:N	1:47:A:LEU:CA	1:47:A:LEU:C	1:48:A:THR:N	11	5.11
(1,44)	1:106:A:SER:N	1:106:A:SER:CA	1:106:A:SER:C	1:107:A:CYS:N	6	5.11
(1,99)	1:179:A:GLU:C	1:180:A:HIS:N	1:180:A:HIS:CA	1:180:A:HIS:C	8	5.1
(1,61)	1:136:A:ALA:C	1:137:A:ASP:N	1:137:A:ASP:CA	1:137:A:ASP:C	15	5.1
(2,35)	1:47:A:LEU:C	1:48:A:THR:N	1:48:A:THR:CA	1:48:A:THR:C	12	5.06
(2,22)	1:34:A:ARG:N	1:34:A:ARG:CA	1:34:A:ARG:C	1:35:A:LEU:N	14	5.05
(1,78)	1:158:A:SER:N	1:158:A:SER:CA	1:158:A:SER:C	1:159:A:LEU:N	8	5.03
(2,35)	1:47:A:LEU:C	1:48:A:THR:N	1:48:A:THR:CA	1:48:A:THR:C	15	5.02
(2,14)	1:26:A:GLY:N	1:26:A:GLY:CA	1:26:A:GLY:C	1:27:A:GLY:N	11	5.01

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,88)	1:169:A:ALA:N	1:169:A:ALA:CA	1:169:A:ALA:C	1:170:A:ALA:N	14	5.0
(1,72)	1:153:A:ARG:N	1:153:A:ARG:CA	1:153:A:ARG:C	1:154:A:LEU:N	5	5.0
(2,54)	1:104:A:GLN:N	1:104:A:GLN:CA	1:104:A:GLN:C	1:105:A:GLY:N	14	4.97
(2,22)	1:34:A:ARG:N	1:34:A:ARG:CA	1:34:A:ARG:C	1:35:A:LEU:N	9	4.96
(1,61)	1:136:A:ALA:C	1:137:A:ASP:N	1:137:A:ASP:CA	1:137:A:ASP:C	2	4.96
(2,35)	1:47:A:LEU:C	1:48:A:THR:N	1:48:A:THR:CA	1:48:A:THR:C	14	4.94
(2,30)	1:41:A:LYS:N	1:41:A:LYS:CA	1:41:A:LYS:C	1:42:A:HIS:N	2	4.9
(1,46)	1:108:A:PRO:N	1:108:A:PRO:CA	1:108:A:PRO:C	1:109:A:GLU:N	11	4.9
(1,42)	1:89:A:PRO:N	1:89:A:PRO:CA	1:89:A:PRO:C	1:90:A:ALA:N	14	4.88
(2,12)	1:19:A:ARG:N	1:19:A:ARG:CA	1:19:A:ARG:C	1:20:A:ASN:N	15	4.86
(1,78)	1:158:A:SER:N	1:158:A:SER:CA	1:158:A:SER:C	1:159:A:LEU:N	10	4.86
(2,77)	1:153:A:ARG:C	1:154:A:LEU:N	1:154:A:LEU:CA	1:154:A:LEU:C	3	4.85
(1,61)	1:136:A:ALA:C	1:137:A:ASP:N	1:137:A:ASP:CA	1:137:A:ASP:C	12	4.82
(1,58)	1:129:A:ILE:N	1:129:A:ILE:CA	1:129:A:ILE:C	1:130:A:TRP:N	12	4.82
(1,90)	1:170:A:ALA:N	1:170:A:ALA:CA	1:170:A:ALA:C	1:171:A:PHE:N	8	4.8
(1,78)	1:158:A:SER:N	1:158:A:SER:CA	1:158:A:SER:C	1:159:A:LEU:N	2	4.8
(1,78)	1:158:A:SER:N	1:158:A:SER:CA	1:158:A:SER:C	1:159:A:LEU:N	7	4.79
(1,46)	1:108:A:PRO:N	1:108:A:PRO:CA	1:108:A:PRO:C	1:109:A:GLU:N	3	4.78
(1,78)	1:158:A:SER:N	1:158:A:SER:CA	1:158:A:SER:C	1:159:A:LEU:N	6	4.77
(1,88)	1:169:A:ALA:N	1:169:A:ALA:CA	1:169:A:ALA:C	1:170:A:ALA:N	15	4.75
(1,78)	1:158:A:SER:N	1:158:A:SER:CA	1:158:A:SER:C	1:159:A:LEU:N	9	4.75
(1,88)	1:169:A:ALA:N	1:169:A:ALA:CA	1:169:A:ALA:C	1:170:A:ALA:N	12	4.74
(2,47)	1:75:A:GLY:C	1:76:A:PHE:N	1:76:A:PHE:CA	1:76:A:PHE:C	5	4.73
(1,72)	1:153:A:ARG:N	1:153:A:ARG:CA	1:153:A:ARG:C	1:154:A:LEU:N	1	4.72
(2,36)	1:48:A:THR:N	1:48:A:THR:CA	1:48:A:THR:C	1:49:A:PHE:N	4	4.71
(2,35)	1:47:A:LEU:C	1:48:A:THR:N	1:48:A:THR:CA	1:48:A:THR:C	13	4.71
(1,54)	1:121:A:ARG:N	1:121:A:ARG:CA	1:121:A:ARG:C	1:122:A:CYS:N	3	4.69
(1,72)	1:153:A:ARG:N	1:153:A:ARG:CA	1:153:A:ARG:C	1:154:A:LEU:N	3	4.68
(1,99)	1:179:A:GLU:C	1:180:A:HIS:N	1:180:A:HIS:CA	1:180:A:HIS:C	2	4.67
(1,72)	1:153:A:ARG:N	1:153:A:ARG:CA	1:153:A:ARG:C	1:154:A:LEU:N	11	4.67
(2,34)	1:47:A:LEU:N	1:47:A:LEU:CA	1:47:A:LEU:C	1:48:A:THR:N	14	4.66
(1,46)	1:108:A:PRO:N	1:108:A:PRO:CA	1:108:A:PRO:C	1:109:A:GLU:N	13	4.66
(1,11)	1:12:A:ILE:C	1:13:A:LEU:N	1:13:A:LEU:CA	1:13:A:LEU:C	3	4.66
(1,61)	1:136:A:ALA:C	1:137:A:ASP:N	1:137:A:ASP:CA	1:137:A:ASP:C	11	4.61
(2,30)	1:41:A:LYS:N	1:41:A:LYS:CA	1:41:A:LYS:C	1:42:A:HIS:N	1	4.59
(2,47)	1:75:A:GLY:C	1:76:A:PHE:N	1:76:A:PHE:CA	1:76:A:PHE:C	3	4.58
(1,58)	1:129:A:ILE:N	1:129:A:ILE:CA	1:129:A:ILE:C	1:130:A:TRP:N	14	4.58
(1,90)	1:170:A:ALA:N	1:170:A:ALA:CA	1:170:A:ALA:C	1:171:A:PHE:N	9	4.57
(1,72)	1:153:A:ARG:N	1:153:A:ARG:CA	1:153:A:ARG:C	1:154:A:LEU:N	13	4.57
(2,77)	1:153:A:ARG:C	1:154:A:LEU:N	1:154:A:LEU:CA	1:154:A:LEU:C	7	4.56
(1,11)	1:12:A:ILE:C	1:13:A:LEU:N	1:13:A:LEU:CA	1:13:A:LEU:C	1	4.56
(2,58)	1:113:A:GLY:N	1:113:A:GLY:CA	1:113:A:GLY:C	1:114:A:VAL:N	14	4.55
(2,60)	1:120:A:VAL:N	1:120:A:VAL:CA	1:120:A:VAL:C	1:121:A:ARG:N	4	4.54
(1,88)	1:169:A:ALA:N	1:169:A:ALA:CA	1:169:A:ALA:C	1:170:A:ALA:N	11	4.5
(1,41)	1:88:A:GLU:C	1:89:A:PRO:N	1:89:A:PRO:CA	1:89:A:PRO:C	13	4.47
(1,38)	1:76:A:PHE:N	1:76:A:PHE:CA	1:76:A:PHE:C	1:77:A:LEU:N	5	4.47
(2,35)	1:47:A:LEU:C	1:48:A:THR:N	1:48:A:THR:CA	1:48:A:THR:C	11	4.46
(1,38)	1:76:A:PHE:N	1:76:A:PHE:CA	1:76:A:PHE:C	1:77:A:LEU:N	2	4.46
(2,22)	1:34:A:ARG:N	1:34:A:ARG:CA	1:34:A:ARG:C	1:35:A:LEU:N	3	4.43
(1,99)	1:179:A:GLU:C	1:180:A:HIS:N	1:180:A:HIS:CA	1:180:A:HIS:C	7	4.42
(1,99)	1:179:A:GLU:C	1:180:A:HIS:N	1:180:A:HIS:CA	1:180:A:HIS:C	4	4.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(2,77)	1:153:A:ARG:C	1:154:A:LEU:N	1:154:A:LEU:CA	1:154:A:LEU:C	8	4.39
(1,54)	1:121:A:ARG:N	1:121:A:ARG:CA	1:121:A:ARG:C	1:122:A:CYS:N	4	4.39
(1,42)	1:89:A:PRO:N	1:89:A:PRO:CA	1:89:A:PRO:C	1:90:A:ALA:N	11	4.39
(2,77)	1:153:A:ARG:C	1:154:A:LEU:N	1:154:A:LEU:CA	1:154:A:LEU:C	1	4.38
(2,77)	1:153:A:ARG:C	1:154:A:LEU:N	1:154:A:LEU:CA	1:154:A:LEU:C	14	4.38
(1,102)	1:182:A:HIS:N	1:182:A:HIS:CA	1:182:A:HIS:C	1:183:A:HIS:N	2	4.37
(2,22)	1:34:A:ARG:N	1:34:A:ARG:CA	1:34:A:ARG:C	1:35:A:LEU:N	4	4.36
(1,11)	1:12:A:ILE:C	1:13:A:LEU:N	1:13:A:LEU:CA	1:13:A:LEU:C	2	4.36
(2,77)	1:153:A:ARG:C	1:154:A:LEU:N	1:154:A:LEU:CA	1:154:A:LEU:C	5	4.35
(2,54)	1:104:A:GLN:N	1:104:A:GLN:CA	1:104:A:GLN:C	1:105:A:GLY:N	13	4.31
(2,47)	1:75:A:GLY:C	1:76:A:PHE:N	1:76:A:PHE:CA	1:76:A:PHE:C	8	4.29
(2,74)	1:138:A:GLU:N	1:138:A:GLU:CA	1:138:A:GLU:C	1:139:A:VAL:N	11	4.28
(1,90)	1:170:A:ALA:N	1:170:A:ALA:CA	1:170:A:ALA:C	1:171:A:PHE:N	6	4.25
(1,72)	1:153:A:ARG:N	1:153:A:ARG:CA	1:153:A:ARG:C	1:154:A:LEU:N	14	4.25
(2,68)	1:130:A:TRP:N	1:130:A:TRP:CA	1:130:A:TRP:C	1:131:A:ASP:N	8	4.21
(1,99)	1:179:A:GLU:C	1:180:A:HIS:N	1:180:A:HIS:CA	1:180:A:HIS:C	3	4.21
(1,41)	1:88:A:GLU:C	1:89:A:PRO:N	1:89:A:PRO:CA	1:89:A:PRO:C	11	4.21
(1,99)	1:179:A:GLU:C	1:180:A:HIS:N	1:180:A:HIS:CA	1:180:A:HIS:C	9	4.18
(1,90)	1:170:A:ALA:N	1:170:A:ALA:CA	1:170:A:ALA:C	1:171:A:PHE:N	10	4.17
(1,90)	1:170:A:ALA:N	1:170:A:ALA:CA	1:170:A:ALA:C	1:171:A:PHE:N	7	4.14
(1,30)	1:56:A:GLU:N	1:56:A:GLU:CA	1:56:A:GLU:C	1:57:A:LEU:N	7	4.14
(2,68)	1:130:A:TRP:N	1:130:A:TRP:CA	1:130:A:TRP:C	1:131:A:ASP:N	7	4.13
(1,99)	1:179:A:GLU:C	1:180:A:HIS:N	1:180:A:HIS:CA	1:180:A:HIS:C	6	4.13
(1,46)	1:108:A:PRO:N	1:108:A:PRO:CA	1:108:A:PRO:C	1:109:A:GLU:N	12	4.13
(1,46)	1:108:A:PRO:N	1:108:A:PRO:CA	1:108:A:PRO:C	1:109:A:GLU:N	5	4.11
(2,77)	1:153:A:ARG:C	1:154:A:LEU:N	1:154:A:LEU:CA	1:154:A:LEU:C	12	4.1
(1,72)	1:153:A:ARG:N	1:153:A:ARG:CA	1:153:A:ARG:C	1:154:A:LEU:N	15	4.09
(2,77)	1:153:A:ARG:C	1:154:A:LEU:N	1:154:A:LEU:CA	1:154:A:LEU:C	15	4.07
(2,47)	1:75:A:GLY:C	1:76:A:PHE:N	1:76:A:PHE:CA	1:76:A:PHE:C	7	4.06
(1,11)	1:12:A:ILE:C	1:13:A:LEU:N	1:13:A:LEU:CA	1:13:A:LEU:C	5	4.05
(1,43)	1:105:A:GLY:C	1:106:A:SER:N	1:106:A:SER:CA	1:106:A:SER:C	15	4.04
(1,30)	1:56:A:GLU:N	1:56:A:GLU:CA	1:56:A:GLU:C	1:57:A:LEU:N	12	4.04
(2,77)	1:153:A:ARG:C	1:154:A:LEU:N	1:154:A:LEU:CA	1:154:A:LEU:C	2	4.0
(2,58)	1:113:A:GLY:N	1:113:A:GLY:CA	1:113:A:GLY:C	1:114:A:VAL:N	15	4.0
(2,22)	1:34:A:ARG:N	1:34:A:ARG:CA	1:34:A:ARG:C	1:35:A:LEU:N	5	4.0
(1,25)	1:47:A:LEU:C	1:48:A:THR:N	1:48:A:THR:CA	1:48:A:THR:C	10	4.0
(2,48)	1:76:A:PHE:N	1:76:A:PHE:CA	1:76:A:PHE:C	1:77:A:LEU:N	10	3.99
(2,33)	1:46:A:ASP:C	1:47:A:LEU:N	1:47:A:LEU:CA	1:47:A:LEU:C	10	3.99
(1,94)	1:173:A:SER:N	1:173:A:SER:CA	1:173:A:SER:C	1:174:A:ARG:N	12	3.97
(2,22)	1:34:A:ARG:N	1:34:A:ARG:CA	1:34:A:ARG:C	1:35:A:LEU:N	2	3.95
(1,102)	1:182:A:HIS:N	1:182:A:HIS:CA	1:182:A:HIS:C	1:183:A:HIS:N	5	3.95
(1,64)	1:138:A:GLU:N	1:138:A:GLU:CA	1:138:A:GLU:C	1:139:A:VAL:N	11	3.94
(1,41)	1:88:A:GLU:C	1:89:A:PRO:N	1:89:A:PRO:CA	1:89:A:PRO:C	14	3.94
(2,77)	1:153:A:ARG:C	1:154:A:LEU:N	1:154:A:LEU:CA	1:154:A:LEU:C	13	3.93
(1,44)	1:106:A:SER:N	1:106:A:SER:CA	1:106:A:SER:C	1:107:A:CYS:N	7	3.92
(2,68)	1:130:A:TRP:N	1:130:A:TRP:CA	1:130:A:TRP:C	1:131:A:ASP:N	9	3.91
(1,88)	1:169:A:ALA:N	1:169:A:ALA:CA	1:169:A:ALA:C	1:170:A:ALA:N	13	3.91
(1,30)	1:56:A:GLU:N	1:56:A:GLU:CA	1:56:A:GLU:C	1:57:A:LEU:N	9	3.91
(1,94)	1:173:A:SER:N	1:173:A:SER:CA	1:173:A:SER:C	1:174:A:ARG:N	4	3.88
(1,99)	1:179:A:GLU:C	1:180:A:HIS:N	1:180:A:HIS:CA	1:180:A:HIS:C	10	3.86
(1,78)	1:158:A:SER:N	1:158:A:SER:CA	1:158:A:SER:C	1:159:A:LEU:N	1	3.86

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,11)	1:12:A:ILE:C	1:13:A:LEU:N	1:13:A:LEU:CA	1:13:A:LEU:C	4	3.82
(2,77)	1:153:A:ARG:C	1:154:A:LEU:N	1:154:A:LEU:CA	1:154:A:LEU:C	4	3.81
(1,58)	1:129:A:ILE:N	1:129:A:ILE:CA	1:129:A:ILE:C	1:130:A:TRP:N	4	3.79
(1,58)	1:129:A:ILE:N	1:129:A:ILE:CA	1:129:A:ILE:C	1:130:A:TRP:N	13	3.78
(2,77)	1:153:A:ARG:C	1:154:A:LEU:N	1:154:A:LEU:CA	1:154:A:LEU:C	11	3.77
(2,68)	1:130:A:TRP:N	1:130:A:TRP:CA	1:130:A:TRP:C	1:131:A:ASP:N	10	3.77
(1,22)	1:41:A:LYS:N	1:41:A:LYS:CA	1:41:A:LYS:C	1:42:A:HIS:N	14	3.77
(2,68)	1:130:A:TRP:N	1:130:A:TRP:CA	1:130:A:TRP:C	1:131:A:ASP:N	6	3.73
(1,26)	1:48:A:THR:N	1:48:A:THR:CA	1:48:A:THR:C	1:49:A:PHE:N	6	3.73
(2,59)	1:119:A:PRO:C	1:120:A:VAL:N	1:120:A:VAL:CA	1:120:A:VAL:C	1	3.71
(1,94)	1:173:A:SER:N	1:173:A:SER:CA	1:173:A:SER:C	1:174:A:ARG:N	5	3.7
(1,42)	1:89:A:PRO:N	1:89:A:PRO:CA	1:89:A:PRO:C	1:90:A:ALA:N	6	3.68
(1,72)	1:153:A:ARG:N	1:153:A:ARG:CA	1:153:A:ARG:C	1:154:A:LEU:N	12	3.67
(2,77)	1:153:A:ARG:C	1:154:A:LEU:N	1:154:A:LEU:CA	1:154:A:LEU:C	9	3.65
(2,72)	1:137:A:ASP:N	1:137:A:ASP:CA	1:137:A:ASP:C	1:138:A:GLU:N	4	3.65
(2,22)	1:34:A:ARG:N	1:34:A:ARG:CA	1:34:A:ARG:C	1:35:A:LEU:N	1	3.65
(1,20)	1:38:A:VAL:N	1:38:A:VAL:CA	1:38:A:VAL:C	1:39:A:THR:N	14	3.65
(1,99)	1:179:A:GLU:C	1:180:A:HIS:N	1:180:A:HIS:CA	1:180:A:HIS:C	1	3.62
(2,77)	1:153:A:ARG:C	1:154:A:LEU:N	1:154:A:LEU:CA	1:154:A:LEU:C	6	3.61
(1,90)	1:170:A:ALA:N	1:170:A:ALA:CA	1:170:A:ALA:C	1:171:A:PHE:N	11	3.61
(1,30)	1:56:A:GLU:N	1:56:A:GLU:CA	1:56:A:GLU:C	1:57:A:LEU:N	6	3.57
(2,54)	1:104:A:GLN:N	1:104:A:GLN:CA	1:104:A:GLN:C	1:105:A:GLY:N	12	3.55
(1,44)	1:106:A:SER:N	1:106:A:SER:CA	1:106:A:SER:C	1:107:A:CYS:N	10	3.55
(1,42)	1:89:A:PRO:N	1:89:A:PRO:CA	1:89:A:PRO:C	1:90:A:ALA:N	8	3.55
(1,12)	1:13:A:LEU:N	1:13:A:LEU:CA	1:13:A:LEU:C	1:14:A:ALA:N	9	3.54
(1,58)	1:129:A:ILE:N	1:129:A:ILE:CA	1:129:A:ILE:C	1:130:A:TRP:N	15	3.52
(2,68)	1:130:A:TRP:N	1:130:A:TRP:CA	1:130:A:TRP:C	1:131:A:ASP:N	3	3.51
(1,30)	1:56:A:GLU:N	1:56:A:GLU:CA	1:56:A:GLU:C	1:57:A:LEU:N	8	3.51
(1,63)	1:137:A:ASP:C	1:138:A:GLU:N	1:138:A:GLU:CA	1:138:A:GLU:C	6	3.47
(1,46)	1:108:A:PRO:N	1:108:A:PRO:CA	1:108:A:PRO:C	1:109:A:GLU:N	15	3.45
(1,42)	1:89:A:PRO:N	1:89:A:PRO:CA	1:89:A:PRO:C	1:90:A:ALA:N	5	3.44
(1,94)	1:173:A:SER:N	1:173:A:SER:CA	1:173:A:SER:C	1:174:A:ARG:N	8	3.43
(1,94)	1:173:A:SER:N	1:173:A:SER:CA	1:173:A:SER:C	1:174:A:ARG:N	7	3.42
(1,37)	1:75:A:GLY:C	1:76:A:PHE:N	1:76:A:PHE:CA	1:76:A:PHE:C	1	3.42
(1,30)	1:56:A:GLU:N	1:56:A:GLU:CA	1:56:A:GLU:C	1:57:A:LEU:N	14	3.41
(1,63)	1:137:A:ASP:C	1:138:A:GLU:N	1:138:A:GLU:CA	1:138:A:GLU:C	10	3.39
(1,12)	1:13:A:LEU:N	1:13:A:LEU:CA	1:13:A:LEU:C	1:14:A:ALA:N	5	3.39
(2,47)	1:75:A:GLY:C	1:76:A:PHE:N	1:76:A:PHE:CA	1:76:A:PHE:C	2	3.37
(1,99)	1:179:A:GLU:C	1:180:A:HIS:N	1:180:A:HIS:CA	1:180:A:HIS:C	5	3.37
(2,59)	1:119:A:PRO:C	1:120:A:VAL:N	1:120:A:VAL:CA	1:120:A:VAL:C	2	3.36
(1,94)	1:173:A:SER:N	1:173:A:SER:CA	1:173:A:SER:C	1:174:A:ARG:N	6	3.36
(2,54)	1:104:A:GLN:N	1:104:A:GLN:CA	1:104:A:GLN:C	1:105:A:GLY:N	15	3.35
(1,94)	1:173:A:SER:N	1:173:A:SER:CA	1:173:A:SER:C	1:174:A:ARG:N	3	3.35
(1,42)	1:89:A:PRO:N	1:89:A:PRO:CA	1:89:A:PRO:C	1:90:A:ALA:N	10	3.32
(2,59)	1:119:A:PRO:C	1:120:A:VAL:N	1:120:A:VAL:CA	1:120:A:VAL:C	3	3.31
(1,37)	1:75:A:GLY:C	1:76:A:PHE:N	1:76:A:PHE:CA	1:76:A:PHE:C	12	3.29
(1,12)	1:13:A:LEU:N	1:13:A:LEU:CA	1:13:A:LEU:C	1:14:A:ALA:N	2	3.29
(1,60)	1:132:A:TYR:N	1:132:A:TYR:CA	1:132:A:TYR:C	1:133:A:PHE:N	5	3.28
(1,30)	1:56:A:GLU:N	1:56:A:GLU:CA	1:56:A:GLU:C	1:57:A:LEU:N	10	3.28
(2,48)	1:76:A:PHE:N	1:76:A:PHE:CA	1:76:A:PHE:C	1:77:A:LEU:N	6	3.27
(2,47)	1:75:A:GLY:C	1:76:A:PHE:N	1:76:A:PHE:CA	1:76:A:PHE:C	10	3.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,32)	1:57:A:LEU:N	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:C	1:58:A:GLU:N	12	3.24
(2,58)	1:113:A:GLY:N	1:113:A:GLY:CA	1:113:A:GLY:C	1:114:A:VAL:N	13	3.23
(1,32)	1:57:A:LEU:N	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:C	1:58:A:GLU:N	15	3.23
(2,77)	1:153:A:ARG:C	1:154:A:LEU:N	1:154:A:LEU:CA	1:154:A:LEU:C	10	3.22
(2,62)	1:121:A:ARG:N	1:121:A:ARG:CA	1:121:A:ARG:C	1:122:A:CYS:N	5	3.22
(1,39)	1:81:A:GLY:C	1:82:A:ASP:N	1:82:A:ASP:CA	1:82:A:ASP:C	12	3.22
(1,61)	1:136:A:ALA:C	1:137:A:ASP:N	1:137:A:ASP:CA	1:137:A:ASP:C	9	3.21
(1,63)	1:137:A:ASP:C	1:138:A:GLU:N	1:138:A:GLU:CA	1:138:A:GLU:C	8	3.2
(1,102)	1:182:A:HIS:N	1:182:A:HIS:CA	1:182:A:HIS:C	1:183:A:HIS:N	1	3.18
(1,94)	1:173:A:SER:N	1:173:A:SER:CA	1:173:A:SER:C	1:174:A:ARG:N	10	3.17
(1,68)	1:140:A:PRO:N	1:140:A:PRO:CA	1:140:A:PRO:C	1:141:A:PRO:N	11	3.13
(1,60)	1:132:A:TYR:N	1:132:A:TYR:CA	1:132:A:TYR:C	1:133:A:PHE:N	14	3.13
(2,48)	1:76:A:PHE:N	1:76:A:PHE:CA	1:76:A:PHE:C	1:77:A:LEU:N	7	3.1
(2,86)	1:166:A:VAL:N	1:166:A:VAL:CA	1:166:A:VAL:C	1:167:A:LEU:N	2	3.09
(1,12)	1:13:A:LEU:N	1:13:A:LEU:CA	1:13:A:LEU:C	1:14:A:ALA:N	6	3.09
(2,72)	1:137:A:ASP:N	1:137:A:ASP:CA	1:137:A:ASP:C	1:138:A:GLU:N	3	3.05
(1,42)	1:89:A:PRO:N	1:89:A:PRO:CA	1:89:A:PRO:C	1:90:A:ALA:N	7	3.04
(1,11)	1:12:A:ILE:C	1:13:A:LEU:N	1:13:A:LEU:CA	1:13:A:LEU:C	10	3.04
(1,94)	1:173:A:SER:N	1:173:A:SER:CA	1:173:A:SER:C	1:174:A:ARG:N	9	3.03
(1,102)	1:182:A:HIS:N	1:182:A:HIS:CA	1:182:A:HIS:C	1:183:A:HIS:N	8	3.02
(1,32)	1:57:A:LEU:N	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:C	1:58:A:GLU:N	7	3.02
(1,11)	1:12:A:ILE:C	1:13:A:LEU:N	1:13:A:LEU:CA	1:13:A:LEU:C	8	3.02
(1,32)	1:57:A:LEU:N	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:C	1:58:A:GLU:N	6	3.01
(2,69)	1:131:A:ASP:C	1:132:A:TYR:N	1:132:A:TYR:CA	1:132:A:TYR:C	3	3.0
(1,94)	1:173:A:SER:N	1:173:A:SER:CA	1:173:A:SER:C	1:174:A:ARG:N	11	3.0
(2,30)	1:41:A:LYS:N	1:41:A:LYS:CA	1:41:A:LYS:C	1:42:A:HIS:N	4	2.98
(1,39)	1:81:A:GLY:C	1:82:A:ASP:N	1:82:A:ASP:CA	1:82:A:ASP:C	13	2.98
(1,32)	1:57:A:LEU:N	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:C	1:58:A:GLU:N	13	2.97
(2,110)	1:182:A:HIS:N	1:182:A:HIS:CA	1:182:A:HIS:C	1:183:A:HIS:N	3	2.95
(1,94)	1:173:A:SER:N	1:173:A:SER:CA	1:173:A:SER:C	1:174:A:ARG:N	14	2.95
(2,68)	1:130:A:TRP:N	1:130:A:TRP:CA	1:130:A:TRP:C	1:131:A:ASP:N	15	2.94
(2,36)	1:48:A:THR:N	1:48:A:THR:CA	1:48:A:THR:C	1:49:A:PHE:N	8	2.9
(2,54)	1:104:A:GLN:N	1:104:A:GLN:CA	1:104:A:GLN:C	1:105:A:GLY:N	8	2.87
(1,38)	1:76:A:PHE:N	1:76:A:PHE:CA	1:76:A:PHE:C	1:77:A:LEU:N	10	2.85
(2,69)	1:131:A:ASP:C	1:132:A:TYR:N	1:132:A:TYR:CA	1:132:A:TYR:C	15	2.82
(1,11)	1:12:A:ILE:C	1:13:A:LEU:N	1:13:A:LEU:CA	1:13:A:LEU:C	7	2.82
(1,63)	1:137:A:ASP:C	1:138:A:GLU:N	1:138:A:GLU:CA	1:138:A:GLU:C	7	2.8
(2,48)	1:76:A:PHE:N	1:76:A:PHE:CA	1:76:A:PHE:C	1:77:A:LEU:N	9	2.77
(1,22)	1:41:A:LYS:N	1:41:A:LYS:CA	1:41:A:LYS:C	1:42:A:HIS:N	15	2.77
(1,94)	1:173:A:SER:N	1:173:A:SER:CA	1:173:A:SER:C	1:174:A:ARG:N	13	2.76
(1,63)	1:137:A:ASP:C	1:138:A:GLU:N	1:138:A:GLU:CA	1:138:A:GLU:C	9	2.7
(2,68)	1:130:A:TRP:N	1:130:A:TRP:CA	1:130:A:TRP:C	1:131:A:ASP:N	1	2.66
(2,12)	1:19:A:ARG:N	1:19:A:ARG:CA	1:19:A:ARG:C	1:20:A:ASN:N	7	2.65
(1,12)	1:13:A:LEU:N	1:13:A:LEU:CA	1:13:A:LEU:C	1:14:A:ALA:N	4	2.65
(1,61)	1:136:A:ALA:C	1:137:A:ASP:N	1:137:A:ASP:CA	1:137:A:ASP:C	7	2.63
(1,37)	1:75:A:GLY:C	1:76:A:PHE:N	1:76:A:PHE:CA	1:76:A:PHE:C	14	2.62
(1,60)	1:132:A:TYR:N	1:132:A:TYR:CA	1:132:A:TYR:C	1:133:A:PHE:N	3	2.61
(2,48)	1:76:A:PHE:N	1:76:A:PHE:CA	1:76:A:PHE:C	1:77:A:LEU:N	1	2.6
(1,11)	1:12:A:ILE:C	1:13:A:LEU:N	1:13:A:LEU:CA	1:13:A:LEU:C	9	2.6
(1,60)	1:132:A:TYR:N	1:132:A:TYR:CA	1:132:A:TYR:C	1:133:A:PHE:N	2	2.58
(2,36)	1:48:A:THR:N	1:48:A:THR:CA	1:48:A:THR:C	1:49:A:PHE:N	10	2.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(2,47)	1:75:A:GLY:C	1:76:A:PHE:N	1:76:A:PHE:CA	1:76:A:PHE:C	9	2.56
(1,94)	1:173:A:SER:N	1:173:A:SER:CA	1:173:A:SER:C	1:174:A:ARG:N	2	2.56
(1,62)	1:137:A:ASP:N	1:137:A:ASP:CA	1:137:A:ASP:C	1:138:A:GLU:N	4	2.56
(1,61)	1:136:A:ALA:C	1:137:A:ASP:N	1:137:A:ASP:CA	1:137:A:ASP:C	5	2.56
(1,44)	1:106:A:SER:N	1:106:A:SER:CA	1:106:A:SER:C	1:107:A:CYS:N	15	2.55
(1,11)	1:12:A:ILE:C	1:13:A:LEU:N	1:13:A:LEU:CA	1:13:A:LEU:C	6	2.55
(1,102)	1:182:A:HIS:N	1:182:A:HIS:CA	1:182:A:HIS:C	1:183:A:HIS:N	4	2.54
(2,112)	1:184:A:HIS:N	1:184:A:HIS:CA	1:184:A:HIS:C	1:185:A:HIS:N	11	2.52
(1,61)	1:136:A:ALA:C	1:137:A:ASP:N	1:137:A:ASP:CA	1:137:A:ASP:C	10	2.51
(1,86)	1:167:A:LEU:N	1:167:A:LEU:CA	1:167:A:LEU:C	1:168:A:ARG:N	13	2.5
(1,30)	1:56:A:GLU:N	1:56:A:GLU:CA	1:56:A:GLU:C	1:57:A:LEU:N	13	2.46
(1,60)	1:132:A:TYR:N	1:132:A:TYR:CA	1:132:A:TYR:C	1:133:A:PHE:N	1	2.45
(1,39)	1:81:A:GLY:C	1:82:A:ASP:N	1:82:A:ASP:CA	1:82:A:ASP:C	15	2.45
(1,26)	1:48:A:THR:N	1:48:A:THR:CA	1:48:A:THR:C	1:49:A:PHE:N	9	2.43
(1,32)	1:57:A:LEU:N	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:C	1:58:A:GLU:N	9	2.4
(2,86)	1:166:A:VAL:N	1:166:A:VAL:CA	1:166:A:VAL:C	1:167:A:LEU:N	3	2.38
(1,58)	1:129:A:ILE:N	1:129:A:ILE:CA	1:129:A:ILE:C	1:130:A:TRP:N	6	2.37
(2,68)	1:130:A:TRP:N	1:130:A:TRP:CA	1:130:A:TRP:C	1:131:A:ASP:N	12	2.36
(1,86)	1:167:A:LEU:N	1:167:A:LEU:CA	1:167:A:LEU:C	1:168:A:ARG:N	1	2.35
(2,70)	1:132:A:TYR:N	1:132:A:TYR:CA	1:132:A:TYR:C	1:133:A:PHE:N	11	2.34
(2,41)	1:57:A:LEU:C	1:58:A:GLU:N	1:58:A:GLU:CA	1:58:A:GLU:C	1	2.34
(1,61)	1:136:A:ALA:C	1:137:A:ASP:N	1:137:A:ASP:CA	1:137:A:ASP:C	6	2.34
(2,104)	1:178:A:LEU:N	1:178:A:LEU:CA	1:178:A:LEU:C	1:179:A:GLU:N	2	2.33
(2,86)	1:166:A:VAL:N	1:166:A:VAL:CA	1:166:A:VAL:C	1:167:A:LEU:N	1	2.32
(2,13)	1:25:A:ILE:C	1:26:A:GLY:N	1:26:A:GLY:CA	1:26:A:GLY:C	10	2.31
(2,86)	1:166:A:VAL:N	1:166:A:VAL:CA	1:166:A:VAL:C	1:167:A:LEU:N	4	2.3
(2,86)	1:166:A:VAL:N	1:166:A:VAL:CA	1:166:A:VAL:C	1:167:A:LEU:N	13	2.3
(2,54)	1:104:A:GLN:N	1:104:A:GLN:CA	1:104:A:GLN:C	1:105:A:GLY:N	11	2.29
(1,90)	1:170:A:ALA:N	1:170:A:ALA:CA	1:170:A:ALA:C	1:171:A:PHE:N	14	2.29
(1,94)	1:173:A:SER:N	1:173:A:SER:CA	1:173:A:SER:C	1:174:A:ARG:N	1	2.28
(1,58)	1:129:A:ILE:N	1:129:A:ILE:CA	1:129:A:ILE:C	1:130:A:TRP:N	7	2.27
(2,68)	1:130:A:TRP:N	1:130:A:TRP:CA	1:130:A:TRP:C	1:131:A:ASP:N	4	2.26
(1,58)	1:129:A:ILE:N	1:129:A:ILE:CA	1:129:A:ILE:C	1:130:A:TRP:N	10	2.25
(2,13)	1:25:A:ILE:C	1:26:A:GLY:N	1:26:A:GLY:CA	1:26:A:GLY:C	9	2.23
(1,58)	1:129:A:ILE:N	1:129:A:ILE:CA	1:129:A:ILE:C	1:130:A:TRP:N	8	2.23
(1,86)	1:167:A:LEU:N	1:167:A:LEU:CA	1:167:A:LEU:C	1:168:A:ARG:N	15	2.21
(1,60)	1:132:A:TYR:N	1:132:A:TYR:CA	1:132:A:TYR:C	1:133:A:PHE:N	15	2.2
(1,61)	1:136:A:ALA:C	1:137:A:ASP:N	1:137:A:ASP:CA	1:137:A:ASP:C	8	2.19
(1,32)	1:57:A:LEU:N	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:C	1:58:A:GLU:N	8	2.19
(1,63)	1:137:A:ASP:C	1:138:A:GLU:N	1:138:A:GLU:CA	1:138:A:GLU:C	13	2.18
(1,102)	1:182:A:HIS:N	1:182:A:HIS:CA	1:182:A:HIS:C	1:183:A:HIS:N	14	2.17
(1,86)	1:167:A:LEU:N	1:167:A:LEU:CA	1:167:A:LEU:C	1:168:A:ARG:N	14	2.17
(1,42)	1:89:A:PRO:N	1:89:A:PRO:CA	1:89:A:PRO:C	1:90:A:ALA:N	9	2.17
(2,86)	1:166:A:VAL:N	1:166:A:VAL:CA	1:166:A:VAL:C	1:167:A:LEU:N	5	2.14
(1,102)	1:182:A:HIS:N	1:182:A:HIS:CA	1:182:A:HIS:C	1:183:A:HIS:N	9	2.13
(1,90)	1:170:A:ALA:N	1:170:A:ALA:CA	1:170:A:ALA:C	1:171:A:PHE:N	15	2.13
(1,38)	1:76:A:PHE:N	1:76:A:PHE:CA	1:76:A:PHE:C	1:77:A:LEU:N	6	2.13
(2,86)	1:166:A:VAL:N	1:166:A:VAL:CA	1:166:A:VAL:C	1:167:A:LEU:N	10	2.09
(1,86)	1:167:A:LEU:N	1:167:A:LEU:CA	1:167:A:LEU:C	1:168:A:ARG:N	5	2.08
(2,86)	1:166:A:VAL:N	1:166:A:VAL:CA	1:166:A:VAL:C	1:167:A:LEU:N	12	2.06
(2,86)	1:166:A:VAL:N	1:166:A:VAL:CA	1:166:A:VAL:C	1:167:A:LEU:N	9	2.05

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,102)	1:182:A:HIS:N	1:182:A:HIS:CA	1:182:A:HIS:C	1:183:A:HIS:N	7	2.04
(1,90)	1:170:A:ALA:N	1:170:A:ALA:CA	1:170:A:ALA:C	1:171:A:PHE:N	12	2.03
(2,56)	1:105:A:GLY:N	1:105:A:GLY:CA	1:105:A:GLY:C	1:106:A:SER:N	11	2.02
(1,86)	1:167:A:LEU:N	1:167:A:LEU:CA	1:167:A:LEU:C	1:168:A:ARG:N	12	2.01
(2,86)	1:166:A:VAL:N	1:166:A:VAL:CA	1:166:A:VAL:C	1:167:A:LEU:N	15	1.96
(1,62)	1:137:A:ASP:N	1:137:A:ASP:CA	1:137:A:ASP:C	1:138:A:GLU:N	3	1.96
(1,38)	1:76:A:PHE:N	1:76:A:PHE:CA	1:76:A:PHE:C	1:77:A:LEU:N	7	1.96
(1,32)	1:57:A:LEU:N	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:C	1:58:A:GLU:N	10	1.95
(2,41)	1:57:A:LEU:C	1:58:A:GLU:N	1:58:A:GLU:CA	1:58:A:GLU:C	2	1.94
(1,102)	1:182:A:HIS:N	1:182:A:HIS:CA	1:182:A:HIS:C	1:183:A:HIS:N	6	1.94
(1,86)	1:167:A:LEU:N	1:167:A:LEU:CA	1:167:A:LEU:C	1:168:A:ARG:N	11	1.94
(1,30)	1:56:A:GLU:N	1:56:A:GLU:CA	1:56:A:GLU:C	1:57:A:LEU:N	11	1.94
(2,86)	1:166:A:VAL:N	1:166:A:VAL:CA	1:166:A:VAL:C	1:167:A:LEU:N	8	1.93
(1,102)	1:182:A:HIS:N	1:182:A:HIS:CA	1:182:A:HIS:C	1:183:A:HIS:N	10	1.92
(2,86)	1:166:A:VAL:N	1:166:A:VAL:CA	1:166:A:VAL:C	1:167:A:LEU:N	14	1.91
(2,98)	1:174:A:ARG:N	1:174:A:ARG:CA	1:174:A:ARG:C	1:175:A:TYR:N	1	1.88
(2,36)	1:48:A:THR:N	1:48:A:THR:CA	1:48:A:THR:C	1:49:A:PHE:N	7	1.87
(1,94)	1:173:A:SER:N	1:173:A:SER:CA	1:173:A:SER:C	1:174:A:ARG:N	15	1.87
(1,58)	1:129:A:ILE:N	1:129:A:ILE:CA	1:129:A:ILE:C	1:130:A:TRP:N	9	1.86
(1,101)	1:181:A:HIS:C	1:182:A:HIS:N	1:182:A:HIS:CA	1:182:A:HIS:C	14	1.84
(2,86)	1:166:A:VAL:N	1:166:A:VAL:CA	1:166:A:VAL:C	1:167:A:LEU:N	7	1.83
(2,60)	1:120:A:VAL:N	1:120:A:VAL:CA	1:120:A:VAL:C	1:121:A:ARG:N	10	1.83
(2,48)	1:76:A:PHE:N	1:76:A:PHE:CA	1:76:A:PHE:C	1:77:A:LEU:N	8	1.83
(2,41)	1:57:A:LEU:C	1:58:A:GLU:N	1:58:A:GLU:CA	1:58:A:GLU:C	8	1.82
(2,68)	1:130:A:TRP:N	1:130:A:TRP:CA	1:130:A:TRP:C	1:131:A:ASP:N	13	1.81
(1,47)	1:108:A:PRO:C	1:109:A:GLU:N	1:109:A:GLU:CA	1:109:A:GLU:C	4	1.8
(1,37)	1:75:A:GLY:C	1:76:A:PHE:N	1:76:A:PHE:CA	1:76:A:PHE:C	13	1.8
(2,86)	1:166:A:VAL:N	1:166:A:VAL:CA	1:166:A:VAL:C	1:167:A:LEU:N	11	1.79
(2,86)	1:166:A:VAL:N	1:166:A:VAL:CA	1:166:A:VAL:C	1:167:A:LEU:N	6	1.77
(2,64)	1:122:A:CYS:N	1:122:A:CYS:CA	1:122:A:CYS:C	1:123:A:ASN:N	6	1.77
(1,63)	1:137:A:ASP:C	1:138:A:GLU:N	1:138:A:GLU:CA	1:138:A:GLU:C	15	1.75
(2,70)	1:132:A:TYR:N	1:132:A:TYR:CA	1:132:A:TYR:C	1:133:A:PHE:N	13	1.74
(2,74)	1:138:A:GLU:N	1:138:A:GLU:CA	1:138:A:GLU:C	1:139:A:VAL:N	1	1.7
(1,14)	1:19:A:ARG:N	1:19:A:ARG:CA	1:19:A:ARG:C	1:20:A:ASN:N	3	1.7
(1,86)	1:167:A:LEU:N	1:167:A:LEU:CA	1:167:A:LEU:C	1:168:A:ARG:N	3	1.68
(2,69)	1:131:A:ASP:C	1:132:A:TYR:N	1:132:A:TYR:CA	1:132:A:TYR:C	5	1.67
(1,30)	1:56:A:GLU:N	1:56:A:GLU:CA	1:56:A:GLU:C	1:57:A:LEU:N	3	1.67
(2,41)	1:57:A:LEU:C	1:58:A:GLU:N	1:58:A:GLU:CA	1:58:A:GLU:C	9	1.64
(1,32)	1:57:A:LEU:N	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:C	1:58:A:GLU:N	14	1.64
(1,7)	1:9:A:ILE:C	1:10:A:HIS:N	1:10:A:HIS:CA	1:10:A:HIS:C	5	1.64
(2,110)	1:182:A:HIS:N	1:182:A:HIS:CA	1:182:A:HIS:C	1:183:A:HIS:N	2	1.63
(2,105)	1:178:A:LEU:C	1:179:A:GLU:N	1:179:A:GLU:CA	1:179:A:GLU:C	5	1.63
(1,38)	1:76:A:PHE:N	1:76:A:PHE:CA	1:76:A:PHE:C	1:77:A:LEU:N	9	1.63
(2,34)	1:47:A:LEU:N	1:47:A:LEU:CA	1:47:A:LEU:C	1:48:A:THR:N	15	1.6
(2,64)	1:122:A:CYS:N	1:122:A:CYS:CA	1:122:A:CYS:C	1:123:A:ASN:N	7	1.59
(2,41)	1:57:A:LEU:C	1:58:A:GLU:N	1:58:A:GLU:CA	1:58:A:GLU:C	10	1.59
(1,93)	1:172:A:ARG:C	1:173:A:SER:N	1:173:A:SER:CA	1:173:A:SER:C	6	1.59
(2,98)	1:174:A:ARG:N	1:174:A:ARG:CA	1:174:A:ARG:C	1:175:A:TYR:N	3	1.58
(1,32)	1:57:A:LEU:N	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:C	1:58:A:GLU:N	5	1.57
(2,54)	1:104:A:GLN:N	1:104:A:GLN:CA	1:104:A:GLN:C	1:105:A:GLY:N	10	1.56
(2,41)	1:57:A:LEU:C	1:58:A:GLU:N	1:58:A:GLU:CA	1:58:A:GLU:C	12	1.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,26)	1:48:A:THR:N	1:48:A:THR:CA	1:48:A:THR:C	1:49:A:PHE:N	15	1.55
(2,104)	1:178:A:LEU:N	1:178:A:LEU:CA	1:178:A:LEU:C	1:179:A:GLU:N	13	1.54
(1,30)	1:56:A:GLU:N	1:56:A:GLU:CA	1:56:A:GLU:C	1:57:A:LEU:N	5	1.51
(1,85)	1:166:A:VAL:C	1:167:A:LEU:N	1:167:A:LEU:CA	1:167:A:LEU:C	3	1.5
(1,39)	1:81:A:GLY:C	1:82:A:ASP:N	1:82:A:ASP:CA	1:82:A:ASP:C	14	1.5
(1,93)	1:172:A:ARG:C	1:173:A:SER:N	1:173:A:SER:CA	1:173:A:SER:C	10	1.49
(1,37)	1:75:A:GLY:C	1:76:A:PHE:N	1:76:A:PHE:CA	1:76:A:PHE:C	11	1.47
(2,47)	1:75:A:GLY:C	1:76:A:PHE:N	1:76:A:PHE:CA	1:76:A:PHE:C	15	1.46
(1,93)	1:172:A:ARG:C	1:173:A:SER:N	1:173:A:SER:CA	1:173:A:SER:C	7	1.46
(1,38)	1:76:A:PHE:N	1:76:A:PHE:CA	1:76:A:PHE:C	1:77:A:LEU:N	1	1.46
(1,46)	1:108:A:PRO:N	1:108:A:PRO:CA	1:108:A:PRO:C	1:109:A:GLU:N	6	1.45
(1,7)	1:9:A:ILE:C	1:10:A:HIS:N	1:10:A:HIS:CA	1:10:A:HIS:C	2	1.45
(1,86)	1:167:A:LEU:N	1:167:A:LEU:CA	1:167:A:LEU:C	1:168:A:ARG:N	2	1.44
(1,86)	1:167:A:LEU:N	1:167:A:LEU:CA	1:167:A:LEU:C	1:168:A:ARG:N	7	1.41
(1,56)	1:127:A:ALA:N	1:127:A:ALA:CA	1:127:A:ALA:C	1:128:A:ILE:N	3	1.4
(2,104)	1:178:A:LEU:N	1:178:A:LEU:CA	1:178:A:LEU:C	1:179:A:GLU:N	5	1.39
(2,104)	1:178:A:LEU:N	1:178:A:LEU:CA	1:178:A:LEU:C	1:179:A:GLU:N	7	1.39
(2,58)	1:113:A:GLY:N	1:113:A:GLY:CA	1:113:A:GLY:C	1:114:A:VAL:N	12	1.39
(1,30)	1:56:A:GLU:N	1:56:A:GLU:CA	1:56:A:GLU:C	1:57:A:LEU:N	1	1.39
(2,98)	1:174:A:ARG:N	1:174:A:ARG:CA	1:174:A:ARG:C	1:175:A:TYR:N	4	1.38
(1,81)	1:160:A:GLY:C	1:161:A:ALA:N	1:161:A:ALA:CA	1:161:A:ALA:C	4	1.37
(1,64)	1:138:A:GLU:N	1:138:A:GLU:CA	1:138:A:GLU:C	1:139:A:VAL:N	1	1.37
(1,86)	1:167:A:LEU:N	1:167:A:LEU:CA	1:167:A:LEU:C	1:168:A:ARG:N	9	1.36
(2,3)	1:5:A:GLN:C	1:6:A:VAL:N	1:6:A:VAL:CA	1:6:A:VAL:C	5	1.33
(1,86)	1:167:A:LEU:N	1:167:A:LEU:CA	1:167:A:LEU:C	1:168:A:ARG:N	10	1.32
(1,32)	1:57:A:LEU:N	1:57:A:LEU:CA	1:57:A:LEU:C	1:58:A:GLU:N	1	1.32
(2,41)	1:57:A:LEU:C	1:58:A:GLU:N	1:58:A:GLU:CA	1:58:A:GLU:C	3	1.31
(1,7)	1:9:A:ILE:C	1:10:A:HIS:N	1:10:A:HIS:CA	1:10:A:HIS:C	4	1.31
(1,86)	1:167:A:LEU:N	1:167:A:LEU:CA	1:167:A:LEU:C	1:168:A:ARG:N	8	1.3
(1,47)	1:108:A:PRO:C	1:109:A:GLU:N	1:109:A:GLU:CA	1:109:A:GLU:C	5	1.3
(2,68)	1:130:A:TRP:N	1:130:A:TRP:CA	1:130:A:TRP:C	1:131:A:ASP:N	11	1.28
(2,41)	1:57:A:LEU:C	1:58:A:GLU:N	1:58:A:GLU:CA	1:58:A:GLU:C	4	1.28
(2,69)	1:131:A:ASP:C	1:132:A:TYR:N	1:132:A:TYR:CA	1:132:A:TYR:C	1	1.24
(1,93)	1:172:A:ARG:C	1:173:A:SER:N	1:173:A:SER:CA	1:173:A:SER:C	8	1.23
(1,7)	1:9:A:ILE:C	1:10:A:HIS:N	1:10:A:HIS:CA	1:10:A:HIS:C	3	1.23
(2,110)	1:182:A:HIS:N	1:182:A:HIS:CA	1:182:A:HIS:C	1:183:A:HIS:N	5	1.21
(2,105)	1:178:A:LEU:C	1:179:A:GLU:N	1:179:A:GLU:CA	1:179:A:GLU:C	1	1.21
(1,93)	1:172:A:ARG:C	1:173:A:SER:N	1:173:A:SER:CA	1:173:A:SER:C	15	1.21
(1,86)	1:167:A:LEU:N	1:167:A:LEU:CA	1:167:A:LEU:C	1:168:A:ARG:N	4	1.21
(2,41)	1:57:A:LEU:C	1:58:A:GLU:N	1:58:A:GLU:CA	1:58:A:GLU:C	7	1.2
(2,3)	1:5:A:GLN:C	1:6:A:VAL:N	1:6:A:VAL:CA	1:6:A:VAL:C	1	1.18
(1,93)	1:172:A:ARG:C	1:173:A:SER:N	1:173:A:SER:CA	1:173:A:SER:C	9	1.18
(1,37)	1:75:A:GLY:C	1:76:A:PHE:N	1:76:A:PHE:CA	1:76:A:PHE:C	5	1.18
(2,47)	1:75:A:GLY:C	1:76:A:PHE:N	1:76:A:PHE:CA	1:76:A:PHE:C	6	1.17
(1,44)	1:106:A:SER:N	1:106:A:SER:CA	1:106:A:SER:C	1:107:A:CYS:N	8	1.17
(1,102)	1:182:A:HIS:N	1:182:A:HIS:CA	1:182:A:HIS:C	1:183:A:HIS:N	13	1.16
(1,86)	1:167:A:LEU:N	1:167:A:LEU:CA	1:167:A:LEU:C	1:168:A:ARG:N	6	1.16
(1,81)	1:160:A:GLY:C	1:161:A:ALA:N	1:161:A:ALA:CA	1:161:A:ALA:C	8	1.13
(2,68)	1:130:A:TRP:N	1:130:A:TRP:CA	1:130:A:TRP:C	1:131:A:ASP:N	14	1.1
(1,81)	1:160:A:GLY:C	1:161:A:ALA:N	1:161:A:ALA:CA	1:161:A:ALA:C	1	1.1
(1,7)	1:9:A:ILE:C	1:10:A:HIS:N	1:10:A:HIS:CA	1:10:A:HIS:C	1	1.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(2,89)	1:167:A:LEU:C	1:168:A:ARG:N	1:168:A:ARG:CA	1:168:A:ARG:C	12	1.09
(1,93)	1:172:A:ARG:C	1:173:A:SER:N	1:173:A:SER:CA	1:173:A:SER:C	12	1.09
(1,85)	1:166:A:VAL:C	1:167:A:LEU:N	1:167:A:LEU:CA	1:167:A:LEU:C	15	1.09
(1,56)	1:127:A:ALA:N	1:127:A:ALA:CA	1:127:A:ALA:C	1:128:A:ILE:N	4	1.08
(1,38)	1:76:A:PHE:N	1:76:A:PHE:CA	1:76:A:PHE:C	1:77:A:LEU:N	15	1.06
(1,85)	1:166:A:VAL:C	1:167:A:LEU:N	1:167:A:LEU:CA	1:167:A:LEU:C	4	1.04
(1,37)	1:75:A:GLY:C	1:76:A:PHE:N	1:76:A:PHE:CA	1:76:A:PHE:C	3	1.03
(2,74)	1:138:A:GLU:N	1:138:A:GLU:CA	1:138:A:GLU:C	1:139:A:VAL:N	7	1.01
(1,81)	1:160:A:GLY:C	1:161:A:ALA:N	1:161:A:ALA:CA	1:161:A:ALA:C	6	1.01
(2,104)	1:178:A:LEU:N	1:178:A:LEU:CA	1:178:A:LEU:C	1:179:A:GLU:N	1	1.0