



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 9, 2026 – 12:43 PM UTC

PDB ID : 9G0N / pdb_00009g0n
BMRB ID : 34928
Title : Trp-cage fortified Tc5b-Exenatide chimera (Ex4-Tc5bER) at 299K
Authors : Horvath, D.
Deposited on : 2024-07-08

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

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

A user guide is available at

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

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The types of validation reports are described at

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

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

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

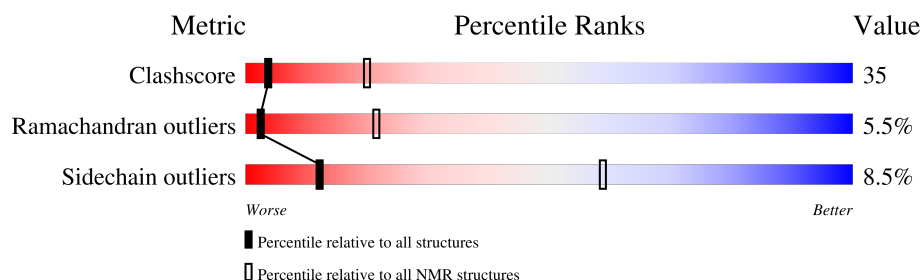
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment is 53%.

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



Metric	Whole archive (#Entries)	NMR archive (#Entries)
Clashscore	229148	14424
Ramachandran outliers	224038	12848
Sidechain outliers	223484	12823

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

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	25	32% 28% 40%

2 Ensemble composition and analysis

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

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:3-A:17 (15)	0.23	4

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

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

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

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

3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 388 atoms, of which 191 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Exendin-4.

Mol	Chain	Residues	Atoms					Trace
1	A	25	Total	C	H	N	O	0
			388	124	191	34	39	

There are 4 discrepancies between the modelled and reference sequences:

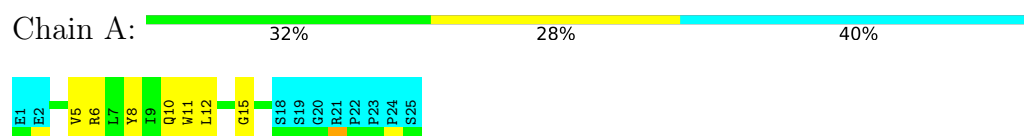
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	8	TYR	PHE	engineered mutation	UNP P26349
A	10	GLN	GLU	engineered mutation	UNP P26349
A	14	GLU	ASN	engineered mutation	UNP P26349
A	21	ARG	ALA	engineered mutation	UNP P26349

4 Residue-property plots [i](#)

4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

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

- Molecule 1: Exendin-4

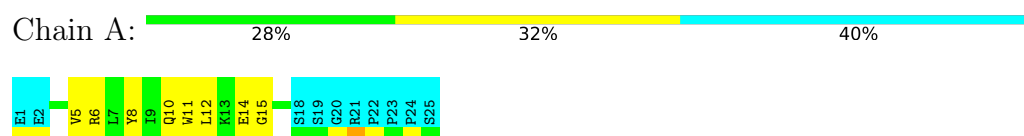


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section [4.1](#) above.

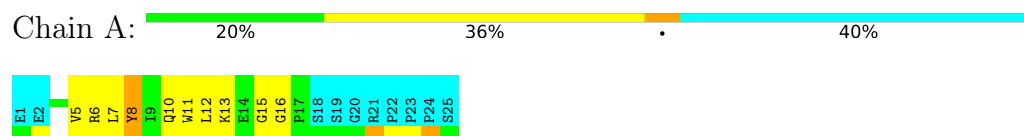
4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: Exendin-4



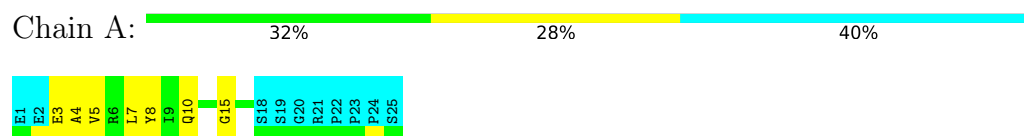
4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: Exendin-4



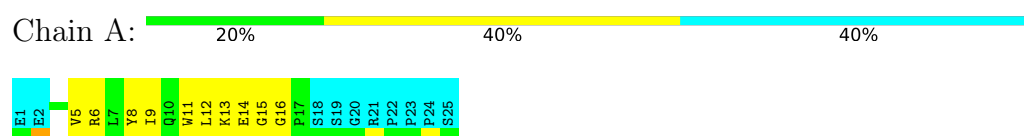
4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Exendin-4



4.2.4 Score per residue for model 4 (medoid)

- Molecule 1: Exendin-4



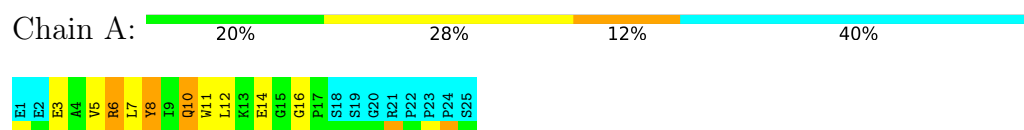
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Exendin-4



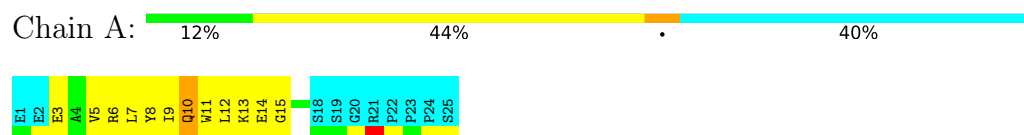
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Exendin-4



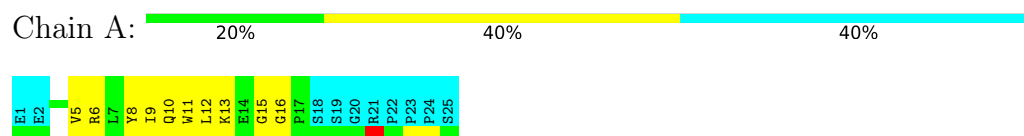
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Exendin-4



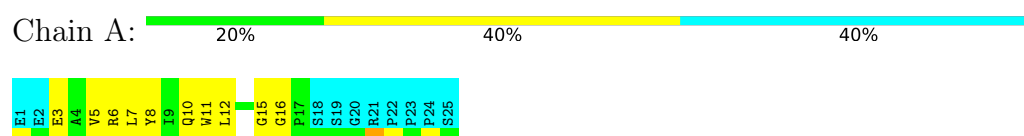
4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Exendin-4



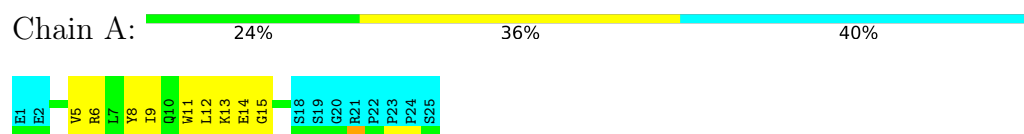
4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Exendin-4



4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Exendin-4



5 Refinement protocol and experimental data overview

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

Of the 20 calculated structures, 10 were deposited, based on the following criterion: *structures with the lowest energy*.

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

Software name	Classification	Version
CcpNmr Analysis Assign	refinement	2.4.1
ARIA2alpha	structure calculation	2.3.1

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

Chemical shift file(s)	working_cs.cif
Number of chemical shift lists	1
Total number of shifts	170
Number of shifts mapped to atoms	170
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Assignment completeness (well-defined parts)	53%

6 Model quality [i](#)

6.1 Standard geometry [i](#)

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

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

Mol	Chain	Chirality	Planarity
1	A	0.0±0.0	0.2±0.4
All	All	0	2

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

All unique planar outliers are listed below.

Mol	Chain	Res	Type	Group	Models (Total)
1	A	8	TYR	Sidechain	2

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	124	125	125	8±4
All	All	1240	1250	1068	80

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 35.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:8:TYR:O	1:A:12:LEU:HD12	0.81	1.76	6	6
1:A:9:ILE:HA	1:A:12:LEU:HD12	0.65	1.66	7	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:11:TRP:CE3	1:A:12:LEU:HG	0.59	2.31	1	6
1:A:8:TYR:O	1:A:11:TRP:HB3	0.57	2.00	6	3
1:A:9:ILE:O	1:A:13:LYS:HG2	0.56	1.99	8	3
1:A:8:TYR:CE1	1:A:12:LEU:HD11	0.55	2.35	7	5
1:A:3:GLU:O	1:A:7:LEU:HG	0.54	2.02	3	4
1:A:5:VAL:O	1:A:8:TYR:HB3	0.54	2.02	7	9
1:A:8:TYR:CE2	1:A:12:LEU:HD11	0.52	2.40	1	4
1:A:6:ARG:HA	1:A:9:ILE:HD12	0.52	1.81	7	1
1:A:3:GLU:O	1:A:6:ARG:HB3	0.52	2.05	7	1
1:A:12:LEU:HA	1:A:16:GLY:CA	0.50	2.37	6	5
1:A:8:TYR:CZ	1:A:12:LEU:HD11	0.50	2.42	6	6
1:A:5:VAL:CG1	1:A:6:ARG:N	0.50	2.74	2	8
1:A:6:ARG:O	1:A:10:GLN:HB3	0.49	2.06	7	1
1:A:10:GLN:NE2	1:A:14:GLU:HG3	0.45	2.26	6	1
1:A:8:TYR:C	1:A:12:LEU:HD12	0.44	2.38	4	5
1:A:11:TRP:HA	1:A:14:GLU:HG2	0.43	1.90	7	4
1:A:4:ALA:HA	1:A:7:LEU:CD1	0.43	2.43	3	1
1:A:7:LEU:O	1:A:11:TRP:N	0.42	2.51	9	2
1:A:7:LEU:O	1:A:10:GLN:HB3	0.41	2.15	3	1
1:A:12:LEU:HA	1:A:16:GLY:HA2	0.41	1.93	6	1
1:A:8:TYR:O	1:A:11:TRP:N	0.40	2.52	6	1

6.3 Torsion angles [i](#)

6.3.1 Protein backbone [i](#)

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	15/25 (60%)	12±2 (81±12%)	2±1 (11±5%)	1±0 (5±3%)	2	22
All	All	146/250 (58%)	122 (84%)	16 (11%)	8 (5%)	2	21

All 1 unique Ramachandran outliers are listed below.

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	15	GLY	8

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	12/21 (57%)	11±1 (89±8%)	1±1 (8±6%)	12 59
All	All	117/210 (56%)	107 (91%)	10 (9%)	12 59

All 3 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	10	GLN	7
1	A	13	LYS	2
1	A	6	ARG	1

6.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no oligosaccharides in this entry.

6.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues ⓘ

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

The completeness of assignment taking into account all chemical shift lists is 53% for the well-defined parts and 51% for the entire structure.

7.1 Chemical shift list 1

File name: working_cs.cif

Chemical shift list name: *nef_chemical_shift_list_ShiftList_1*

7.1.1 Bookkeeping

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

Total number of shifts	170
Number of shifts mapped to atoms	170
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Number of shift outliers (ShiftChecker)	2

7.1.2 Chemical shift referencing

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

7.1.3 Completeness of resonance assignments

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the well-defined regions of the structure. The overall completeness is 53%, i.e. 116 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 219. 0 out of 3 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	¹ H	¹³ C	¹⁵ N
Backbone	31/75 (41%)	31/31 (100%)	0/30 (0%)	0/14 (0%)
Sidechain	75/123 (61%)	75/80 (94%)	0/38 (0%)	0/5 (0%)
Aromatic	10/21 (48%)	10/10 (100%)	0/10 (0%)	0/1 (0%)
Overall	116/219 (53%)	116/121 (96%)	0/78 (0%)	0/20 (0%)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 51%, i.e. 170 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 332. 0 out of 3 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	¹ H	¹³ C	¹⁵ N
Backbone	47/120 (39%)	47/49 (96%)	0/50 (0%)	0/21 (0%)
Sidechain	113/191 (59%)	113/123 (92%)	0/60 (0%)	0/8 (0%)
Aromatic	10/21 (48%)	10/10 (100%)	0/10 (0%)	0/1 (0%)
Overall	170/332 (51%)	170/182 (93%)	0/120 (0%)	0/30 (0%)

7.1.4 Statistically unusual chemical shifts [i](#)

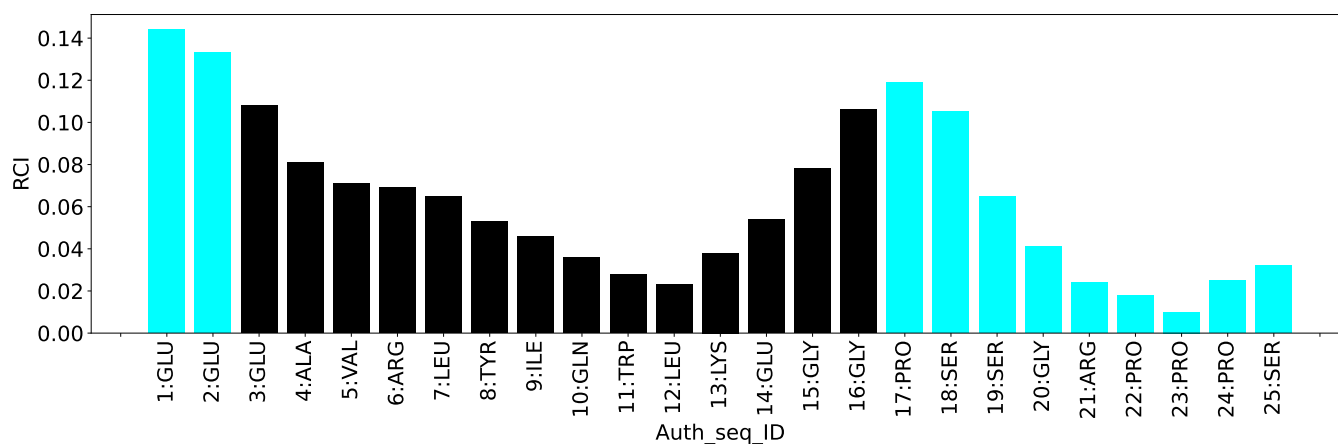
The following table lists the statistically unusual chemical shifts. These are statistical measures, and large deviations from the mean do not necessarily imply incorrect assignments. Molecules containing paramagnetic centres or hemes are expected to give rise to anomalous chemical shifts.

List Id	Chain	Res	Type	Atom	Shift, ppm	Expected range, ppm	Z-score
1	A	16	GLY	HA2	1.22	2.15 – 5.77	-7.6
1	A	23	PRO	HA	2.74	2.78 – 6.00	-5.1

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

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

Random coil index (RCI) for chain A:



8 NMR restraints analysis

8.1 Conformationally restricting restraints

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

Description	Value
Total distance restraints	1544
Intra-residue ($ i-j =0$)	822
Sequential ($ i-j =1$)	314
Medium range ($ i-j >1$ and $ i-j <5$)	256
Long range ($ i-j \geq 5$)	152
Inter-chain	0
Hydrogen bond restraints	0
Disulfide bond restraints	0
Total dihedral-angle restraints	0
Number of unmapped restraints	0
Number of restraints per residue	61.8
Number of long range restraints per residue ¹	6.1

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

8.2 Residual restraint violations

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

8.2.1 Average number of distance violations per model

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

Bins (Å)	Average number of violations per model	Max (Å)
0.1-0.2 (Small)	66.4	0.2
0.2-0.5 (Medium)	150.8	0.5
>0.5 (Large)	136.6	2.9

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

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

9 Distance violation analysis ⓘ

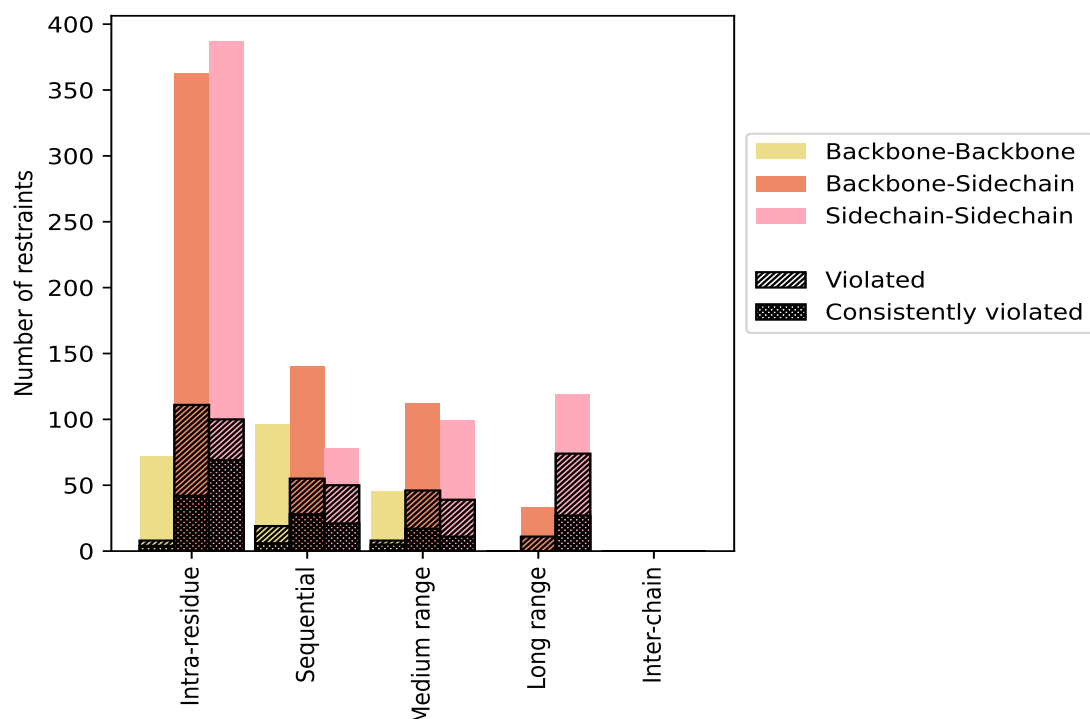
9.1 Summary of distance violations ⓘ

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

Restrains type	Count	% ¹	Violated ³			Consistently Violated ⁴		
			Count	% ²	% ¹	Count	% ²	% ¹
Intra-residue (i-j =0)	822	53.2	219	26.6	14.2	115	14.0	7.4
Backbone-Backbone	72	4.7	8	11.1	0.5	4	5.6	0.3
Backbone-Sidechain	363	23.5	111	30.6	7.2	42	11.6	2.7
Sidechain-Sidechain	387	25.1	100	25.8	6.5	69	17.8	4.5
Sequential (i-j =1)	314	20.3	124	39.5	8.0	55	17.5	3.6
Backbone-Backbone	96	6.2	19	19.8	1.2	6	6.2	0.4
Backbone-Sidechain	140	9.1	55	39.3	3.6	28	20.0	1.8
Sidechain-Sidechain	78	5.1	50	64.1	3.2	21	26.9	1.4
Medium range (i-j >1 & i-j <5)	256	16.6	93	36.3	6.0	33	12.9	2.1
Backbone-Backbone	45	2.9	8	17.8	0.5	5	11.1	0.3
Backbone-Sidechain	112	7.3	46	41.1	3.0	17	15.2	1.1
Sidechain-Sidechain	99	6.4	39	39.4	2.5	11	11.1	0.7
Long range (i-j ≥5)	152	9.8	85	55.9	5.5	27	17.8	1.7
Backbone-Backbone	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	33	2.1	11	33.3	0.7	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	119	7.7	74	62.2	4.8	27	22.7	1.7
Inter-chain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Backbone	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Hydrogen bond	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Disulfide bond	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Total	1544	100.0	521	33.7	33.7	230	14.9	14.9
Backbone-Backbone	213	13.8	35	16.4	2.3	15	7.0	1.0
Backbone-Sidechain	648	42.0	223	34.4	14.4	87	13.4	5.6
Sidechain-Sidechain	683	44.2	263	38.5	17.0	128	18.7	8.3

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

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



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

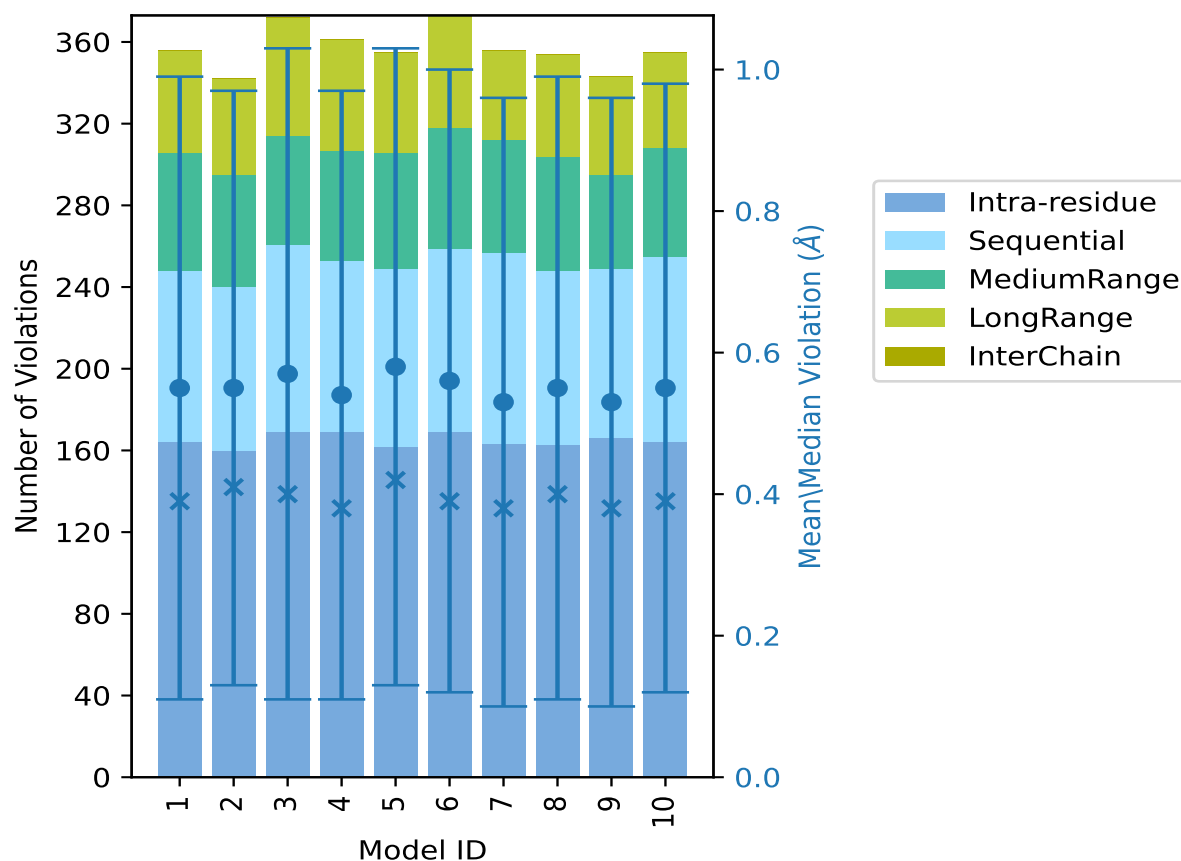
9.2 Distance violation statistics for each model [i](#)

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

Model ID	Number of violations						Mean (Å)	Max (Å)	SD ⁶ (Å)	Median (Å)
	IR ¹	SQ ²	MR ³	LR ⁴	IC ⁵	Total				
1	164	84	58	50	0	356	0.55	2.61	0.44	0.39
2	160	80	55	47	0	342	0.55	2.71	0.42	0.41
3	169	92	53	58	0	372	0.57	2.79	0.46	0.4
4	169	84	54	54	0	361	0.54	2.7	0.43	0.38
5	162	87	57	49	0	355	0.58	2.71	0.45	0.42
6	169	90	59	55	0	373	0.56	2.26	0.44	0.39
7	163	94	55	44	0	356	0.53	2.79	0.43	0.38
8	163	85	56	50	0	354	0.55	2.73	0.44	0.4
9	166	83	46	48	0	343	0.53	2.9	0.43	0.38
10	164	91	53	47	0	355	0.55	2.68	0.43	0.39

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

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



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

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

Violation analysis may find that some restraints are violated in few models and some are violated in most of models. The following table provides this information as number of violated restraints for a given fraction of the ensemble. In total, 1023(IR:603, SQ:190, MR:163, LR:67, 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	%
13	13	19	11	0	56	1	10.0
19	11	8	16	0	54	2	20.0
10	5	4	7	0	26	3	30.0

Continued on next page...

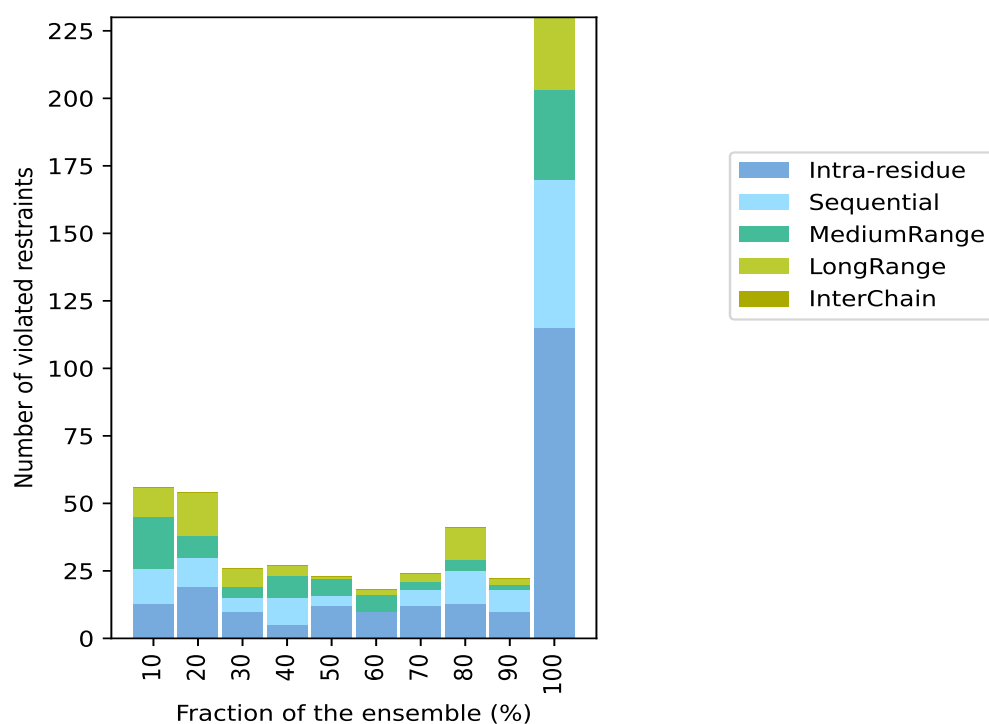
Continued from previous page...

Number of violated restraints						Fraction of the ensemble	
IR ¹	SQ ²	MR ³	LR ⁴	IC ⁵	Total	Count ⁶	%
5	10	8	4	0	27	4	40.0
12	4	6	1	0	23	5	50.0
10	0	6	2	0	18	6	60.0
12	6	3	3	0	24	7	70.0
13	12	4	12	0	41	8	80.0
10	8	2	2	0	22	9	90.0
115	55	33	27	0	230	10	100.0

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

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

9.3.1 Bar graph : Distance violation statistics for the ensemble ⓘ

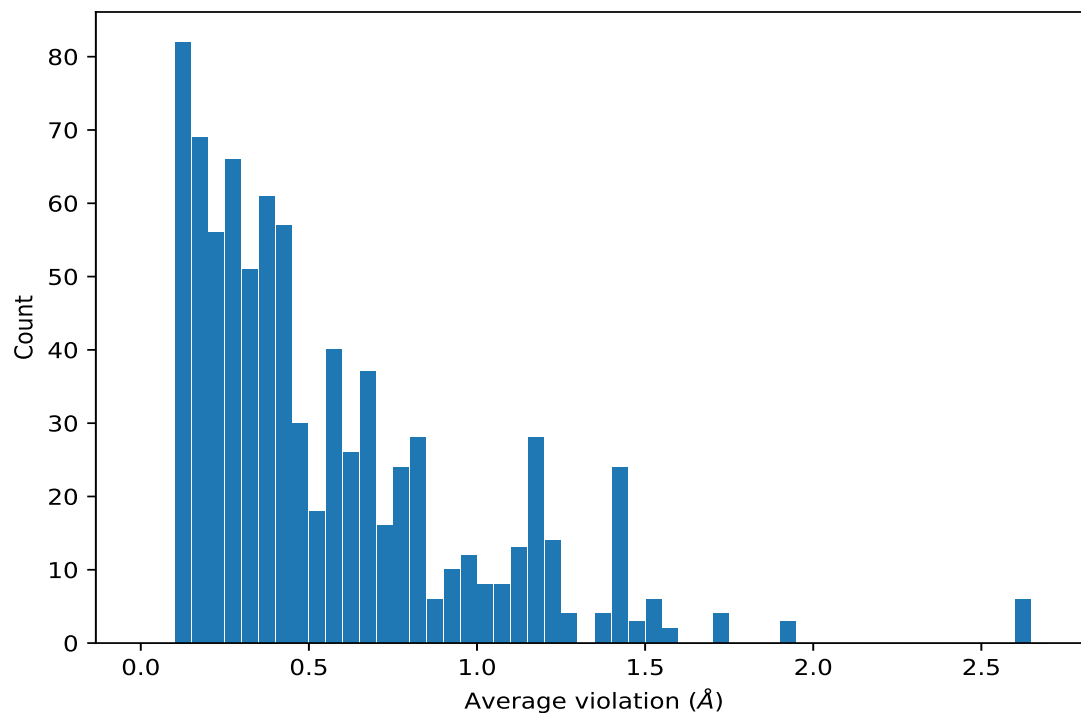


9.4 Most violated distance restraints in the ensemble ⓘ

9.4.1 Histogram : Distribution of mean distance violations ⓘ

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

in the ensemble



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

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

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,427)	1:12:A:LEU:HD21	1:13:A:LYS:HG3	10	2.62	0.33	2.71
(1,427)	1:12:A:LEU:HD22	1:13:A:LYS:HG3	10	2.62	0.33	2.71
(1,427)	1:12:A:LEU:HD23	1:13:A:LYS:HG3	10	2.62	0.33	2.71
(4,32)	1:12:A:LEU:HD21	1:13:A:LYS:HG3	10	2.62	0.33	2.71
(4,32)	1:12:A:LEU:HD22	1:13:A:LYS:HG3	10	2.62	0.33	2.71
(4,32)	1:12:A:LEU:HD23	1:13:A:LYS:HG3	10	2.62	0.33	2.71
(2,427)	1:12:A:LEU:HD21	1:13:A:LYS:HG3	10	1.93	0.33	2.02
(2,427)	1:12:A:LEU:HD22	1:13:A:LYS:HG3	10	1.93	0.33	2.02
(2,427)	1:12:A:LEU:HD23	1:13:A:LYS:HG3	10	1.93	0.33	2.02
(1,470)	1:1:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:H	10	1.71	0.49	1.82
(1,470)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:H	10	1.71	0.49	1.82
(4,40)	1:1:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:H	10	1.71	0.49	1.82
(4,40)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:H	10	1.71	0.49	1.82
(1,516)	1:2:A:GLU:HB2	1:3:A:GLU:HA	10	1.57	0.63	1.75
(4,45)	1:2:A:GLU:HB2	1:3:A:GLU:HA	10	1.57	0.63	1.75

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,466)	1:12:A:LEU:HD11	1:13:A:LYS:HA	10	1.52	0.08	1.54
(1,466)	1:12:A:LEU:HD12	1:13:A:LYS:HA	10	1.52	0.08	1.54
(1,466)	1:12:A:LEU:HD13	1:13:A:LYS:HA	10	1.52	0.08	1.54
(4,38)	1:12:A:LEU:HD11	1:13:A:LYS:HA	10	1.52	0.08	1.54
(4,38)	1:12:A:LEU:HD12	1:13:A:LYS:HA	10	1.52	0.08	1.54
(4,38)	1:12:A:LEU:HD13	1:13:A:LYS:HA	10	1.52	0.08	1.54
(1,297)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD2	10	1.47	0.17	1.5
(3,282)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD2	10	1.47	0.17	1.5
(1,423)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	10	1.41	0.04	1.41
(1,423)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	10	1.41	0.04	1.41
(1,423)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	10	1.41	0.04	1.41
(1,423)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	10	1.41	0.04	1.41
(1,423)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	10	1.41	0.04	1.41
(1,423)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	10	1.41	0.04	1.41
(1,423)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	10	1.41	0.04	1.41
(1,423)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	10	1.41	0.04	1.41
(1,423)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	10	1.41	0.04	1.41
(4,31)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	10	1.41	0.04	1.41
(4,31)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	10	1.41	0.04	1.41
(4,31)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	10	1.41	0.04	1.41
(4,31)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	10	1.41	0.04	1.41
(4,31)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	10	1.41	0.04	1.41
(4,31)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	10	1.41	0.04	1.41
(4,31)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	10	1.41	0.04	1.41
(4,31)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	10	1.41	0.04	1.41
(4,31)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	10	1.41	0.04	1.41
(1,324)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HE3	10	1.39	0.01	1.39
(4,17)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HE3	10	1.39	0.01	1.39
(1,298)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	10	1.36	0.04	1.38
(3,283)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	10	1.36	0.04	1.38
(2,101)	1:3:A:GLU:H	1:4:A:ALA:H	10	1.28	0.21	1.34
(2,319)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HG2	10	1.25	0.23	1.41
(1,375)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:HA	10	1.25	0.04	1.25
(4,24)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:HA	10	1.25	0.04	1.25
(1,463)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB3	10	1.2	0.34	1.23
(1,463)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB3	10	1.2	0.34	1.23
(1,463)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB3	10	1.2	0.34	1.23
(4,36)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB3	10	1.2	0.34	1.23
(4,36)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB3	10	1.2	0.34	1.23
(4,36)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB3	10	1.2	0.34	1.23
(1,417)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HB2	10	1.18	0.54	1.2
(1,417)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HB2	10	1.18	0.54	1.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,417)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HB2	10	1.18	0.54	1.2
(4,30)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HB2	10	1.18	0.54	1.2
(4,30)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HB2	10	1.18	0.54	1.2
(4,30)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HB2	10	1.18	0.54	1.2
(1,446)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG21	10	1.18	0.04	1.19
(1,446)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG22	10	1.18	0.04	1.19
(1,446)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG23	10	1.18	0.04	1.19
(4,34)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG21	10	1.18	0.04	1.19
(4,34)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG22	10	1.18	0.04	1.19
(4,34)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG23	10	1.18	0.04	1.19
(1,369)	1:23:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	10	1.18	0.27	1.14
(3,346)	1:23:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	10	1.18	0.27	1.14
(1,325)	1:11:A:TRP:HZ2	1:11:A:TRP:HZ3	10	1.17	0.01	1.18
(4,18)	1:11:A:TRP:HZ2	1:11:A:TRP:HZ3	10	1.17	0.01	1.18
(1,302)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	10	1.15	0.09	1.17
(3,287)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	10	1.15	0.09	1.17
(1,288)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	10	1.15	0.01	1.15
(4,15)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	10	1.15	0.01	1.15
(1,409)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	10	1.11	0.05	1.12
(1,409)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	10	1.11	0.05	1.12
(1,409)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	10	1.11	0.05	1.12
(3,381)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	10	1.11	0.05	1.12
(3,381)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	10	1.11	0.05	1.12
(3,381)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	10	1.11	0.05	1.12
(1,303)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	10	1.09	0.11	1.12
(3,288)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	10	1.09	0.11	1.12
(2,456)	1:12:A:LEU:HA	1:16:A:GLY:HA2	10	1.07	0.27	1.19
(2,466)	1:12:A:LEU:HA	1:16:A:GLY:HA3	10	1.04	0.15	1.09
(1,501)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD21	10	0.99	0.51	1.26
(1,501)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD22	10	0.99	0.51	1.26
(1,501)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD23	10	0.99	0.51	1.26
(4,42)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD21	10	0.99	0.51	1.26
(4,42)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD22	10	0.99	0.51	1.26
(4,42)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD23	10	0.99	0.51	1.26
(1,170)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	10	0.97	0.01	0.97
(1,170)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	10	0.97	0.01	0.97
(1,170)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	10	0.97	0.01	0.97
(4,6)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	10	0.97	0.01	0.97
(4,6)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	10	0.97	0.01	0.97
(4,6)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	10	0.97	0.01	0.97
(2,182)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG13	10	0.93	0.02	0.94
(2,343)	1:8:A:TYR:HB3	1:9:A:ILE:H	10	0.92	0.06	0.93

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,187)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG2	10	0.91	0.2	0.9
(1,187)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	10	0.91	0.2	0.9
(4,8)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG2	10	0.91	0.2	0.9
(4,8)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	10	0.91	0.2	0.9
(1,435)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	10	0.9	0.09	0.94
(3,403)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	10	0.9	0.09	0.94
(2,383)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB3	10	0.89	0.04	0.88
(2,301)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG2	10	0.86	0.12	0.86
(2,301)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG3	10	0.86	0.12	0.86
(2,433)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD3	10	0.83	0.08	0.82
(2,402)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD11	10	0.82	0.11	0.78
(2,402)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD12	10	0.82	0.11	0.78
(2,402)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD13	10	0.82	0.11	0.78
(1,437)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG12	10	0.82	0.06	0.8
(1,437)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG12	10	0.82	0.06	0.8
(3,405)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG12	10	0.82	0.06	0.8
(3,405)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG12	10	0.82	0.06	0.8
(2,379)	1:10:A:GLN:HA	1:13:A:LYS:HB3	10	0.81	0.15	0.8
(1,455)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	10	0.8	0.05	0.81
(1,455)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	10	0.8	0.05	0.81
(3,420)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	10	0.8	0.05	0.81
(3,420)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	10	0.8	0.05	0.81
(1,487)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	10	0.8	0.71	0.36
(1,487)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	10	0.8	0.71	0.36
(1,487)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	10	0.8	0.71	0.36
(1,487)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG3	10	0.8	0.71	0.36
(1,487)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG3	10	0.8	0.71	0.36
(1,487)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG3	10	0.8	0.71	0.36
(4,41)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	10	0.8	0.71	0.36
(4,41)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	10	0.8	0.71	0.36
(4,41)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	10	0.8	0.71	0.36
(4,41)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG3	10	0.8	0.71	0.36
(4,41)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG3	10	0.8	0.71	0.36
(4,41)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG3	10	0.8	0.71	0.36
(1,113)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	10	0.79	0.02	0.8
(1,113)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	10	0.79	0.02	0.8
(1,113)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	10	0.79	0.02	0.8
(4,2)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	10	0.79	0.02	0.8
(4,2)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	10	0.79	0.02	0.8
(4,2)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	10	0.79	0.02	0.8
(2,374)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB3	10	0.79	0.08	0.8
(2,349)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:H	10	0.77	0.13	0.74

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(2,26)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HB3	10	0.77	0.01	0.78
(2,388)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HD2	10	0.76	0.08	0.77
(2,382)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB2	10	0.75	0.05	0.74
(2,313)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HG	10	0.74	0.04	0.74
(1,308)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HE3	10	0.73	0.03	0.74
(3,293)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HE3	10	0.73	0.03	0.74
(2,251)	1:20:A:GLY:HA2	1:20:A:GLY:HA3	10	0.73	0.0	0.73
(2,250)	1:15:A:GLY:HA2	1:15:A:GLY:HA3	10	0.72	0.0	0.72
(2,423)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	10	0.69	0.04	0.69
(2,423)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	10	0.69	0.04	0.69
(2,423)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	10	0.69	0.04	0.69
(2,423)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	10	0.69	0.04	0.69
(2,423)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	10	0.69	0.04	0.69
(2,423)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	10	0.69	0.04	0.69
(2,423)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	10	0.69	0.04	0.69
(2,423)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	10	0.69	0.04	0.69
(2,423)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	10	0.69	0.04	0.69
(2,273)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HD2	10	0.69	0.27	0.7
(2,273)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HD2	10	0.69	0.27	0.7
(2,324)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HE3	10	0.68	0.01	0.68
(2,334)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HB2	10	0.67	0.09	0.65
(2,334)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HB3	10	0.67	0.09	0.65
(2,454)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HD3	10	0.67	0.21	0.64
(2,279)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HD1	10	0.67	0.04	0.66
(2,279)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HD2	10	0.67	0.04	0.66
(2,279)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HD1	10	0.67	0.04	0.66
(2,279)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HD2	10	0.67	0.04	0.66
(2,279)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HD1	10	0.67	0.04	0.66
(2,279)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HD2	10	0.67	0.04	0.66
(2,298)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	10	0.66	0.05	0.67
(2,58)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG2	10	0.65	0.02	0.65
(2,323)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HZ3	10	0.65	0.17	0.72
(2,323)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HZ3	10	0.65	0.17	0.72
(2,35)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HG3	10	0.64	0.08	0.68
(2,35)	1:21:A:ARG:HD3	1:21:A:ARG:HG3	10	0.64	0.08	0.68
(2,310)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HE3	10	0.64	0.01	0.64
(1,464)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:HA2	10	0.62	0.42	0.4
(1,464)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:HA2	10	0.62	0.42	0.4
(1,464)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:HA2	10	0.62	0.42	0.4
(4,37)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:HA2	10	0.62	0.42	0.4
(4,37)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:HA2	10	0.62	0.42	0.4
(4,37)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:HA2	10	0.62	0.42	0.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(2,64)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HB3	10	0.6	0.01	0.6
(1,143)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	10	0.58	0.09	0.58
(1,143)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	10	0.58	0.09	0.58
(1,143)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	10	0.58	0.09	0.58
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	10	0.58	0.09	0.58
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	10	0.58	0.09	0.58
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	10	0.58	0.09	0.58
(1,278)	1:8:A:TYR:HD1	1:23:A:PRO:HB3	10	0.58	0.08	0.58
(1,278)	1:8:A:TYR:HD2	1:23:A:PRO:HB3	10	0.58	0.08	0.58
(3,266)	1:8:A:TYR:HD1	1:23:A:PRO:HB3	10	0.58	0.08	0.58
(3,266)	1:8:A:TYR:HD2	1:23:A:PRO:HB3	10	0.58	0.08	0.58
(2,232)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HG2	10	0.57	0.09	0.56
(1,299)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD2	10	0.56	0.08	0.52
(1,364)	1:5:A:VAL:HB	1:6:A:ARG:H	10	0.56	0.08	0.54
(3,284)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD2	10	0.56	0.08	0.52
(4,21)	1:5:A:VAL:HB	1:6:A:ARG:H	10	0.56	0.08	0.54
(2,405)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD11	10	0.55	0.14	0.53
(2,405)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD12	10	0.55	0.14	0.53
(2,405)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD13	10	0.55	0.14	0.53
(2,204)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HG	10	0.54	0.14	0.6
(2,446)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG21	10	0.54	0.04	0.55
(2,446)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG22	10	0.54	0.04	0.55
(2,446)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG23	10	0.54	0.04	0.55
(2,269)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HD1	10	0.54	0.12	0.58
(2,269)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HD2	10	0.54	0.12	0.58
(2,375)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:HA	10	0.54	0.05	0.53
(2,392)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HD3	10	0.52	0.15	0.53
(2,369)	1:23:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	10	0.5	0.26	0.46
(2,302)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	10	0.5	0.09	0.52
(2,63)	1:23:A:PRO:HD2	1:23:A:PRO:HG3	10	0.49	0.0	0.49
(2,63)	1:23:A:PRO:HD3	1:23:A:PRO:HG3	10	0.49	0.0	0.49
(2,126)	1:6:A:ARG:HD2	1:6:A:ARG:HG3	10	0.49	0.29	0.7
(2,198)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HB2	10	0.48	0.02	0.49
(1,348)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:H	10	0.47	0.1	0.5
(3,329)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:H	10	0.47	0.1	0.5
(1,304)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB2	10	0.47	0.12	0.48
(3,289)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB2	10	0.47	0.12	0.48
(2,325)	1:11:A:TRP:HZ2	1:11:A:TRP:HZ3	10	0.45	0.01	0.46
(2,106)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HB	10	0.45	0.01	0.45
(2,57)	1:16:A:GLY:HA2	1:16:A:GLY:HA3	10	0.45	0.01	0.45
(2,28)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HB2	10	0.44	0.07	0.47
(2,23)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HB3	10	0.44	0.0	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(2,288)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	10	0.44	0.01	0.45
(2,387)	1:21:A:ARG:HB2	1:22:A:PRO:HD2	10	0.44	0.24	0.37
(2,48)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HB3	10	0.44	0.01	0.43
(2,303)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	10	0.43	0.11	0.45
(2,397)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HG3	10	0.42	0.0	0.42
(2,397)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HG3	10	0.42	0.0	0.42
(2,33)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD2	10	0.42	0.07	0.42
(2,33)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD3	10	0.42	0.07	0.42
(2,33)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HD2	10	0.42	0.07	0.42
(2,33)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HD3	10	0.42	0.07	0.42
(2,409)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	10	0.42	0.05	0.42
(2,409)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	10	0.42	0.05	0.42
(2,409)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	10	0.42	0.05	0.42
(2,173)	1:9:A:ILE:HG12	1:9:A:ILE:HG21	10	0.41	0.01	0.41
(2,173)	1:9:A:ILE:HG12	1:9:A:ILE:HG22	10	0.41	0.01	0.41
(2,173)	1:9:A:ILE:HG12	1:9:A:ILE:HG23	10	0.41	0.01	0.41
(2,336)	1:1:A:GLU:HB2	1:1:A:GLU:HG2	10	0.41	0.03	0.42
(2,336)	1:1:A:GLU:HB2	1:1:A:GLU:HG3	10	0.41	0.03	0.42
(2,336)	1:1:A:GLU:HB3	1:1:A:GLU:HG2	10	0.41	0.03	0.42
(2,336)	1:1:A:GLU:HB3	1:1:A:GLU:HG3	10	0.41	0.03	0.42
(2,242)	1:14:A:GLU:HG2	1:14:A:GLU:HG3	10	0.4	0.0	0.4
(2,89)	1:25:A:SER:HA	1:25:A:SER:HB2	10	0.4	0.07	0.39
(2,89)	1:25:A:SER:HA	1:25:A:SER:HB3	10	0.4	0.07	0.39
(2,164)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:H	10	0.4	0.13	0.34
(2,67)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HG3	10	0.4	0.01	0.4
(2,81)	1:24:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HG3	10	0.39	0.06	0.41
(2,221)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HG2	10	0.38	0.13	0.36
(2,229)	1:13:A:LYS:HG2	1:13:A:LYS:HG3	10	0.38	0.01	0.38
(2,51)	1:22:A:PRO:HD2	1:22:A:PRO:HG2	10	0.37	0.01	0.37
(2,51)	1:22:A:PRO:HD2	1:22:A:PRO:HG3	10	0.37	0.01	0.37
(2,105)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:H	10	0.37	0.03	0.38
(1,65)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HG2	10	0.37	0.01	0.37
(3,65)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HG2	10	0.37	0.01	0.37
(1,281)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD21	10	0.36	0.06	0.38
(1,281)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD22	10	0.36	0.06	0.38
(1,281)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD23	10	0.36	0.06	0.38
(1,281)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD21	10	0.36	0.06	0.38
(1,281)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD22	10	0.36	0.06	0.38
(1,281)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD23	10	0.36	0.06	0.38
(4,13)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD21	10	0.36	0.06	0.38
(4,13)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD22	10	0.36	0.06	0.38
(4,13)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD23	10	0.36	0.06	0.38

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(4,13)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD21	10	0.36	0.06	0.38
(4,13)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD22	10	0.36	0.06	0.38
(4,13)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD23	10	0.36	0.06	0.38
(2,79)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HG2	10	0.36	0.04	0.38
(2,371)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD2	10	0.36	0.04	0.36
(2,371)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD3	10	0.36	0.04	0.36
(1,107)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	10	0.36	0.0	0.36
(1,107)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	10	0.36	0.0	0.36
(1,107)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	10	0.36	0.0	0.36
(4,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	10	0.36	0.0	0.36
(4,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	10	0.36	0.0	0.36
(4,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	10	0.36	0.0	0.36
(2,52)	1:22:A:PRO:HD3	1:22:A:PRO:HG2	10	0.36	0.02	0.35
(2,52)	1:22:A:PRO:HD3	1:22:A:PRO:HG3	10	0.36	0.02	0.35
(2,254)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG2	10	0.36	0.0	0.36
(2,254)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG3	10	0.36	0.0	0.36
(1,326)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:H	10	0.36	0.04	0.36
(1,326)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:H	10	0.36	0.04	0.36
(1,468)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	10	0.36	0.04	0.36
(1,468)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	10	0.36	0.04	0.36
(1,468)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	10	0.36	0.04	0.36
(3,430)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	10	0.36	0.04	0.36
(3,430)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	10	0.36	0.04	0.36
(3,430)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	10	0.36	0.04	0.36
(4,19)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:H	10	0.36	0.04	0.36
(4,19)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:H	10	0.36	0.04	0.36
(1,366)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:H	10	0.35	0.03	0.34
(1,366)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:H	10	0.35	0.03	0.34
(1,366)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:H	10	0.35	0.03	0.34
(4,22)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:H	10	0.35	0.03	0.34
(4,22)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:H	10	0.35	0.03	0.34
(4,22)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:H	10	0.35	0.03	0.34
(1,181)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG12	10	0.35	0.01	0.34
(3,175)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG12	10	0.35	0.01	0.34
(2,231)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HB3	10	0.35	0.02	0.34
(2,225)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HE2	10	0.34	0.04	0.32
(2,225)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HE3	10	0.34	0.04	0.32
(2,225)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HE2	10	0.34	0.04	0.32
(2,225)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HE3	10	0.34	0.04	0.32
(2,210)	1:12:A:LEU:HD11	1:12:A:LEU:HG	10	0.34	0.01	0.34
(2,210)	1:12:A:LEU:HD12	1:12:A:LEU:HG	10	0.34	0.01	0.34
(2,210)	1:12:A:LEU:HD13	1:12:A:LEU:HG	10	0.34	0.01	0.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(2,259)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HB3	10	0.34	0.0	0.34
(1,390)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	10	0.32	0.13	0.33
(3,364)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	10	0.32	0.13	0.33
(2,365)	1:9:A:ILE:HB	1:10:A:GLN:H	10	0.32	0.03	0.32
(2,199)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HB3	10	0.32	0.0	0.32
(1,160)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	10	0.32	0.02	0.32
(1,160)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	10	0.32	0.02	0.32
(4,5)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	10	0.32	0.02	0.32
(4,5)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	10	0.32	0.02	0.32
(2,162)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HB2	10	0.31	0.01	0.31
(2,55)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HB3	10	0.31	0.0	0.31
(2,264)	1:19:A:SER:HB2	1:19:A:SER:HB3	10	0.31	0.01	0.31
(2,356)	1:7:A:LEU:HB2	1:8:A:TYR:H	10	0.3	0.09	0.34
(2,62)	1:23:A:PRO:HD2	1:23:A:PRO:HG2	10	0.3	0.01	0.3
(2,62)	1:23:A:PRO:HD3	1:23:A:PRO:HG2	10	0.3	0.01	0.3
(1,513)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:H	10	0.29	0.07	0.29
(4,44)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:H	10	0.29	0.07	0.29
(2,175)	1:9:A:ILE:HG12	1:9:A:ILE:HG13	10	0.29	0.0	0.29
(2,208)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HB3	10	0.29	0.0	0.29
(2,425)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD21	10	0.29	0.05	0.31
(2,425)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD22	10	0.29	0.05	0.31
(2,425)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD23	10	0.29	0.05	0.31
(2,460)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HG2	10	0.29	0.01	0.29
(2,460)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HG3	10	0.29	0.01	0.29
(2,83)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HG2	10	0.29	0.04	0.27
(2,330)	1:14:A:GLU:H	1:15:A:GLY:H	10	0.28	0.06	0.28
(2,171)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HD11	10	0.28	0.06	0.26
(2,171)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HD12	10	0.28	0.06	0.26
(2,171)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HD13	10	0.28	0.06	0.26
(2,11)	1:19:A:SER:H	1:19:A:SER:HA	10	0.27	0.03	0.26
(2,71)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HB3	10	0.27	0.03	0.27
(2,176)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HG13	10	0.27	0.01	0.28
(2,245)	1:14:A:GLU:H	1:14:A:GLU:HG2	10	0.27	0.05	0.28
(2,355)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:H	10	0.26	0.07	0.26
(2,435)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	10	0.26	0.09	0.29
(2,447)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HG13	10	0.26	0.05	0.24
(2,447)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HG13	10	0.26	0.05	0.24
(2,133)	1:6:A:ARG:HG2	1:6:A:ARG:HG3	10	0.26	0.01	0.26
(2,317)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HG2	10	0.26	0.02	0.25
(2,317)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HG3	10	0.26	0.02	0.25
(2,170)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	10	0.25	0.01	0.26
(2,170)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	10	0.25	0.01	0.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(2,170)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	10	0.25	0.01	0.26
(1,183)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG21	10	0.25	0.01	0.25
(1,183)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG22	10	0.25	0.01	0.25
(1,183)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG23	10	0.25	0.01	0.25
(4,7)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG21	10	0.25	0.01	0.25
(4,7)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG22	10	0.25	0.01	0.25
(4,7)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG23	10	0.25	0.01	0.25
(2,211)	1:12:A:LEU:HD21	1:12:A:LEU:HG	10	0.25	0.01	0.25
(2,211)	1:12:A:LEU:HD22	1:12:A:LEU:HG	10	0.25	0.01	0.25
(2,211)	1:12:A:LEU:HD23	1:12:A:LEU:HG	10	0.25	0.01	0.25
(2,260)	1:18:A:SER:HA	1:18:A:SER:HB2	10	0.25	0.08	0.21
(2,260)	1:18:A:SER:HA	1:18:A:SER:HB3	10	0.25	0.08	0.21
(1,342)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:H	10	0.24	0.05	0.24
(3,323)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:H	10	0.24	0.05	0.24
(1,255)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD3	10	0.24	0.01	0.24
(3,244)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD3	10	0.24	0.01	0.24
(2,61)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	10	0.24	0.05	0.22
(2,61)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD3	10	0.24	0.05	0.22
(2,333)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HB2	10	0.23	0.03	0.24
(2,34)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HG2	10	0.23	0.06	0.22
(2,34)	1:21:A:ARG:HD3	1:21:A:ARG:HG2	10	0.23	0.06	0.22
(2,108)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG21	10	0.22	0.02	0.22
(2,108)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG22	10	0.22	0.02	0.22
(2,108)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG23	10	0.22	0.02	0.22
(2,256)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG2	10	0.22	0.0	0.22
(2,256)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG3	10	0.22	0.0	0.22
(1,404)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HA	10	0.22	0.04	0.22
(1,404)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HA	10	0.22	0.04	0.22
(1,404)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HA	10	0.22	0.04	0.22
(4,28)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HA	10	0.22	0.04	0.22
(4,28)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HA	10	0.22	0.04	0.22
(4,28)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HA	10	0.22	0.04	0.22
(2,147)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HB3	10	0.21	0.0	0.21
(2,95)	1:3:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	10	0.21	0.04	0.2
(2,27)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HD3	10	0.21	0.01	0.21
(1,506)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG2	10	0.2	0.03	0.2
(4,43)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG2	10	0.2	0.03	0.2
(2,142)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HB3	10	0.2	0.1	0.15
(1,159)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	10	0.2	0.01	0.21
(1,159)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	10	0.2	0.01	0.21
(3,155)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	10	0.2	0.01	0.21
(3,155)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	10	0.2	0.01	0.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(2,45)	1:22:A:PRO:HD2	1:22:A:PRO:HD3	10	0.2	0.01	0.2
(2,203)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HB3	10	0.19	0.02	0.19
(1,399)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HB2	10	0.19	0.03	0.2
(1,399)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HB2	10	0.19	0.03	0.2
(1,399)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HB2	10	0.19	0.03	0.2
(4,27)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HB2	10	0.19	0.03	0.2
(4,27)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HB2	10	0.19	0.03	0.2
(4,27)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HB2	10	0.19	0.03	0.2
(2,184)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD11	10	0.18	0.05	0.17
(2,184)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD12	10	0.18	0.05	0.17
(2,184)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD13	10	0.18	0.05	0.17
(2,213)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD11	10	0.18	0.04	0.2
(2,213)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD12	10	0.18	0.04	0.2
(2,213)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD13	10	0.18	0.04	0.2
(2,252)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HD3	10	0.18	0.0	0.18
(2,437)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG12	10	0.18	0.06	0.16
(2,437)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG12	10	0.18	0.06	0.16
(2,59)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG3	10	0.17	0.01	0.17
(2,424)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG13	10	0.17	0.03	0.17
(2,424)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG13	10	0.17	0.03	0.17
(2,424)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG13	10	0.17	0.03	0.17
(2,501)	1:2:A:GLU:HB2	1:2:A:GLU:HB3	10	0.17	0.01	0.17
(2,329)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:H	10	0.16	0.06	0.15
(2,329)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:H	10	0.16	0.06	0.15
(1,239)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HG3	10	0.16	0.09	0.13
(3,229)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HG3	10	0.16	0.09	0.13
(1,179)	1:9:A:ILE:HG13	1:9:A:ILE:HG21	10	0.16	0.01	0.16
(1,179)	1:9:A:ILE:HG13	1:9:A:ILE:HG22	10	0.16	0.01	0.16
(1,179)	1:9:A:ILE:HG13	1:9:A:ILE:HG23	10	0.16	0.01	0.16
(3,173)	1:9:A:ILE:HG13	1:9:A:ILE:HG21	10	0.16	0.01	0.16
(3,173)	1:9:A:ILE:HG13	1:9:A:ILE:HG22	10	0.16	0.01	0.16
(3,173)	1:9:A:ILE:HG13	1:9:A:ILE:HG23	10	0.16	0.01	0.16
(1,154)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:H	10	0.16	0.01	0.16
(4,4)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:H	10	0.16	0.01	0.16
(2,258)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HG2	10	0.15	0.01	0.15
(2,258)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HG3	10	0.15	0.01	0.15
(2,24)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HB2	10	0.13	0.02	0.14
(2,469)	1:1:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:H	9	1.21	0.15	1.16
(2,469)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:H	9	1.21	0.15	1.16
(1,481)	1:21:A:ARG:HB3	1:22:A:PRO:HD3	9	1.09	0.29	1.18
(3,441)	1:21:A:ARG:HB3	1:22:A:PRO:HD3	9	1.09	0.29	1.18
(2,274)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG2	9	0.85	0.4	1.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(2,274)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG2	9	0.85	0.4	1.1
(2,486)	1:23:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HD2	9	0.71	0.34	0.58
(2,408)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HD3	9	0.61	0.12	0.65
(2,408)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HD3	9	0.61	0.12	0.65
(2,408)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HD3	9	0.61	0.12	0.65
(2,463)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB3	9	0.59	0.23	0.57
(2,463)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB3	9	0.59	0.23	0.57
(2,463)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB3	9	0.59	0.23	0.57
(2,40)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HB3	9	0.48	0.15	0.51
(2,93)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HB3	9	0.41	0.21	0.44
(2,244)	1:14:A:GLU:HB3	1:14:A:GLU:HG2	9	0.38	0.02	0.38
(2,316)	1:10:A:GLN:HE21	1:14:A:GLU:HG2	9	0.31	0.08	0.29
(2,240)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HB2	9	0.29	0.01	0.29
(2,390)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD2	9	0.26	0.1	0.21
(2,390)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	9	0.26	0.1	0.21
(2,128)	1:6:A:ARG:HD3	1:6:A:ARG:HG2	9	0.25	0.05	0.26
(1,358)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:H	9	0.23	0.03	0.24
(1,358)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:H	9	0.23	0.03	0.24
(1,358)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:H	9	0.23	0.03	0.24
(4,20)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:H	9	0.23	0.03	0.24
(4,20)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:H	9	0.23	0.03	0.24
(4,20)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:H	9	0.23	0.03	0.24
(2,328)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:H	9	0.2	0.05	0.2
(1,247)	1:14:A:GLU:H	1:14:A:GLU:HB2	9	0.18	0.01	0.18
(4,11)	1:14:A:GLU:H	1:14:A:GLU:HB2	9	0.18	0.01	0.18
(2,99)	1:3:A:GLU:H	1:3:A:GLU:HB3	9	0.17	0.06	0.2
(2,241)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HB3	9	0.13	0.03	0.12
(2,169)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG21	9	0.12	0.01	0.12
(2,169)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG22	9	0.12	0.01	0.12
(2,169)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG23	9	0.12	0.01	0.12
(1,461)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:HD21	8	1.22	0.26	1.34
(1,461)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:HD22	8	1.22	0.26	1.34
(1,461)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:HD23	8	1.22	0.26	1.34
(3,426)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:HD21	8	1.22	0.26	1.34
(3,426)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:HD22	8	1.22	0.26	1.34
(3,426)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:HD23	8	1.22	0.26	1.34
(2,292)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HG2	8	1.16	0.02	1.16
(2,512)	1:2:A:GLU:HB2	1:3:A:GLU:HA	8	1.14	0.3	1.06
(2,380)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HG3	8	1.06	0.05	1.05
(1,504)	1:8:A:TYR:HB3	1:24:A:PRO:HG3	8	1.06	0.63	0.71
(3,462)	1:8:A:TYR:HB3	1:24:A:PRO:HG3	8	1.06	0.63	0.71
(1,465)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	8	1.03	0.35	0.84

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,465)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	8	1.03	0.35	0.84
(1,465)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	8	1.03	0.35	0.84
(3,428)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	8	1.03	0.35	0.84
(3,428)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	8	1.03	0.35	0.84
(3,428)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	8	1.03	0.35	0.84
(2,378)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HG2	8	0.95	0.05	0.94
(2,261)	1:18:A:SER:H	1:18:A:SER:HB2	8	0.79	0.25	0.86
(2,261)	1:18:A:SER:H	1:18:A:SER:HB3	8	0.79	0.25	0.86
(2,223)	1:13:A:LYS:HE2	1:13:A:LYS:HG3	8	0.78	0.13	0.81
(2,223)	1:13:A:LYS:HE3	1:13:A:LYS:HG3	8	0.78	0.13	0.81
(2,430)	1:20:A:GLY:H	1:21:A:ARG:H	8	0.76	0.3	0.7
(2,417)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HB2	8	0.7	0.39	0.67
(2,417)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HB2	8	0.7	0.39	0.67
(2,417)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HB2	8	0.7	0.39	0.67
(2,119)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG2	8	0.6	0.12	0.66
(2,91)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG2	8	0.55	0.17	0.58
(2,91)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG3	8	0.55	0.17	0.58
(2,134)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HB2	8	0.52	0.02	0.52
(2,123)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HD2	8	0.5	0.06	0.5
(2,478)	1:21:A:ARG:HB3	1:22:A:PRO:HD3	8	0.49	0.03	0.48
(1,386)	1:21:A:ARG:HB2	1:22:A:PRO:HD3	8	0.46	0.05	0.48
(3,360)	1:21:A:ARG:HB2	1:22:A:PRO:HD3	8	0.46	0.05	0.48
(2,69)	1:23:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD2	8	0.41	0.18	0.43
(2,76)	1:24:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	8	0.4	0.2	0.36
(1,452)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HB3	8	0.39	0.12	0.36
(3,417)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HB3	8	0.39	0.12	0.36
(2,44)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD3	8	0.36	0.14	0.31
(2,31)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HG3	8	0.36	0.08	0.39
(1,321)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB2	8	0.32	0.04	0.32
(4,16)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB2	8	0.32	0.04	0.32
(1,434)	1:11:A:TRP:HZ3	1:17:A:PRO:HD2	8	0.3	0.08	0.3
(3,402)	1:11:A:TRP:HZ3	1:17:A:PRO:HD2	8	0.3	0.08	0.3
(2,187)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG2	8	0.28	0.14	0.21
(2,187)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	8	0.28	0.14	0.21
(2,88)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HB2	8	0.28	0.11	0.26
(2,88)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HB3	8	0.28	0.11	0.26
(1,135)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HB3	8	0.24	0.02	0.24
(3,133)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HB3	8	0.24	0.02	0.24
(2,473)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:HE3	8	0.23	0.1	0.18
(2,473)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:HE3	8	0.23	0.1	0.18
(2,496)	1:3:A:GLU:HA	1:6:A:ARG:HB2	8	0.21	0.07	0.2
(2,384)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HD3	8	0.2	0.04	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(2,263)	1:19:A:SER:HA	1:19:A:SER:HB3	8	0.15	0.02	0.15
(1,492)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:H	8	0.15	0.02	0.15
(3,451)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:H	8	0.15	0.02	0.15
(2,381)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG2	7	0.88	0.23	0.74
(2,381)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG3	7	0.88	0.23	0.74
(2,470)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:H	7	0.83	0.34	0.86
(2,217)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD11	7	0.66	0.14	0.58
(2,217)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD12	7	0.66	0.14	0.58
(2,217)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD13	7	0.66	0.14	0.58
(2,461)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:HD21	7	0.63	0.09	0.66
(2,461)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:HD22	7	0.63	0.09	0.66
(2,461)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:HD23	7	0.63	0.09	0.66
(2,318)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HG3	7	0.63	0.46	0.4
(2,401)	1:2:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	7	0.46	0.14	0.53
(2,401)	1:2:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	7	0.46	0.14	0.53
(2,401)	1:2:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	7	0.46	0.14	0.53
(2,352)	1:15:A:GLY:HA3	1:16:A:GLY:H	7	0.44	0.09	0.39
(2,265)	1:19:A:SER:H	1:19:A:SER:HB2	7	0.43	0.23	0.42
(2,314)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD11	7	0.4	0.19	0.3
(2,314)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD12	7	0.4	0.19	0.3
(2,314)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD13	7	0.4	0.19	0.3
(2,32)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD2	7	0.39	0.05	0.38
(2,32)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD3	7	0.39	0.05	0.38
(1,275)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB3	7	0.38	0.09	0.45
(1,275)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB3	7	0.38	0.09	0.45
(3,264)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB3	7	0.38	0.09	0.45
(3,264)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB3	7	0.38	0.09	0.45
(2,9)	1:16:A:GLY:H	1:16:A:GLY:HA2	7	0.34	0.01	0.34
(2,68)	1:23:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD3	7	0.32	0.17	0.39
(2,189)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HB3	7	0.26	0.1	0.22
(2,43)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD2	7	0.25	0.06	0.26
(2,215)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HG	7	0.23	0.14	0.12
(2,193)	1:10:A:GLN:HB3	1:10:A:GLN:HG2	7	0.2	0.01	0.2
(2,193)	1:10:A:GLN:HB3	1:10:A:GLN:HG3	7	0.2	0.01	0.2
(1,206)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD21	7	0.19	0.07	0.16
(1,206)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD22	7	0.19	0.07	0.16
(1,206)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD23	7	0.19	0.07	0.16
(4,10)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD21	7	0.19	0.07	0.16
(4,10)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD22	7	0.19	0.07	0.16
(4,10)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD23	7	0.19	0.07	0.16
(1,188)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HB2	7	0.17	0.06	0.14
(4,9)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HB2	7	0.17	0.06	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(2,236)	1:13:A:LYS:H	1:14:A:GLU:H	7	0.16	0.05	0.13
(2,145)	1:7:A:LEU:HD11	1:7:A:LEU:HG	7	0.11	0.0	0.11
(2,145)	1:7:A:LEU:HD12	1:7:A:LEU:HG	7	0.11	0.0	0.11
(2,145)	1:7:A:LEU:HD13	1:7:A:LEU:HG	7	0.11	0.0	0.11
(1,421)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HD3	6	0.74	0.18	0.69
(1,421)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HD3	6	0.74	0.18	0.69
(1,421)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HD3	6	0.74	0.18	0.69
(3,391)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HD3	6	0.74	0.18	0.69
(3,391)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HD3	6	0.74	0.18	0.69
(3,391)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HD3	6	0.74	0.18	0.69
(2,224)	1:13:A:LYS:HE2	1:13:A:LYS:HG2	6	0.73	0.22	0.83
(2,224)	1:13:A:LYS:HE3	1:13:A:LYS:HG2	6	0.73	0.22	0.83
(2,497)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD21	6	0.68	0.11	0.72
(2,497)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD22	6	0.68	0.11	0.72
(2,497)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD23	6	0.68	0.11	0.72
(1,136)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HG2	6	0.52	0.22	0.63
(3,134)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HG2	6	0.52	0.22	0.63
(1,415)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HB2	6	0.46	0.4	0.34
(1,415)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HB2	6	0.46	0.4	0.34
(1,415)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HB2	6	0.46	0.4	0.34
(3,386)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HB2	6	0.46	0.4	0.34
(3,386)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HB2	6	0.46	0.4	0.34
(3,386)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HB2	6	0.46	0.4	0.34
(1,233)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HD2	6	0.45	0.1	0.46
(3,223)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HD2	6	0.45	0.1	0.46
(2,14)	1:20:A:GLY:H	1:20:A:GLY:HA3	6	0.39	0.07	0.38
(2,422)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HG2	6	0.32	0.08	0.32
(2,422)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HG2	6	0.32	0.08	0.32
(2,422)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HG2	6	0.32	0.08	0.32
(2,406)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	6	0.27	0.09	0.32
(2,406)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	6	0.27	0.09	0.32
(2,406)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	6	0.27	0.09	0.32
(1,277)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HG	6	0.19	0.08	0.15
(1,277)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HG	6	0.19	0.08	0.15
(4,12)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HG	6	0.19	0.08	0.15
(4,12)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HG	6	0.19	0.08	0.15
(2,54)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD3	6	0.12	0.02	0.12
(1,216)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HB3	6	0.11	0.01	0.11
(3,206)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HB3	6	0.11	0.01	0.11
(1,414)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	5	1.45	0.09	1.49
(1,414)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	5	1.45	0.09	1.49
(1,414)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	5	1.45	0.09	1.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(3,385)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	5	1.45	0.09	1.49
(3,385)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	5	1.45	0.09	1.49
(3,385)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	5	1.45	0.09	1.49
(2,483)	1:7:A:LEU:HD21	1:10:A:GLN:HG2	5	0.78	0.33	0.93
(2,483)	1:7:A:LEU:HD22	1:10:A:GLN:HG2	5	0.78	0.33	0.93
(2,483)	1:7:A:LEU:HD23	1:10:A:GLN:HG2	5	0.78	0.33	0.93
(2,483)	1:7:A:LEU:HD21	1:10:A:GLN:HG3	5	0.78	0.33	0.93
(2,483)	1:7:A:LEU:HD22	1:10:A:GLN:HG3	5	0.78	0.33	0.93
(2,483)	1:7:A:LEU:HD23	1:10:A:GLN:HG3	5	0.78	0.33	0.93
(2,491)	1:19:A:SER:HB3	1:20:A:GLY:H	5	0.61	0.21	0.76
(2,465)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	5	0.55	0.32	0.8
(2,465)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	5	0.55	0.32	0.8
(2,465)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	5	0.55	0.32	0.8
(2,418)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG11	5	0.53	0.18	0.49
(2,418)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG12	5	0.53	0.18	0.49
(2,418)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG13	5	0.53	0.18	0.49
(2,353)	1:16:A:GLY:H	1:19:A:SER:HB3	5	0.51	0.13	0.45
(2,150)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HG	5	0.46	0.17	0.54
(2,125)	1:6:A:ARG:HD2	1:6:A:ARG:HG2	5	0.46	0.06	0.44
(2,482)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HB2	5	0.43	0.31	0.24
(2,120)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG3	5	0.42	0.18	0.42
(2,385)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HB2	5	0.33	0.14	0.26
(2,94)	1:3:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HG2	5	0.32	0.04	0.34
(2,94)	1:3:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HG3	5	0.32	0.04	0.34
(2,127)	1:6:A:ARG:HD3	1:6:A:ARG:HG3	5	0.31	0.05	0.3
(2,98)	1:3:A:GLU:H	1:3:A:GLU:HB2	5	0.23	0.12	0.16
(2,262)	1:19:A:SER:HA	1:19:A:SER:HB2	5	0.17	0.02	0.16
(1,42)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HG3	5	0.16	0.04	0.17
(3,42)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HG3	5	0.16	0.04	0.17
(2,80)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HG3	5	0.13	0.03	0.12
(1,312)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HB2	5	0.12	0.02	0.11
(2,168)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG13	5	0.12	0.02	0.12
(3,297)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HB2	5	0.12	0.02	0.11
(2,396)	1:3:A:GLU:HB3	1:3:A:GLU:HG2	5	0.11	0.0	0.11
(2,396)	1:3:A:GLU:HB3	1:3:A:GLU:HG3	5	0.11	0.0	0.11
(2,220)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD2	4	1.2	0.07	1.21
(1,353)	1:16:A:GLY:H	1:19:A:SER:HB3	4	1.1	0.23	1.1
(3,334)	1:16:A:GLY:H	1:19:A:SER:HB3	4	1.1	0.23	1.1
(2,331)	1:19:A:SER:H	1:20:A:GLY:H	4	1.03	0.29	1.06
(1,293)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB3	4	0.62	0.49	0.6
(3,278)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB3	4	0.62	0.49	0.6
(2,412)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HE2	4	0.6	0.17	0.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(2,412)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HE2	4	0.6	0.17	0.66
(2,412)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HE2	4	0.6	0.17	0.66
(2,412)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HE3	4	0.6	0.17	0.66
(2,412)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HE3	4	0.6	0.17	0.66
(2,412)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HE3	4	0.6	0.17	0.66
(1,344)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:H	4	0.47	0.35	0.46
(3,325)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:H	4	0.47	0.35	0.46
(2,416)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD21	4	0.44	0.21	0.46
(2,416)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD22	4	0.44	0.21	0.46
(2,416)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD23	4	0.44	0.21	0.46
(2,416)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD21	4	0.44	0.21	0.46
(2,416)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD22	4	0.44	0.21	0.46
(2,416)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD23	4	0.44	0.21	0.46
(2,276)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG3	4	0.42	0.28	0.42
(2,276)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG3	4	0.42	0.28	0.42
(2,124)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HD3	4	0.38	0.24	0.29
(2,335)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HG2	4	0.36	0.13	0.4
(2,335)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HG3	4	0.36	0.13	0.4
(2,266)	1:19:A:SER:H	1:19:A:SER:HB3	4	0.33	0.15	0.35
(2,459)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HD2	4	0.32	0.1	0.28
(2,459)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HD2	4	0.32	0.1	0.28
(2,459)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HD2	4	0.32	0.1	0.28
(2,237)	1:15:A:GLY:H	1:16:A:GLY:H	4	0.28	0.11	0.29
(1,495)	1:19:A:SER:HA	1:20:A:GLY:H	4	0.24	0.06	0.25
(3,454)	1:19:A:SER:HA	1:20:A:GLY:H	4	0.24	0.06	0.25
(1,400)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HB	4	0.14	0.02	0.14
(1,400)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HB	4	0.14	0.02	0.14
(1,400)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HB	4	0.14	0.02	0.14
(3,373)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HB	4	0.14	0.02	0.14
(3,373)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HB	4	0.14	0.02	0.14
(3,373)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HB	4	0.14	0.02	0.14
(1,331)	1:19:A:SER:H	1:20:A:GLY:H	4	0.14	0.03	0.14
(3,312)	1:19:A:SER:H	1:20:A:GLY:H	4	0.14	0.03	0.14
(1,284)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE1	4	0.13	0.01	0.13
(1,284)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE2	4	0.13	0.01	0.13
(1,284)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE1	4	0.13	0.01	0.13
(1,284)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE2	4	0.13	0.01	0.13
(1,284)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE1	4	0.13	0.01	0.13
(1,284)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE2	4	0.13	0.01	0.13
(3,271)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE1	4	0.13	0.01	0.13
(3,271)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE2	4	0.13	0.01	0.13
(3,271)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE1	4	0.13	0.01	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(3,271)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE2	4	0.13	0.01	0.13
(3,271)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE1	4	0.13	0.01	0.13
(3,271)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE2	4	0.13	0.01	0.13
(2,85)	1:24:A:PRO:HG2	1:24:A:PRO:HG3	4	0.12	0.01	0.12
(1,419)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG12	4	0.12	0.0	0.12
(1,419)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG12	4	0.12	0.0	0.12
(1,419)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG12	4	0.12	0.0	0.12
(3,389)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG12	4	0.12	0.0	0.12
(3,389)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG12	4	0.12	0.0	0.12
(3,389)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG12	4	0.12	0.0	0.12
(2,484)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	3	1.21	0.04	1.21
(2,484)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	3	1.21	0.04	1.21
(2,484)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	3	1.21	0.04	1.21
(2,484)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG3	3	1.21	0.04	1.21
(2,484)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG3	3	1.21	0.04	1.21
(2,484)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG3	3	1.21	0.04	1.21
(2,354)	1:15:A:GLY:HA2	1:16:A:GLY:H	3	0.76	0.02	0.76
(2,337)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:H	3	0.75	0.14	0.67
(2,464)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:HA2	3	0.55	0.27	0.44
(2,464)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:HA2	3	0.55	0.27	0.44
(2,464)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:HA2	3	0.55	0.27	0.44
(1,410)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD11	3	0.4	0.01	0.4
(1,410)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD12	3	0.4	0.01	0.4
(1,410)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD13	3	0.4	0.01	0.4
(2,438)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB2	3	0.4	0.21	0.52
(2,438)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB2	3	0.4	0.21	0.52
(4,29)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD11	3	0.4	0.01	0.4
(4,29)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD12	3	0.4	0.01	0.4
(4,29)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD13	3	0.4	0.01	0.4
(2,471)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:H	3	0.35	0.14	0.44
(2,471)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:H	3	0.35	0.14	0.44
(2,10)	1:16:A:GLY:H	1:16:A:GLY:HA3	3	0.25	0.01	0.26
(2,315)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD21	3	0.19	0.04	0.18
(2,315)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD22	3	0.19	0.04	0.18
(2,315)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD23	3	0.19	0.04	0.18
(2,130)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HG2	3	0.19	0.09	0.14
(2,295)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HA	3	0.17	0.04	0.19
(1,289)	1:11:A:TRP:HD1	1:24:A:PRO:HD3	3	0.16	0.04	0.17
(2,338)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:H	3	0.16	0.03	0.15
(3,274)	1:11:A:TRP:HD1	1:24:A:PRO:HD3	3	0.16	0.04	0.17
(2,84)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HG3	3	0.16	0.04	0.18
(2,320)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB3	3	0.15	0.03	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,41)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HG2	3	0.14	0.04	0.12
(3,41)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HG2	3	0.14	0.04	0.12
(1,137)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HG3	3	0.14	0.05	0.11
(3,135)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HG3	3	0.14	0.05	0.11
(1,380)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HG3	3	0.14	0.02	0.14
(4,26)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HG3	3	0.14	0.02	0.14
(1,205)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD11	3	0.13	0.01	0.13
(1,205)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD12	3	0.13	0.01	0.13
(1,205)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD13	3	0.13	0.01	0.13
(3,196)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD11	3	0.13	0.01	0.13
(3,196)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD12	3	0.13	0.01	0.13
(3,196)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD13	3	0.13	0.01	0.13
(2,207)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HG	3	0.12	0.02	0.11
(2,500)	1:8:A:TYR:HB3	1:24:A:PRO:HG3	2	1.46	0.04	1.46
(2,226)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HE2	2	1.2	0.01	1.2
(2,226)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HE3	2	1.2	0.01	1.2
(2,226)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HE2	2	1.2	0.01	1.2
(2,226)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HE3	2	1.2	0.01	1.2
(2,41)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HG2	2	0.93	0.06	0.93
(2,480)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HG2	2	0.87	0.33	0.87
(1,377)	1:11:A:TRP:HA	1:14:A:GLU:HB3	2	0.72	0.6	0.72
(3,352)	1:11:A:TRP:HA	1:14:A:GLU:HB3	2	0.72	0.6	0.72
(2,291)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HG3	2	0.68	0.03	0.68
(1,494)	1:19:A:SER:HB3	1:20:A:GLY:H	2	0.68	0.3	0.68
(3,453)	1:19:A:SER:HB3	1:20:A:GLY:H	2	0.68	0.3	0.68
(1,483)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HG2	2	0.64	0.04	0.64
(3,443)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HG2	2	0.64	0.04	0.64
(1,276)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG3	2	0.64	0.01	0.64
(1,276)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG3	2	0.64	0.01	0.64
(3,265)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG3	2	0.64	0.01	0.64
(3,265)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG3	2	0.64	0.01	0.64
(2,361)	1:20:A:GLY:HA3	1:21:A:ARG:H	2	0.61	0.01	0.61
(2,373)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HD2	2	0.58	0.09	0.58
(2,449)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB2	2	0.57	0.14	0.57
(2,449)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB2	2	0.57	0.14	0.57
(1,320)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB3	2	0.44	0.03	0.44
(3,305)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB3	2	0.44	0.03	0.44
(2,135)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HB3	2	0.4	0.05	0.4
(2,29)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HB3	2	0.4	0.01	0.4
(2,293)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB3	2	0.39	0.05	0.39
(2,75)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HD2	2	0.38	0.01	0.38
(2,495)	1:3:A:GLU:HA	1:6:A:ARG:HB3	2	0.38	0.05	0.38

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(2,117)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HB2	2	0.34	0.01	0.34
(2,494)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HD3	2	0.34	0.05	0.34
(2,410)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD11	2	0.33	0.01	0.33
(2,410)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD12	2	0.33	0.01	0.33
(2,410)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD13	2	0.33	0.01	0.33
(2,436)	1:11:A:TRP:HZ3	1:17:A:PRO:HG2	2	0.3	0.13	0.3
(2,436)	1:11:A:TRP:HZ3	1:17:A:PRO:HG3	2	0.3	0.13	0.3
(2,505)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HE3	2	0.3	0.05	0.3
(2,505)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HE3	2	0.3	0.05	0.3
(1,451)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HA	2	0.25	0.03	0.25
(2,122)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HD2	2	0.25	0.06	0.25
(3,416)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HA	2	0.25	0.03	0.25
(2,73)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG3	2	0.24	0.03	0.24
(1,457)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HG2	2	0.2	0.08	0.2
(1,457)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HG3	2	0.2	0.08	0.2
(3,422)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HG2	2	0.2	0.08	0.2
(3,422)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HG3	2	0.2	0.08	0.2
(2,36)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG3	2	0.2	0.02	0.2
(2,78)	1:24:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HG2	2	0.19	0.0	0.19
(1,337)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:H	2	0.16	0.02	0.16
(3,318)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:H	2	0.16	0.02	0.16
(2,370)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:H	2	0.16	0.04	0.16
(2,370)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:H	2	0.16	0.04	0.16
(2,370)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:H	2	0.16	0.04	0.16
(1,507)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HG2	2	0.16	0.02	0.16
(3,464)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HG2	2	0.16	0.02	0.16
(2,112)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG11	2	0.15	0.03	0.15
(2,112)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG12	2	0.15	0.03	0.15
(2,112)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG13	2	0.15	0.03	0.15
(1,318)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HG3	2	0.14	0.0	0.14
(3,303)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HG3	2	0.14	0.0	0.14
(1,346)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:H	2	0.12	0.01	0.12
(1,346)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:H	2	0.12	0.01	0.12
(1,346)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:H	2	0.12	0.01	0.12
(1,458)	1:23:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	2	0.12	0.0	0.12
(3,327)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:H	2	0.12	0.01	0.12
(3,327)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:H	2	0.12	0.01	0.12
(3,327)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:H	2	0.12	0.01	0.12
(3,423)	1:23:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	2	0.12	0.0	0.12
(1,39)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HB2	2	0.12	0.0	0.12
(3,39)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HB2	2	0.12	0.0	0.12
(1,151)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB3	2	0.11	0.0	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

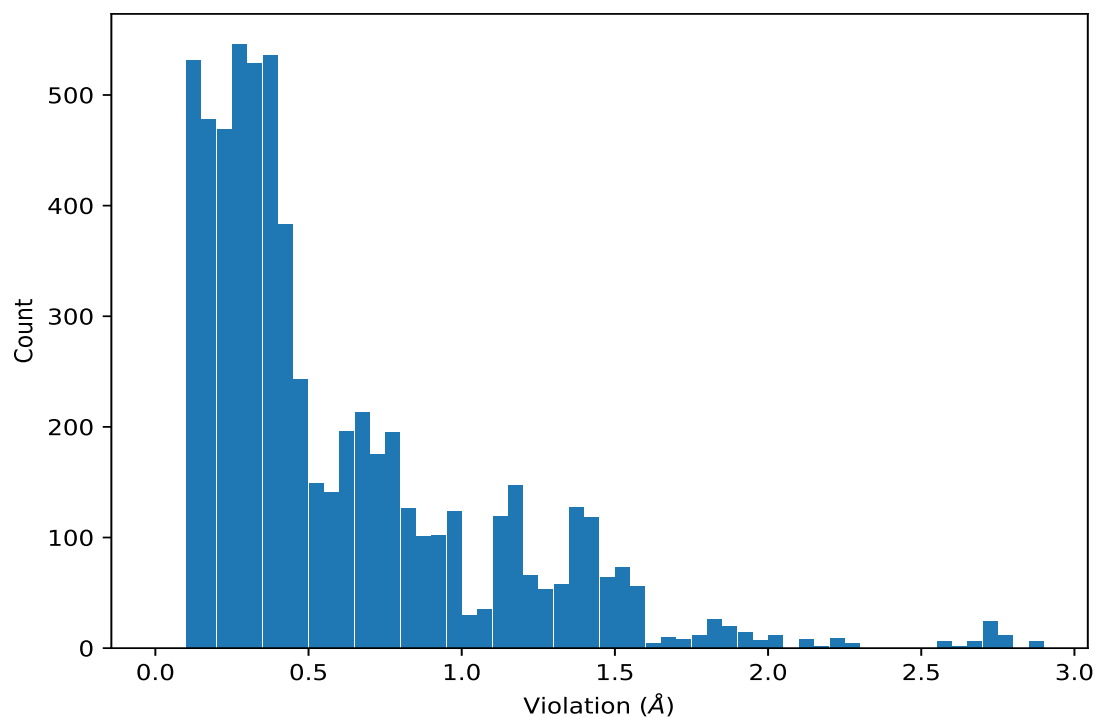
Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(2,3)	1:3:A:GLU:H	1:3:A:GLU:HA	2	0.11	0.0	0.11
(3,148)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB3	2	0.11	0.0	0.11
(2,149)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB2	2	0.11	0.0	0.11

¹Number of violated models, ²Standard deviation

9.5 All violated distance restraints [i](#)

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

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



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

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

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,32)	1:12:A:LEU:HD21	1:13:A:LYS:HG3	9	2.9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,32)	1:12:A:LEU:HD22	1:13:A:LYS:HG3	9	2.9
(4,32)	1:12:A:LEU:HD23	1:13:A:LYS:HG3	9	2.9
(1,427)	1:12:A:LEU:HD21	1:13:A:LYS:HG3	9	2.9
(1,427)	1:12:A:LEU:HD22	1:13:A:LYS:HG3	9	2.9
(1,427)	1:12:A:LEU:HD23	1:13:A:LYS:HG3	9	2.9
(4,32)	1:12:A:LEU:HD21	1:13:A:LYS:HG3	3	2.79
(4,32)	1:12:A:LEU:HD22	1:13:A:LYS:HG3	3	2.79
(4,32)	1:12:A:LEU:HD23	1:13:A:LYS:HG3	3	2.79
(4,32)	1:12:A:LEU:HD21	1:13:A:LYS:HG3	7	2.79
(4,32)	1:12:A:LEU:HD22	1:13:A:LYS:HG3	7	2.79
(4,32)	1:12:A:LEU:HD23	1:13:A:LYS:HG3	7	2.79
(1,427)	1:12:A:LEU:HD21	1:13:A:LYS:HG3	3	2.79
(1,427)	1:12:A:LEU:HD22	1:13:A:LYS:HG3	3	2.79
(1,427)	1:12:A:LEU:HD23	1:13:A:LYS:HG3	3	2.79
(1,427)	1:12:A:LEU:HD21	1:13:A:LYS:HG3	7	2.79
(1,427)	1:12:A:LEU:HD22	1:13:A:LYS:HG3	7	2.79
(1,427)	1:12:A:LEU:HD23	1:13:A:LYS:HG3	7	2.79
(4,32)	1:12:A:LEU:HD21	1:13:A:LYS:HG3	8	2.73
(4,32)	1:12:A:LEU:HD22	1:13:A:LYS:HG3	8	2.73
(4,32)	1:12:A:LEU:HD23	1:13:A:LYS:HG3	8	2.73
(1,427)	1:12:A:LEU:HD21	1:13:A:LYS:HG3	8	2.73
(1,427)	1:12:A:LEU:HD22	1:13:A:LYS:HG3	8	2.73
(1,427)	1:12:A:LEU:HD23	1:13:A:LYS:HG3	8	2.73
(4,32)	1:12:A:LEU:HD21	1:13:A:LYS:HG3	2	2.71
(4,32)	1:12:A:LEU:HD22	1:13:A:LYS:HG3	2	2.71
(4,32)	1:12:A:LEU:HD23	1:13:A:LYS:HG3	2	2.71
(4,32)	1:12:A:LEU:HD21	1:13:A:LYS:HG3	5	2.71
(4,32)	1:12:A:LEU:HD22	1:13:A:LYS:HG3	5	2.71
(4,32)	1:12:A:LEU:HD23	1:13:A:LYS:HG3	5	2.71
(1,427)	1:12:A:LEU:HD21	1:13:A:LYS:HG3	2	2.71
(1,427)	1:12:A:LEU:HD22	1:13:A:LYS:HG3	2	2.71
(1,427)	1:12:A:LEU:HD23	1:13:A:LYS:HG3	2	2.71
(1,427)	1:12:A:LEU:HD21	1:13:A:LYS:HG3	5	2.71
(1,427)	1:12:A:LEU:HD22	1:13:A:LYS:HG3	5	2.71
(1,427)	1:12:A:LEU:HD23	1:13:A:LYS:HG3	5	2.71
(4,32)	1:12:A:LEU:HD21	1:13:A:LYS:HG3	4	2.7
(4,32)	1:12:A:LEU:HD22	1:13:A:LYS:HG3	4	2.7
(4,32)	1:12:A:LEU:HD23	1:13:A:LYS:HG3	4	2.7
(1,427)	1:12:A:LEU:HD21	1:13:A:LYS:HG3	4	2.7
(1,427)	1:12:A:LEU:HD22	1:13:A:LYS:HG3	4	2.7
(1,427)	1:12:A:LEU:HD23	1:13:A:LYS:HG3	4	2.7
(4,32)	1:12:A:LEU:HD21	1:13:A:LYS:HG3	10	2.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,32)	1:12:A:LEU:HD22	1:13:A:LYS:HG3	10	2.68
(4,32)	1:12:A:LEU:HD23	1:13:A:LYS:HG3	10	2.68
(1,427)	1:12:A:LEU:HD21	1:13:A:LYS:HG3	10	2.68
(1,427)	1:12:A:LEU:HD22	1:13:A:LYS:HG3	10	2.68
(1,427)	1:12:A:LEU:HD23	1:13:A:LYS:HG3	10	2.68
(4,45)	1:2:A:GLU:HB2	1:3:A:GLU:HA	1	2.61
(1,516)	1:2:A:GLU:HB2	1:3:A:GLU:HA	1	2.61
(4,32)	1:12:A:LEU:HD21	1:13:A:LYS:HG3	1	2.56
(4,32)	1:12:A:LEU:HD22	1:13:A:LYS:HG3	1	2.56
(4,32)	1:12:A:LEU:HD23	1:13:A:LYS:HG3	1	2.56
(1,427)	1:12:A:LEU:HD21	1:13:A:LYS:HG3	1	2.56
(1,427)	1:12:A:LEU:HD22	1:13:A:LYS:HG3	1	2.56
(1,427)	1:12:A:LEU:HD23	1:13:A:LYS:HG3	1	2.56
(4,40)	1:1:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:H	6	2.26
(4,40)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:H	6	2.26
(1,470)	1:1:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:H	6	2.26
(1,470)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:H	6	2.26
(4,30)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HB2	6	2.21
(4,30)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HB2	6	2.21
(4,30)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HB2	6	2.21
(2,427)	1:12:A:LEU:HD21	1:13:A:LYS:HG3	9	2.21
(2,427)	1:12:A:LEU:HD22	1:13:A:LYS:HG3	9	2.21
(2,427)	1:12:A:LEU:HD23	1:13:A:LYS:HG3	9	2.21
(1,417)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HB2	6	2.21
(1,417)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HB2	6	2.21
(1,417)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HB2	6	2.21
(3,462)	1:8:A:TYR:HB3	1:24:A:PRO:HG3	3	2.18
(1,504)	1:8:A:TYR:HB3	1:24:A:PRO:HG3	3	2.18
(3,462)	1:8:A:TYR:HB3	1:24:A:PRO:HG3	6	2.12
(1,504)	1:8:A:TYR:HB3	1:24:A:PRO:HG3	6	2.12
(2,427)	1:12:A:LEU:HD21	1:13:A:LYS:HG3	3	2.1
(2,427)	1:12:A:LEU:HD22	1:13:A:LYS:HG3	3	2.1
(2,427)	1:12:A:LEU:HD23	1:13:A:LYS:HG3	3	2.1
(2,427)	1:12:A:LEU:HD21	1:13:A:LYS:HG3	7	2.1
(2,427)	1:12:A:LEU:HD22	1:13:A:LYS:HG3	7	2.1
(2,427)	1:12:A:LEU:HD23	1:13:A:LYS:HG3	7	2.1
(2,427)	1:12:A:LEU:HD21	1:13:A:LYS:HG3	8	2.04
(2,427)	1:12:A:LEU:HD22	1:13:A:LYS:HG3	8	2.04
(2,427)	1:12:A:LEU:HD23	1:13:A:LYS:HG3	8	2.04
(2,427)	1:12:A:LEU:HD21	1:13:A:LYS:HG3	2	2.02
(2,427)	1:12:A:LEU:HD22	1:13:A:LYS:HG3	2	2.02
(2,427)	1:12:A:LEU:HD23	1:13:A:LYS:HG3	2	2.02

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,427)	1:12:A:LEU:HD21	1:13:A:LYS:HG3	5	2.02
(2,427)	1:12:A:LEU:HD22	1:13:A:LYS:HG3	5	2.02
(2,427)	1:12:A:LEU:HD23	1:13:A:LYS:HG3	5	2.02
(2,427)	1:12:A:LEU:HD21	1:13:A:LYS:HG3	4	2.01
(2,427)	1:12:A:LEU:HD22	1:13:A:LYS:HG3	4	2.01
(2,427)	1:12:A:LEU:HD23	1:13:A:LYS:HG3	4	2.01
(2,427)	1:12:A:LEU:HD21	1:13:A:LYS:HG3	10	1.99
(2,427)	1:12:A:LEU:HD22	1:13:A:LYS:HG3	10	1.99
(2,427)	1:12:A:LEU:HD23	1:13:A:LYS:HG3	10	1.99
(4,40)	1:1:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:H	7	1.96
(4,40)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:H	7	1.96
(1,470)	1:1:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:H	7	1.96
(1,470)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:H	7	1.96
(4,41)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	8	1.93
(4,41)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	8	1.93
(4,41)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	8	1.93
(4,41)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG3	8	1.93
(4,41)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG3	8	1.93
(4,41)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG3	8	1.93
(1,487)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	8	1.93
(1,487)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	8	1.93
(1,487)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	8	1.93
(1,487)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG3	8	1.93
(1,487)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG3	8	1.93
(1,487)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG3	8	1.93
(4,45)	1:2:A:GLU:HB2	1:3:A:GLU:HA	9	1.92
(1,516)	1:2:A:GLU:HB2	1:3:A:GLU:HA	9	1.92
(2,512)	1:2:A:GLU:HB2	1:3:A:GLU:HA	1	1.89
(4,41)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	3	1.88
(4,41)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	3	1.88
(4,41)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	3	1.88
(4,41)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG3	3	1.88
(4,41)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG3	3	1.88
(4,41)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG3	3	1.88
(1,487)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	3	1.88
(1,487)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	3	1.88
(1,487)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	3	1.88
(1,487)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG3	3	1.88
(1,487)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG3	3	1.88
(1,487)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG3	3	1.88
(2,427)	1:12:A:LEU:HD21	1:13:A:LYS:HG3	1	1.87
(2,427)	1:12:A:LEU:HD22	1:13:A:LYS:HG3	1	1.87

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,427)	1:12:A:LEU:HD23	1:13:A:LYS:HG3	1	1.87
(4,40)	1:1:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:H	5	1.85
(4,40)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:H	5	1.85
(1,470)	1:1:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:H	5	1.85
(1,470)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:H	5	1.85
(4,41)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	5	1.84
(4,41)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	5	1.84
(4,41)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	5	1.84
(4,41)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG3	5	1.84
(4,41)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG3	5	1.84
(4,41)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG3	5	1.84
(4,40)	1:1:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:H	2	1.84
(4,40)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:H	2	1.84
(1,487)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	5	1.84
(1,487)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	5	1.84
(1,487)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	5	1.84
(1,487)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG3	5	1.84
(1,487)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG3	5	1.84
(1,487)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG3	5	1.84
(1,470)	1:1:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:H	2	1.84
(1,470)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:H	2	1.84
(4,40)	1:1:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:H	3	1.82
(4,40)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:H	3	1.82
(4,40)	1:1:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:H	4	1.82
(4,40)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:H	4	1.82
(1,470)	1:1:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:H	3	1.82
(1,470)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:H	3	1.82
(1,470)	1:1:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:H	4	1.82
(1,470)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:H	4	1.82
(4,45)	1:2:A:GLU:HB2	1:3:A:GLU:HA	3	1.8
(1,516)	1:2:A:GLU:HB2	1:3:A:GLU:HA	3	1.8
(4,45)	1:2:A:GLU:HB2	1:3:A:GLU:HA	5	1.79
(1,516)	1:2:A:GLU:HB2	1:3:A:GLU:HA	5	1.79
(4,40)	1:1:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:H	1	1.78
(4,40)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:H	1	1.78
(1,470)	1:1:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:H	1	1.78
(1,470)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:H	1	1.78
(4,45)	1:2:A:GLU:HB2	1:3:A:GLU:HA	8	1.77
(4,40)	1:1:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:H	8	1.77
(4,40)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:H	8	1.77
(1,516)	1:2:A:GLU:HB2	1:3:A:GLU:HA	8	1.77
(1,470)	1:1:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:H	8	1.77

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,470)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:H	8	1.77
(4,45)	1:2:A:GLU:HB2	1:3:A:GLU:HA	4	1.73
(1,516)	1:2:A:GLU:HB2	1:3:A:GLU:HA	4	1.73
(4,40)	1:1:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:H	9	1.72
(4,40)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:H	9	1.72
(1,470)	1:1:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:H	9	1.72
(1,470)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:H	9	1.72
(3,282)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD2	10	1.7
(1,297)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD2	10	1.7
(4,32)	1:12:A:LEU:HD21	1:13:A:LYS:HG3	6	1.68
(4,32)	1:12:A:LEU:HD22	1:13:A:LYS:HG3	6	1.68
(4,32)	1:12:A:LEU:HD23	1:13:A:LYS:HG3	6	1.68
(1,427)	1:12:A:LEU:HD21	1:13:A:LYS:HG3	6	1.68
(1,427)	1:12:A:LEU:HD22	1:13:A:LYS:HG3	6	1.68
(1,427)	1:12:A:LEU:HD23	1:13:A:LYS:HG3	6	1.68
(4,45)	1:2:A:GLU:HB2	1:3:A:GLU:HA	6	1.67
(3,282)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD2	5	1.67
(1,516)	1:2:A:GLU:HB2	1:3:A:GLU:HA	6	1.67
(1,297)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD2	5	1.67
(3,282)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD2	6	1.62
(1,297)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD2	6	1.62
(2,469)	1:1:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:H	6	1.6
(2,469)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:H	6	1.6
(4,38)	1:12:A:LEU:HD11	1:13:A:LYS:HA	1	1.59
(4,38)	1:12:A:LEU:HD12	1:13:A:LYS:HA	1	1.59
(4,38)	1:12:A:LEU:HD13	1:13:A:LYS:HA	1	1.59
(4,37)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:HA2	7	1.59
(4,37)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:HA2	7	1.59
(4,37)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:HA2	7	1.59
(4,30)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HB2	7	1.59
(4,30)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HB2	7	1.59
(4,30)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HB2	7	1.59
(1,466)	1:12:A:LEU:HD11	1:13:A:LYS:HA	1	1.59
(1,466)	1:12:A:LEU:HD12	1:13:A:LYS:HA	1	1.59
(1,466)	1:12:A:LEU:HD13	1:13:A:LYS:HA	1	1.59
(1,464)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:HA2	7	1.59
(1,464)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:HA2	7	1.59
(1,464)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:HA2	7	1.59
(1,417)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HB2	7	1.59
(1,417)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HB2	7	1.59
(1,417)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HB2	7	1.59
(4,36)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB3	5	1.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,36)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB3	5	1.58
(4,36)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB3	5	1.58
(1,463)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB3	5	1.58
(1,463)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB3	5	1.58
(1,463)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB3	5	1.58
(4,45)	1:2:A:GLU:HB2	1:3:A:GLU:HA	10	1.57
(4,38)	1:12:A:LEU:HD11	1:13:A:LYS:HA	3	1.57
(4,38)	1:12:A:LEU:HD12	1:13:A:LYS:HA	3	1.57
(4,38)	1:12:A:LEU:HD13	1:13:A:LYS:HA	3	1.57
(4,38)	1:12:A:LEU:HD11	1:13:A:LYS:HA	9	1.57
(4,38)	1:12:A:LEU:HD12	1:13:A:LYS:HA	9	1.57
(4,38)	1:12:A:LEU:HD13	1:13:A:LYS:HA	9	1.57
(4,30)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HB2	9	1.57
(4,30)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HB2	9	1.57
(4,30)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HB2	9	1.57
(1,516)	1:2:A:GLU:HB2	1:3:A:GLU:HA	10	1.57
(1,466)	1:12:A:LEU:HD11	1:13:A:LYS:HA	3	1.57
(1,466)	1:12:A:LEU:HD12	1:13:A:LYS:HA	3	1.57
(1,466)	1:12:A:LEU:HD13	1:13:A:LYS:HA	3	1.57
(1,466)	1:12:A:LEU:HD11	1:13:A:LYS:HA	9	1.57
(1,466)	1:12:A:LEU:HD12	1:13:A:LYS:HA	9	1.57
(1,466)	1:12:A:LEU:HD13	1:13:A:LYS:HA	9	1.57
(1,417)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HB2	9	1.57
(1,417)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HB2	9	1.57
(1,417)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HB2	9	1.57
(4,38)	1:12:A:LEU:HD11	1:13:A:LYS:HA	2	1.56
(4,38)	1:12:A:LEU:HD12	1:13:A:LYS:HA	2	1.56
(4,38)	1:12:A:LEU:HD13	1:13:A:LYS:HA	2	1.56
(1,466)	1:12:A:LEU:HD11	1:13:A:LYS:HA	2	1.56
(1,466)	1:12:A:LEU:HD12	1:13:A:LYS:HA	2	1.56
(1,466)	1:12:A:LEU:HD13	1:13:A:LYS:HA	2	1.56
(4,36)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB3	8	1.55
(4,36)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB3	8	1.55
(4,36)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB3	8	1.55
(1,463)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB3	8	1.55
(1,463)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB3	8	1.55
(1,463)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB3	8	1.55
(4,42)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD21	2	1.54
(4,42)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD22	2	1.54
(4,42)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD23	2	1.54
(4,38)	1:12:A:LEU:HD11	1:13:A:LYS:HA	4	1.54
(4,38)	1:12:A:LEU:HD12	1:13:A:LYS:HA	4	1.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,38)	1:12:A:LEU:HD13	1:13:A:LYS:HA	4	1.54
(4,38)	1:12:A:LEU:HD11	1:13:A:LYS:HA	5	1.54
(4,38)	1:12:A:LEU:HD12	1:13:A:LYS:HA	5	1.54
(4,38)	1:12:A:LEU:HD13	1:13:A:LYS:HA	5	1.54
(4,36)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB3	3	1.54
(4,36)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB3	3	1.54
(4,36)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB3	3	1.54
(3,385)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	7	1.54
(3,385)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	7	1.54
(3,385)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	7	1.54
(3,346)	1:23:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	3	1.54
(1,501)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD21	2	1.54
(1,501)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD22	2	1.54
(1,501)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD23	2	1.54
(1,466)	1:12:A:LEU:HD11	1:13:A:LYS:HA	4	1.54
(1,466)	1:12:A:LEU:HD12	1:13:A:LYS:HA	4	1.54
(1,466)	1:12:A:LEU:HD13	1:13:A:LYS:HA	4	1.54
(1,466)	1:12:A:LEU:HD11	1:13:A:LYS:HA	5	1.54
(1,466)	1:12:A:LEU:HD12	1:13:A:LYS:HA	5	1.54
(1,466)	1:12:A:LEU:HD13	1:13:A:LYS:HA	5	1.54
(1,463)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB3	3	1.54
(1,463)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB3	3	1.54
(1,463)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB3	3	1.54
(1,414)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	7	1.54
(1,414)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	7	1.54
(1,414)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	7	1.54
(1,369)	1:23:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	3	1.54
(3,346)	1:23:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	6	1.53
(3,282)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD2	4	1.53
(3,282)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD2	8	1.53
(1,369)	1:23:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	6	1.53
(1,297)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD2	4	1.53
(1,297)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD2	8	1.53
(4,38)	1:12:A:LEU:HD11	1:13:A:LYS:HA	10	1.51
(4,38)	1:12:A:LEU:HD12	1:13:A:LYS:HA	10	1.51
(4,38)	1:12:A:LEU:HD13	1:13:A:LYS:HA	10	1.51
(4,31)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	7	1.51
(4,31)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	7	1.51
(4,31)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	7	1.51
(4,31)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	7	1.51
(4,31)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	7	1.51
(4,31)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	7	1.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,31)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	7	1.51
(4,31)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	7	1.51
(4,31)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	7	1.51
(2,490)	1:2:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:H	1	1.51
(2,490)	1:2:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:H	1	1.51
(2,417)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HB2	6	1.51
(2,417)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HB2	6	1.51
(2,417)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HB2	6	1.51
(1,466)	1:12:A:LEU:HD11	1:13:A:LYS:HA	10	1.51
(1,466)	1:12:A:LEU:HD12	1:13:A:LYS:HA	10	1.51
(1,466)	1:12:A:LEU:HD13	1:13:A:LYS:HA	10	1.51
(1,423)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	7	1.51
(1,423)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	7	1.51
(1,423)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	7	1.51
(1,423)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	7	1.51
(1,423)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	7	1.51
(1,423)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	7	1.51
(1,423)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	7	1.51
(1,423)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	7	1.51
(1,423)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	7	1.51
(4,38)	1:12:A:LEU:HD11	1:13:A:LYS:HA	7	1.5
(4,38)	1:12:A:LEU:HD12	1:13:A:LYS:HA	7	1.5
(4,38)	1:12:A:LEU:HD13	1:13:A:LYS:HA	7	1.5
(1,466)	1:12:A:LEU:HD11	1:13:A:LYS:HA	7	1.5
(1,466)	1:12:A:LEU:HD12	1:13:A:LYS:HA	7	1.5
(1,466)	1:12:A:LEU:HD13	1:13:A:LYS:HA	7	1.5
(3,428)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	10	1.49
(3,428)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	10	1.49
(3,428)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	10	1.49
(3,385)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	1	1.49
(3,385)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	1	1.49
(3,385)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	1	1.49
(3,385)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	5	1.49
(3,385)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	5	1.49
(3,385)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	5	1.49
(2,500)	1:8:A:TYR:HB3	1:24:A:PRO:HG3	3	1.49
(2,101)	1:3:A:GLU:H	1:4:A:ALA:H	5	1.49
(1,465)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	10	1.49
(1,465)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	10	1.49
(1,465)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	10	1.49
(1,414)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	1	1.49
(1,414)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	1	1.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,414)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	1	1.49
(1,414)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	5	1.49
(1,414)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	5	1.49
(1,414)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	5	1.49
(4,38)	1:12:A:LEU:HD11	1:13:A:LYS:HA	8	1.48
(4,38)	1:12:A:LEU:HD12	1:13:A:LYS:HA	8	1.48
(4,38)	1:12:A:LEU:HD13	1:13:A:LYS:HA	8	1.48
(3,428)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	3	1.48
(3,428)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	3	1.48
(3,428)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	3	1.48
(3,428)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	7	1.48
(3,428)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	7	1.48
(3,428)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	7	1.48
(1,466)	1:12:A:LEU:HD11	1:13:A:LYS:HA	8	1.48
(1,466)	1:12:A:LEU:HD12	1:13:A:LYS:HA	8	1.48
(1,466)	1:12:A:LEU:HD13	1:13:A:LYS:HA	8	1.48
(1,465)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	3	1.48
(1,465)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	3	1.48
(1,465)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	3	1.48
(1,465)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	7	1.48
(1,465)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	7	1.48
(1,465)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	7	1.48
(4,42)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD21	4	1.47
(4,42)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD22	4	1.47
(4,42)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD23	4	1.47
(3,282)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD2	2	1.47
(2,507)	1:10:A:GLN:HE21	1:14:A:GLU:HG3	6	1.47
(2,101)	1:3:A:GLU:H	1:4:A:ALA:H	2	1.47
(2,101)	1:3:A:GLU:H	1:4:A:ALA:H	3	1.47
(2,101)	1:3:A:GLU:H	1:4:A:ALA:H	4	1.47
(2,101)	1:3:A:GLU:H	1:4:A:ALA:H	7	1.47
(1,501)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD21	4	1.47
(1,501)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD22	4	1.47
(1,501)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD23	4	1.47
(1,297)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD2	2	1.47
(4,30)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HB2	3	1.46
(4,30)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HB2	3	1.46
(4,30)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HB2	3	1.46
(3,385)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	8	1.46
(3,385)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	8	1.46
(3,385)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	8	1.46
(1,417)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HB2	3	1.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,417)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HB2	3	1.46
(1,417)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HB2	3	1.46
(1,414)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	8	1.46
(1,414)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	8	1.46
(1,414)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	8	1.46
(2,319)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HG2	10	1.45
(4,42)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD21	1	1.44
(4,42)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD22	1	1.44
(4,42)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD23	1	1.44
(4,31)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	9	1.44
(4,31)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	9	1.44
(4,31)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	9	1.44
(4,31)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	9	1.44
(4,31)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	9	1.44
(4,31)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	9	1.44
(4,31)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	9	1.44
(4,31)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	9	1.44
(4,31)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	9	1.44
(3,283)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	10	1.44
(2,319)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HG2	5	1.44
(1,501)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD21	1	1.44
(1,501)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD22	1	1.44
(1,501)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD23	1	1.44
(1,423)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	9	1.44
(1,423)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	9	1.44
(1,423)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	9	1.44
(1,423)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	9	1.44
(1,423)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	9	1.44
(1,423)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	9	1.44
(1,423)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	9	1.44
(1,423)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	9	1.44
(1,423)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	9	1.44
(1,298)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	10	1.44
(4,42)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD21	10	1.43
(4,42)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD22	10	1.43
(4,42)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD23	10	1.43
(4,31)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	3	1.43
(4,31)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	3	1.43
(4,31)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	3	1.43
(4,31)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	3	1.43
(4,31)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	3	1.43
(4,31)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	3	1.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,31)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	3	1.43
(4,31)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	3	1.43
(4,31)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	3	1.43
(3,346)	1:23:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	5	1.43
(2,319)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HG2	6	1.43
(2,319)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HG2	9	1.43
(1,501)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD21	10	1.43
(1,501)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD22	10	1.43
(1,501)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD23	10	1.43
(1,423)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	3	1.43
(1,423)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	3	1.43
(1,423)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	3	1.43
(1,423)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	3	1.43
(1,423)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	3	1.43
(1,423)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	3	1.43
(1,423)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	3	1.43
(1,423)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	3	1.43
(1,423)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	3	1.43
(1,369)	1:23:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	5	1.43
(4,31)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	6	1.42
(4,31)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	6	1.42
(4,31)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	6	1.42
(4,31)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	6	1.42
(4,31)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	6	1.42
(4,31)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	6	1.42
(4,31)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	6	1.42
(4,31)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	6	1.42
(4,31)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	6	1.42
(4,31)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	10	1.42
(4,31)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	10	1.42
(4,31)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	10	1.42
(4,31)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	10	1.42
(4,31)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	10	1.42
(4,31)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	10	1.42
(4,31)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	10	1.42
(4,31)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	10	1.42
(4,31)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	10	1.42
(3,334)	1:16:A:GLY:H	1:19:A:SER:HB3	10	1.42
(3,283)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	9	1.42
(2,500)	1:8:A:TYR:HB3	1:24:A:PRO:HG3	6	1.42
(2,319)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HG2	8	1.42
(1,423)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	6	1.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,423)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	6	1.42
(1,423)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	6	1.42
(1,423)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	6	1.42
(1,423)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	6	1.42
(1,423)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	6	1.42
(1,423)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	6	1.42
(1,423)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	6	1.42
(1,423)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	6	1.42
(1,423)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	10	1.42
(1,423)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	10	1.42
(1,423)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	10	1.42
(1,423)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	10	1.42
(1,423)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	10	1.42
(1,423)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	10	1.42
(1,423)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	10	1.42
(1,423)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	10	1.42
(1,423)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	10	1.42
(1,353)	1:16:A:GLY:H	1:19:A:SER:HB3	10	1.42
(1,298)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	9	1.42
(4,31)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	4	1.4
(4,31)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	4	1.4
(4,31)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	4	1.4
(4,31)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	4	1.4
(4,31)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	4	1.4
(4,31)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	4	1.4
(4,31)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	4	1.4
(4,31)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	4	1.4
(4,31)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	4	1.4
(4,17)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HE3	5	1.4
(2,319)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HG2	2	1.4
(1,423)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	4	1.4
(1,423)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	4	1.4
(1,423)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	4	1.4
(1,423)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	4	1.4
(1,423)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	4	1.4
(1,423)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	4	1.4
(1,423)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	4	1.4
(1,423)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	4	1.4
(1,423)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	4	1.4
(1,324)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HE3	5	1.4
(4,31)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	2	1.39
(4,31)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	2	1.39

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,31)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	2	1.39
(4,31)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	2	1.39
(4,31)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	2	1.39
(4,31)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	2	1.39
(4,31)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	2	1.39
(4,31)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	2	1.39
(4,31)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	2	1.39
(4,31)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	5	1.39
(4,31)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	5	1.39
(4,31)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	5	1.39
(4,31)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	5	1.39
(4,31)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	5	1.39
(4,31)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	5	1.39
(4,31)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	5	1.39
(4,31)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	5	1.39
(4,31)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	5	1.39
(4,17)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HE3	1	1.39
(4,17)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HE3	2	1.39
(4,17)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HE3	3	1.39
(4,17)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HE3	4	1.39
(4,17)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HE3	6	1.39
(4,17)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HE3	8	1.39
(4,17)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HE3	10	1.39
(3,282)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD2	3	1.39
(1,423)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	2	1.39
(1,423)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	2	1.39
(1,423)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	2	1.39
(1,423)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	2	1.39
(1,423)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	2	1.39
(1,423)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	2	1.39
(1,423)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	2	1.39
(1,423)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	2	1.39
(1,423)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	2	1.39
(1,423)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	5	1.39
(1,423)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	5	1.39
(1,423)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	5	1.39
(1,423)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	5	1.39
(1,423)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	5	1.39
(1,423)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	5	1.39
(1,423)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	5	1.39
(1,423)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	5	1.39
(1,423)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	5	1.39

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,324)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HE3	1	1.39
(1,324)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HE3	2	1.39
(1,324)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HE3	3	1.39
(1,324)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HE3	4	1.39
(1,324)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HE3	6	1.39
(1,324)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HE3	8	1.39
(1,324)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HE3	10	1.39
(1,297)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD2	3	1.39
(4,17)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HE3	9	1.38
(3,283)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	2	1.38
(3,283)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	3	1.38
(3,283)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	5	1.38
(1,324)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HE3	9	1.38
(1,298)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	2	1.38
(1,298)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	3	1.38
(1,298)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	5	1.38
(4,17)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HE3	7	1.37
(3,426)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:HD21	8	1.37
(3,426)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:HD22	8	1.37
(3,426)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:HD23	8	1.37
(3,283)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	1	1.37
(3,282)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD2	9	1.37
(2,331)	1:19:A:SER:H	1:20:A:GLY:H	7	1.37
(1,461)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:HD21	8	1.37
(1,461)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:HD22	8	1.37
(1,461)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:HD23	8	1.37
(1,324)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HE3	7	1.37
(1,298)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	1	1.37
(1,297)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD2	9	1.37
(4,31)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	1	1.36
(4,31)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	1	1.36
(4,31)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	1	1.36
(4,31)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	1	1.36
(4,31)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	1	1.36
(4,31)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	1	1.36
(4,31)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	1	1.36
(4,31)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	1	1.36
(4,31)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	1	1.36
(4,31)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	8	1.36
(4,31)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	8	1.36
(4,31)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	8	1.36
(4,31)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	8	1.36

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,31)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	8	1.36
(4,31)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	8	1.36
(4,31)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	8	1.36
(4,31)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	8	1.36
(4,31)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	8	1.36
(1,423)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	1	1.36
(1,423)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	1	1.36
(1,423)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	1	1.36
(1,423)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	1	1.36
(1,423)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	1	1.36
(1,423)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	1	1.36
(1,423)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	1	1.36
(1,423)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	1	1.36
(1,423)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	1	1.36
(1,423)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	8	1.36
(1,423)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	8	1.36
(1,423)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	8	1.36
(1,423)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	8	1.36
(1,423)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	8	1.36
(1,423)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	8	1.36
(1,423)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	8	1.36
(1,423)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	8	1.36
(1,423)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	8	1.36
(3,426)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:HD21	1	1.35
(3,426)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:HD22	1	1.35
(3,426)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:HD23	1	1.35
(3,426)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:HD21	10	1.35
(3,426)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:HD22	10	1.35
(3,426)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:HD23	10	1.35
(3,346)	1:23:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	2	1.35
(3,282)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD2	1	1.35
(2,318)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HG3	3	1.35
(2,318)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HG3	4	1.35
(1,461)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:HD21	1	1.35
(1,461)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:HD22	1	1.35
(1,461)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:HD23	1	1.35
(1,461)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:HD21	10	1.35
(1,461)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:HD22	10	1.35
(1,461)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:HD23	10	1.35
(1,369)	1:23:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	2	1.35
(1,297)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD2	1	1.35
(3,426)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:HD21	4	1.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,426)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:HD22	4	1.34
(3,426)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:HD23	4	1.34
(1,461)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:HD21	4	1.34
(1,461)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:HD22	4	1.34
(1,461)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:HD23	4	1.34
(3,426)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:HD21	5	1.33
(3,426)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:HD22	5	1.33
(3,426)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:HD23	5	1.33
(3,283)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	6	1.33
(1,461)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:HD21	5	1.33
(1,461)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:HD22	5	1.33
(1,461)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:HD23	5	1.33
(1,298)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	6	1.33
(4,24)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:HA	4	1.32
(4,24)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:HA	10	1.32
(3,471)	1:10:A:GLN:HG2	1:14:A:GLU:HG2	6	1.32
(3,471)	1:10:A:GLN:HG3	1:14:A:GLU:HG2	6	1.32
(3,426)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:HD21	2	1.32
(3,426)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:HD22	2	1.32
(3,426)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:HD23	2	1.32
(3,352)	1:11:A:TRP:HA	1:14:A:GLU:HB3	6	1.32
(3,283)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	7	1.32
(1,515)	1:10:A:GLN:HG2	1:14:A:GLU:HG2	6	1.32
(1,515)	1:10:A:GLN:HG3	1:14:A:GLU:HG2	6	1.32
(1,461)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:HD21	2	1.32
(1,461)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:HD22	2	1.32
(1,461)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:HD23	2	1.32
(1,377)	1:11:A:TRP:HA	1:14:A:GLU:HB3	6	1.32
(1,375)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:HA	4	1.32
(1,375)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:HA	10	1.32
(1,298)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	7	1.32
(4,38)	1:12:A:LEU:HD11	1:13:A:LYS:HA	6	1.31
(4,38)	1:12:A:LEU:HD12	1:13:A:LYS:HA	6	1.31
(4,38)	1:12:A:LEU:HD13	1:13:A:LYS:HA	6	1.31
(4,36)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB3	10	1.31
(4,36)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB3	10	1.31
(4,36)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB3	10	1.31
(3,386)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HB2	6	1.31
(3,386)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HB2	6	1.31
(3,386)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HB2	6	1.31
(3,283)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	8	1.31
(1,466)	1:12:A:LEU:HD11	1:13:A:LYS:HA	6	1.31

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,466)	1:12:A:LEU:HD12	1:13:A:LYS:HA	6	1.31
(1,466)	1:12:A:LEU:HD13	1:13:A:LYS:HA	6	1.31
(1,463)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB3	10	1.31
(1,463)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB3	10	1.31
(1,463)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB3	10	1.31
(1,415)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HB2	6	1.31
(1,415)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HB2	6	1.31
(1,415)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HB2	6	1.31
(1,298)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	8	1.31
(4,24)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:HA	1	1.3
(3,283)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	4	1.3
(2,469)	1:1:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:H	7	1.3
(2,469)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:H	7	1.3
(1,375)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:HA	1	1.3
(1,298)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	4	1.3
(2,381)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG2	7	1.29
(2,381)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG3	7	1.29
(2,220)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD2	4	1.29
(4,42)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD21	8	1.28
(4,42)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD22	8	1.28
(4,42)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD23	8	1.28
(3,346)	1:23:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	9	1.28
(1,501)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD21	8	1.28
(1,501)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD22	8	1.28
(1,501)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD23	8	1.28
(1,369)	1:23:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	9	1.28
(3,385)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	2	1.27
(3,385)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	2	1.27
(3,385)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	2	1.27
(3,287)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	10	1.27
(2,470)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:H	1	1.27
(1,414)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	2	1.27
(1,414)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	2	1.27
(1,414)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	2	1.27
(1,302)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	10	1.27
(4,36)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB3	4	1.26
(4,36)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB3	4	1.26
(4,36)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB3	4	1.26
(4,30)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HB2	5	1.26
(4,30)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HB2	5	1.26
(4,30)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HB2	5	1.26
(2,484)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	8	1.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,484)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	8	1.26
(2,484)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	8	1.26
(2,484)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG3	8	1.26
(2,484)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG3	8	1.26
(2,484)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG3	8	1.26
(2,466)	1:12:A:LEU:HA	1:16:A:GLY:HA3	5	1.26
(2,430)	1:20:A:GLY:H	1:21:A:ARG:H	8	1.26
(1,463)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB3	4	1.26
(1,463)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB3	4	1.26
(1,463)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB3	4	1.26
(1,417)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HB2	5	1.26
(1,417)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HB2	5	1.26
(1,417)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HB2	5	1.26
(4,24)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:HA	2	1.25
(4,24)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:HA	6	1.25
(4,24)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:HA	7	1.25
(3,441)	1:21:A:ARG:HB3	1:22:A:PRO:HD3	1	1.25
(3,288)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	10	1.25
(3,287)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	5	1.25
(2,220)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD2	10	1.25
(1,481)	1:21:A:ARG:HB3	1:22:A:PRO:HD3	1	1.25
(1,375)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:HA	2	1.25
(1,375)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:HA	6	1.25
(1,375)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:HA	7	1.25
(1,303)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	10	1.25
(1,302)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	5	1.25
(4,42)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD21	5	1.24
(4,42)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD22	5	1.24
(4,42)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD23	5	1.24
(3,441)	1:21:A:ARG:HB3	1:22:A:PRO:HD3	7	1.24
(1,501)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD21	5	1.24
(1,501)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD22	5	1.24
(1,501)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD23	5	1.24
(1,481)	1:21:A:ARG:HB3	1:22:A:PRO:HD3	7	1.24
(4,24)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:HA	3	1.23
(4,24)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:HA	9	1.23
(2,456)	1:12:A:LEU:HA	1:16:A:GLY:HA2	2	1.23
(2,456)	1:12:A:LEU:HA	1:16:A:GLY:HA2	4	1.23
(2,456)	1:12:A:LEU:HA	1:16:A:GLY:HA2	8	1.23
(1,375)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:HA	3	1.23
(1,375)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:HA	9	1.23
(4,34)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG21	2	1.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,34)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG22	2	1.22
(4,34)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG23	2	1.22
(4,34)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG21	3	1.22
(4,34)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG22	3	1.22
(4,34)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG23	3	1.22
(4,34)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG21	4	1.22
(4,34)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG22	4	1.22
(4,34)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG23	4	1.22
(4,34)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG21	9	1.22
(4,34)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG22	9	1.22
(4,34)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG23	9	1.22
(3,287)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	6	1.22
(2,456)	1:12:A:LEU:HA	1:16:A:GLY:HA2	6	1.22
(2,101)	1:3:A:GLU:H	1:4:A:ALA:H	8	1.22
(1,446)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG21	2	1.22
(1,446)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG22	2	1.22
(1,446)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG23	2	1.22
(1,446)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG21	3	1.22
(1,446)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG22	3	1.22
(1,446)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG23	3	1.22
(1,446)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG21	4	1.22
(1,446)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG22	4	1.22
(1,446)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG23	4	1.22
(1,446)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG21	9	1.22
(1,446)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG22	9	1.22
(1,446)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG23	9	1.22
(1,302)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	6	1.22
(3,441)	1:21:A:ARG:HB3	1:22:A:PRO:HD3	6	1.21
(3,288)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	3	1.21
(3,287)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	3	1.21
(2,484)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	3	1.21
(2,484)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	3	1.21
(2,484)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	3	1.21
(2,484)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG3	3	1.21
(2,484)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG3	3	1.21
(2,484)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG3	3	1.21
(2,319)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HG2	7	1.21
(2,226)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HE2	10	1.21
(2,226)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HE3	10	1.21
(2,226)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HE2	10	1.21
(2,226)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HE3	10	1.21
(1,481)	1:21:A:ARG:HB3	1:22:A:PRO:HD3	6	1.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,303)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	3	1.21
(1,302)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	3	1.21
(2,512)	1:2:A:GLU:HB2	1:3:A:GLU:HA	9	1.2
(2,480)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HG2	6	1.2
(2,456)	1:12:A:LEU:HA	1:16:A:GLY:HA2	9	1.2
(2,454)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HD3	7	1.2
(2,274)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG2	5	1.2
(2,274)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG2	5	1.2
(4,36)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB3	1	1.19
(4,36)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB3	1	1.19
(4,36)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB3	1	1.19
(4,34)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG21	1	1.19
(4,34)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG22	1	1.19
(4,34)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG23	1	1.19
(4,34)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG21	6	1.19
(4,34)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG22	6	1.19
(4,34)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG23	6	1.19
(4,24)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:HA	5	1.19
(4,24)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:HA	8	1.19
(3,441)	1:21:A:ARG:HB3	1:22:A:PRO:HD3	10	1.19
(2,469)	1:1:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:H	5	1.19
(2,469)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:H	5	1.19
(2,456)	1:12:A:LEU:HA	1:16:A:GLY:HA2	5	1.19
(2,331)	1:19:A:SER:H	1:20:A:GLY:H	1	1.19
(2,292)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HG2	7	1.19
(2,226)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HE2	4	1.19
(2,226)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HE3	4	1.19
(2,226)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HE2	4	1.19
(2,226)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HE3	4	1.19
(1,481)	1:21:A:ARG:HB3	1:22:A:PRO:HD3	10	1.19
(1,463)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB3	1	1.19
(1,463)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB3	1	1.19
(1,463)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB3	1	1.19
(1,446)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG21	1	1.19
(1,446)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG22	1	1.19
(1,446)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG23	1	1.19
(1,446)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG21	6	1.19
(1,446)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG22	6	1.19
(1,446)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG23	6	1.19
(1,375)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:HA	5	1.19
(1,375)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:HA	8	1.19
(4,18)	1:11:A:TRP:HZ2	1:11:A:TRP:HZ3	3	1.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,18)	1:11:A:TRP:HZ2	1:11:A:TRP:HZ3	4	1.18
(4,18)	1:11:A:TRP:HZ2	1:11:A:TRP:HZ3	5	1.18
(4,18)	1:11:A:TRP:HZ2	1:11:A:TRP:HZ3	6	1.18
(4,18)	1:11:A:TRP:HZ2	1:11:A:TRP:HZ3	8	1.18
(4,18)	1:11:A:TRP:HZ2	1:11:A:TRP:HZ3	10	1.18
(3,441)	1:21:A:ARG:HB3	1:22:A:PRO:HD3	5	1.18
(3,441)	1:21:A:ARG:HB3	1:22:A:PRO:HD3	8	1.18
(3,287)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	2	1.18
(2,292)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HG2	2	1.18
(2,274)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG2	2	1.18
(2,274)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG2	2	1.18
(2,220)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD2	2	1.18
(1,481)	1:21:A:ARG:HB3	1:22:A:PRO:HD3	5	1.18
(1,481)	1:21:A:ARG:HB3	1:22:A:PRO:HD3	8	1.18
(1,325)	1:11:A:TRP:HZ2	1:11:A:TRP:HZ3	3	1.18
(1,325)	1:11:A:TRP:HZ2	1:11:A:TRP:HZ3	4	1.18
(1,325)	1:11:A:TRP:HZ2	1:11:A:TRP:HZ3	5	1.18
(1,325)	1:11:A:TRP:HZ2	1:11:A:TRP:HZ3	6	1.18
(1,325)	1:11:A:TRP:HZ2	1:11:A:TRP:HZ3	8	1.18
(1,325)	1:11:A:TRP:HZ2	1:11:A:TRP:HZ3	10	1.18
(1,302)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	2	1.18
(4,36)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB3	2	1.17
(4,36)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB3	2	1.17
(4,36)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB3	2	1.17
(4,18)	1:11:A:TRP:HZ2	1:11:A:TRP:HZ3	2	1.17
(4,18)	1:11:A:TRP:HZ2	1:11:A:TRP:HZ3	7	1.17
(4,18)	1:11:A:TRP:HZ2	1:11:A:TRP:HZ3	9	1.17
(4,15)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	10	1.17
(4,8)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG2	5	1.17
(4,8)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	5	1.17
(3,441)	1:21:A:ARG:HB3	1:22:A:PRO:HD3	9	1.17
(3,381)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	7	1.17
(3,381)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	7	1.17
(3,381)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	7	1.17
(3,288)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	5	1.17
(3,287)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	8	1.17
(2,484)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	5	1.17
(2,484)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	5	1.17
(2,484)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	5	1.17
(2,484)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG3	5	1.17
(2,484)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG3	5	1.17
(2,484)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG3	5	1.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,469)	1:1:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:H	2	1.17
(2,469)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:H	2	1.17
(2,292)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HG2	1	1.17
(2,292)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HG2	8	1.17
(2,274)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG2	8	1.17
(2,274)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG2	8	1.17
(1,481)	1:21:A:ARG:HB3	1:22:A:PRO:HD3	9	1.17
(1,463)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB3	2	1.17
(1,463)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB3	2	1.17
(1,463)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB3	2	1.17
(1,409)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	7	1.17
(1,409)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	7	1.17
(1,409)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	7	1.17
(1,325)	1:11:A:TRP:HZ2	1:11:A:TRP:HZ3	2	1.17
(1,325)	1:11:A:TRP:HZ2	1:11:A:TRP:HZ3	7	1.17
(1,325)	1:11:A:TRP:HZ2	1:11:A:TRP:HZ3	9	1.17
(1,303)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	5	1.17
(1,302)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	8	1.17
(1,288)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	10	1.17
(1,187)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG2	5	1.17
(1,187)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	5	1.17
(4,18)	1:11:A:TRP:HZ2	1:11:A:TRP:HZ3	1	1.16
(4,15)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	3	1.16
(4,15)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	4	1.16
(4,15)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	5	1.16
(4,15)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	8	1.16
(4,8)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG2	3	1.16
(4,8)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	3	1.16
(4,8)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG2	8	1.16
(4,8)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	8	1.16
(3,278)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB3	3	1.16
(2,470)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:H	5	1.16
(2,469)	1:1:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:H	3	1.16
(2,469)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:H	3	1.16
(2,469)	1:1:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:H	4	1.16
(2,469)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:H	4	1.16
(2,381)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG2	6	1.16
(2,381)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG3	6	1.16
(2,292)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HG2	6	1.16
(2,292)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HG2	9	1.16
(2,274)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG2	4	1.16
(2,274)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG2	4	1.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,325)	1:11:A:TRP:HZ2	1:11:A:TRP:HZ3	1	1.16
(1,293)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB3	3	1.16
(1,288)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	3	1.16
(1,288)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	4	1.16
(1,288)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	5	1.16
(1,288)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	8	1.16
(1,187)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG2	3	1.16
(1,187)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	3	1.16
(1,187)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG2	8	1.16
(1,187)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	8	1.16
(4,15)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	2	1.15
(4,15)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	6	1.15
(4,15)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	9	1.15
(3,441)	1:21:A:ARG:HB3	1:22:A:PRO:HD3	2	1.15
(3,381)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	9	1.15
(3,381)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	9	1.15
(3,381)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	9	1.15
(3,288)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	9	1.15
(3,287)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	4	1.15
(2,101)	1:3:A:GLU:H	1:4:A:ALA:H	6	1.15
(1,481)	1:21:A:ARG:HB3	1:22:A:PRO:HD3	2	1.15
(1,409)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	9	1.15
(1,409)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	9	1.15
(1,409)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	9	1.15
(1,303)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	9	1.15
(1,302)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	4	1.15
(1,288)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	2	1.15
(1,288)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	6	1.15
(1,288)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	9	1.15
(4,34)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG21	5	1.14
(4,34)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG22	5	1.14
(4,34)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG23	5	1.14
(4,34)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG21	8	1.14
(4,34)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG22	8	1.14
(4,34)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG23	8	1.14
(4,30)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HB2	2	1.14
(4,30)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HB2	2	1.14
(4,30)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HB2	2	1.14
(3,381)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	8	1.14
(3,381)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	8	1.14
(3,381)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	8	1.14
(3,288)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	4	1.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,380)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HG3	1	1.14
(1,446)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG21	5	1.14
(1,446)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG22	5	1.14
(1,446)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG23	5	1.14
(1,446)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG21	8	1.14
(1,446)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG22	8	1.14
(1,446)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG23	8	1.14
(1,417)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HB2	2	1.14
(1,417)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HB2	2	1.14
(1,417)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HB2	2	1.14
(1,409)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	8	1.14
(1,409)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	8	1.14
(1,409)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	8	1.14
(1,303)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	4	1.14
(4,36)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB3	9	1.13
(4,36)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB3	9	1.13
(4,36)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB3	9	1.13
(4,34)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG21	10	1.13
(4,34)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG22	10	1.13
(4,34)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG23	10	1.13
(4,15)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	1	1.13
(4,15)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	7	1.13
(3,381)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	1	1.13
(3,381)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	1	1.13
(3,381)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	1	1.13
(3,381)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	10	1.13
(3,381)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	10	1.13
(3,381)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	10	1.13
(2,466)	1:12:A:LEU:HA	1:16:A:GLY:HA3	2	1.13
(2,456)	1:12:A:LEU:HA	1:16:A:GLY:HA2	1	1.13
(2,292)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HG2	10	1.13
(1,463)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB3	9	1.13
(1,463)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB3	9	1.13
(1,463)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB3	9	1.13
(1,446)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG21	10	1.13
(1,446)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG22	10	1.13
(1,446)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG23	10	1.13
(1,409)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	1	1.13
(1,409)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	1	1.13
(1,409)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	1	1.13
(1,409)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	10	1.13
(1,409)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	10	1.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,409)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	10	1.13
(1,288)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	1	1.13
(1,288)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	7	1.13
(4,34)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG21	7	1.12
(4,34)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG22	7	1.12
(4,34)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG23	7	1.12
(3,381)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	5	1.12
(3,381)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	5	1.12
(3,381)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	5	1.12
(3,334)	1:16:A:GLY:H	1:19:A:SER:HB3	5	1.12
(2,486)	1:23:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HD2	9	1.12
(2,380)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HG3	10	1.12
(2,292)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HG2	5	1.12
(2,261)	1:18:A:SER:H	1:18:A:SER:HB2	10	1.12
(2,261)	1:18:A:SER:H	1:18:A:SER:HB3	10	1.12
(1,446)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG21	7	1.12
(1,446)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG22	7	1.12
(1,446)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG23	7	1.12
(1,409)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	5	1.12
(1,409)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	5	1.12
(1,409)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	5	1.12
(1,353)	1:16:A:GLY:H	1:19:A:SER:HB3	5	1.12
(4,37)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:HA2	3	1.11
(4,37)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:HA2	3	1.11
(4,37)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:HA2	3	1.11
(3,381)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	4	1.11
(3,381)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	4	1.11
(3,381)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	4	1.11
(2,486)	1:23:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HD2	7	1.11
(2,470)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:H	4	1.11
(2,469)	1:1:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:H	1	1.11
(2,469)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:H	1	1.11
(2,469)	1:1:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:H	8	1.11
(2,469)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:H	8	1.11
(2,466)	1:12:A:LEU:HA	1:16:A:GLY:HA3	6	1.11
(2,466)	1:12:A:LEU:HA	1:16:A:GLY:HA3	7	1.11
(2,430)	1:20:A:GLY:H	1:21:A:ARG:H	6	1.11
(1,464)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:HA2	3	1.11
(1,464)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:HA2	3	1.11
(1,464)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:HA2	3	1.11
(1,409)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	4	1.11
(1,409)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	4	1.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,409)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	4	1.11
(3,426)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:HD21	3	1.1
(3,426)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:HD22	3	1.1
(3,426)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:HD23	3	1.1
(3,381)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	2	1.1
(3,381)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	2	1.1
(3,381)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	2	1.1
(3,381)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	6	1.1
(3,381)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	6	1.1
(3,381)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	6	1.1
(2,274)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG2	10	1.1
(2,274)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG2	10	1.1
(2,220)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD2	7	1.1
(1,461)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:HD21	3	1.1
(1,461)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:HD22	3	1.1
(1,461)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:HD23	3	1.1
(1,409)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	2	1.1
(1,409)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	2	1.1
(1,409)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	2	1.1
(1,409)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	6	1.1
(1,409)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	6	1.1
(1,409)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	6	1.1
(3,288)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	7	1.09
(2,466)	1:12:A:LEU:HA	1:16:A:GLY:HA3	1	1.09
(2,466)	1:12:A:LEU:HA	1:16:A:GLY:HA3	4	1.09
(2,456)	1:12:A:LEU:HA	1:16:A:GLY:HA2	10	1.09
(2,380)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HG3	9	1.09
(2,301)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG2	1	1.09
(2,301)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG3	1	1.09
(2,273)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HD2	3	1.09
(2,273)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HD2	3	1.09
(2,101)	1:3:A:GLU:H	1:4:A:ALA:H	9	1.09
(1,303)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	7	1.09
(3,334)	1:16:A:GLY:H	1:19:A:SER:HB3	4	1.08
(3,287)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	1	1.08
(3,282)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD2	7	1.08
(2,512)	1:2:A:GLU:HB2	1:3:A:GLU:HA	3	1.08
(2,512)	1:2:A:GLU:HB2	1:3:A:GLU:HA	5	1.08
(2,466)	1:12:A:LEU:HA	1:16:A:GLY:HA3	9	1.08
(1,353)	1:16:A:GLY:H	1:19:A:SER:HB3	4	1.08
(1,302)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	1	1.08
(1,297)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD2	7	1.08

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,287)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	9	1.07
(2,380)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HG3	7	1.07
(2,261)	1:18:A:SER:H	1:18:A:SER:HB2	8	1.07
(2,261)	1:18:A:SER:H	1:18:A:SER:HB3	8	1.07
(1,302)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	9	1.07
(3,288)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	1	1.06
(3,278)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB3	4	1.06
(1,303)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	1	1.06
(1,293)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB3	4	1.06
(2,512)	1:2:A:GLU:HB2	1:3:A:GLU:HA	8	1.05
(2,469)	1:1:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:H	9	1.05
(2,469)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:H	9	1.05
(2,349)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:H	6	1.05
(2,273)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HD2	6	1.05
(2,273)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HD2	6	1.05
(3,391)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HD3	9	1.04
(3,391)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HD3	9	1.04
(3,391)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HD3	9	1.04
(2,378)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HG2	3	1.04
(2,319)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HG2	1	1.04
(2,301)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG2	7	1.04
(2,301)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG3	7	1.04
(1,421)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HD3	9	1.04
(1,421)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HD3	9	1.04
(1,421)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HD3	9	1.04
(2,380)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HG3	2	1.03
(3,403)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	10	1.02
(2,402)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD11	7	1.02
(2,402)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD12	7	1.02
(2,402)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD13	7	1.02
(2,380)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HG3	4	1.02
(2,378)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HG2	6	1.02
(1,435)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	10	1.02
(2,512)	1:2:A:GLU:HB2	1:3:A:GLU:HA	4	1.01
(2,486)	1:23:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HD2	1	1.01
(2,380)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HG3	5	1.01
(2,380)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HG3	8	1.01
(2,379)	1:10:A:GLN:HA	1:13:A:LYS:HB3	10	1.01
(2,483)	1:7:A:LEU:HD21	1:10:A:GLN:HG2	2	1.0
(2,483)	1:7:A:LEU:HD22	1:10:A:GLN:HG2	2	1.0
(2,483)	1:7:A:LEU:HD23	1:10:A:GLN:HG2	2	1.0
(2,483)	1:7:A:LEU:HD21	1:10:A:GLN:HG3	2	1.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,483)	1:7:A:LEU:HD22	1:10:A:GLN:HG3	2	1.0
(2,483)	1:7:A:LEU:HD23	1:10:A:GLN:HG3	2	1.0
(2,379)	1:10:A:GLN:HA	1:13:A:LYS:HB3	6	1.0
(3,346)	1:23:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	10	0.99
(2,486)	1:23:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HD2	10	0.99
(2,427)	1:12:A:LEU:HD21	1:13:A:LYS:HG3	6	0.99
(2,427)	1:12:A:LEU:HD22	1:13:A:LYS:HG3	6	0.99
(2,427)	1:12:A:LEU:HD23	1:13:A:LYS:HG3	6	0.99
(2,349)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:H	1	0.99
(2,101)	1:3:A:GLU:H	1:4:A:ALA:H	10	0.99
(2,41)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HG2	3	0.99
(1,369)	1:23:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	10	0.99
(4,6)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	2	0.98
(4,6)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	2	0.98
(4,6)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	2	0.98
(4,6)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	5	0.98
(4,6)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	5	0.98
(4,6)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	5	0.98
(4,6)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	8	0.98
(4,6)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	8	0.98
(4,6)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	8	0.98
(3,453)	1:19:A:SER:HB3	1:20:A:GLY:H	1	0.98
(3,403)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	3	0.98
(3,381)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	3	0.98
(3,381)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	3	0.98
(3,381)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	3	0.98
(3,346)	1:23:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	1	0.98
(3,346)	1:23:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	7	0.98
(2,383)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB3	7	0.98
(2,343)	1:8:A:TYR:HB3	1:9:A:ILE:H	2	0.98
(2,343)	1:8:A:TYR:HB3	1:9:A:ILE:H	8	0.98
(1,494)	1:19:A:SER:HB3	1:20:A:GLY:H	1	0.98
(1,435)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	3	0.98
(1,409)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	3	0.98
(1,409)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	3	0.98
(1,409)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	3	0.98
(1,369)	1:23:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	1	0.98
(1,369)	1:23:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	7	0.98
(1,170)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	2	0.98
(1,170)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	2	0.98
(1,170)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	2	0.98
(1,170)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	5	0.98

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,170)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	5	0.98
(1,170)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	5	0.98
(1,170)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	8	0.98
(1,170)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	8	0.98
(1,170)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	8	0.98
(4,30)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HB2	4	0.97
(4,30)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HB2	4	0.97
(4,30)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HB2	4	0.97
(4,6)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	1	0.97
(4,6)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	1	0.97
(4,6)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	1	0.97
(4,6)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	4	0.97
(4,6)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	4	0.97
(4,6)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	4	0.97
(4,6)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	9	0.97
(4,6)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	9	0.97
(4,6)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	9	0.97
(4,6)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	10	0.97
(4,6)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	10	0.97
(4,6)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	10	0.97
(3,405)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG12	3	0.97
(3,405)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG12	3	0.97
(3,403)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	5	0.97
(2,101)	1:3:A:GLU:H	1:4:A:ALA:H	1	0.97
(1,437)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG12	3	0.97
(1,437)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG12	3	0.97
(1,435)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	5	0.97
(1,417)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HB2	4	0.97
(1,417)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HB2	4	0.97
(1,417)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HB2	4	0.97
(1,170)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	1	0.97
(1,170)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	1	0.97
(1,170)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	1	0.97
(1,170)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	4	0.97
(1,170)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	4	0.97
(1,170)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	4	0.97
(1,170)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	9	0.97
(1,170)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	9	0.97
(1,170)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	9	0.97
(1,170)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	10	0.97
(1,170)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	10	0.97
(1,170)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	10	0.97

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,6)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	6	0.96
(4,6)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	6	0.96
(4,6)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	6	0.96
(3,388)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG11	10	0.96
(3,388)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG12	10	0.96
(3,388)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG13	10	0.96
(2,483)	1:7:A:LEU:HD21	1:10:A:GLN:HG2	10	0.96
(2,483)	1:7:A:LEU:HD22	1:10:A:GLN:HG2	10	0.96
(2,483)	1:7:A:LEU:HD23	1:10:A:GLN:HG2	10	0.96
(2,483)	1:7:A:LEU:HD21	1:10:A:GLN:HG3	10	0.96
(2,483)	1:7:A:LEU:HD22	1:10:A:GLN:HG3	10	0.96
(2,483)	1:7:A:LEU:HD23	1:10:A:GLN:HG3	10	0.96
(2,343)	1:8:A:TYR:HB3	1:9:A:ILE:H	5	0.96
(1,418)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG11	10	0.96
(1,418)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG12	10	0.96
(1,418)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG13	10	0.96
(1,170)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	6	0.96
(1,170)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	6	0.96
(1,170)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	6	0.96
(4,37)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:HA2	10	0.95
(4,37)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:HA2	10	0.95
(4,37)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:HA2	10	0.95
(4,6)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	7	0.95
(4,6)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	7	0.95
(4,6)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	7	0.95
(3,288)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	2	0.95
(3,287)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	7	0.95
(2,512)	1:2:A:GLU:HB2	1:3:A:GLU:HA	6	0.95
(2,466)	1:12:A:LEU:HA	1:16:A:GLY:HA3	8	0.95
(2,433)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD3	9	0.95
(2,379)	1:10:A:GLN:HA	1:13:A:LYS:HB3	3	0.95
(2,378)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HG2	4	0.95
(2,378)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HG2	10	0.95
(2,337)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:H	10	0.95
(2,182)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG13	8	0.95
(1,464)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:HA2	10	0.95
(1,464)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:HA2	10	0.95
(1,464)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:HA2	10	0.95
(1,303)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	2	0.95
(1,302)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	7	0.95
(1,170)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	7	0.95
(1,170)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	7	0.95

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,170)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	7	0.95
(3,403)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	2	0.94
(3,403)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	7	0.94
(3,403)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	9	0.94
(3,288)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	6	0.94
(3,288)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	8	0.94
(2,402)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD11	9	0.94
(2,402)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD12	9	0.94
(2,402)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD13	9	0.94
(2,378)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HG2	8	0.94
(2,343)	1:8:A:TYR:HB3	1:9:A:ILE:H	3	0.94
(2,343)	1:8:A:TYR:HB3	1:9:A:ILE:H	4	0.94
(2,182)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG13	1	0.94
(2,182)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG13	2	0.94
(2,182)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG13	4	0.94
(2,182)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG13	5	0.94
(2,182)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG13	7	0.94
(2,182)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG13	9	0.94
(1,435)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	2	0.94
(1,435)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	7	0.94
(1,435)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	9	0.94
(1,303)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	6	0.94
(1,303)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	8	0.94
(4,8)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG2	10	0.93
(4,8)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	10	0.93
(4,6)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	3	0.93
(4,6)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	3	0.93
(4,6)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	3	0.93
(2,483)	1:7:A:LEU:HD21	1:10:A:GLN:HG2	1	0.93
(2,483)	1:7:A:LEU:HD22	1:10:A:GLN:HG2	1	0.93
(2,483)	1:7:A:LEU:HD23	1:10:A:GLN:HG2	1	0.93
(2,483)	1:7:A:LEU:HD21	1:10:A:GLN:HG3	1	0.93
(2,483)	1:7:A:LEU:HD22	1:10:A:GLN:HG3	1	0.93
(2,483)	1:7:A:LEU:HD23	1:10:A:GLN:HG3	1	0.93
(2,433)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD3	3	0.93
(2,433)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD3	8	0.93
(2,402)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD11	6	0.93
(2,402)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD12	6	0.93
(2,402)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD13	6	0.93
(2,387)	1:21:A:ARG:HB2	1:22:A:PRO:HD2	3	0.93
(2,383)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB3	9	0.93
(2,379)	1:10:A:GLN:HA	1:13:A:LYS:HB3	4	0.93

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,374)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB3	10	0.93
(2,331)	1:19:A:SER:H	1:20:A:GLY:H	6	0.93
(2,182)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG13	6	0.93
(2,182)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG13	10	0.93
(1,187)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG2	10	0.93
(1,187)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	10	0.93
(1,170)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	3	0.93
(1,170)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	3	0.93
(1,170)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	3	0.93
(4,30)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HB2	8	0.92
(4,30)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HB2	8	0.92
(4,30)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HB2	8	0.92
(4,8)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG2	4	0.92
(4,8)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	4	0.92
(2,464)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:HA2	7	0.92
(2,464)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:HA2	7	0.92
(2,464)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:HA2	7	0.92
(2,343)	1:8:A:TYR:HB3	1:9:A:ILE:H	1	0.92
(2,301)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG2	3	0.92
(2,301)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG3	3	0.92
(2,223)	1:13:A:LYS:HE2	1:13:A:LYS:HG3	2	0.92
(2,223)	1:13:A:LYS:HE3	1:13:A:LYS:HG3	2	0.92
(2,223)	1:13:A:LYS:HE2	1:13:A:LYS:HG3	7	0.92
(2,223)	1:13:A:LYS:HE3	1:13:A:LYS:HG3	7	0.92
(1,417)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HB2	8	0.92
(1,417)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HB2	8	0.92
(1,417)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HB2	8	0.92
(1,187)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG2	4	0.92
(1,187)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	4	0.92
(3,445)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HB2	6	0.91
(2,483)	1:7:A:LEU:HD21	1:10:A:GLN:HG2	4	0.91
(2,483)	1:7:A:LEU:HD22	1:10:A:GLN:HG2	4	0.91
(2,483)	1:7:A:LEU:HD23	1:10:A:GLN:HG2	4	0.91
(2,483)	1:7:A:LEU:HD21	1:10:A:GLN:HG3	4	0.91
(2,483)	1:7:A:LEU:HD22	1:10:A:GLN:HG3	4	0.91
(2,483)	1:7:A:LEU:HD23	1:10:A:GLN:HG3	4	0.91
(2,383)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB3	6	0.91
(2,319)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HG2	4	0.91
(2,301)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG2	9	0.91
(2,301)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG3	9	0.91
(2,274)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG2	1	0.91
(2,274)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG2	1	0.91

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,273)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HD2	1	0.91
(2,273)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HD2	1	0.91
(2,217)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD11	1	0.91
(2,217)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD12	1	0.91
(2,217)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD13	1	0.91
(1,485)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HB2	6	0.91
(2,466)	1:12:A:LEU:HA	1:16:A:GLY:HA3	10	0.9
(2,417)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HB2	7	0.9
(2,417)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HB2	7	0.9
(2,417)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HB2	7	0.9
(2,383)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB3	1	0.9
(2,383)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB3	2	0.9
(2,378)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HG2	1	0.9
(2,378)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HG2	2	0.9
(2,343)	1:8:A:TYR:HB3	1:9:A:ILE:H	6	0.9
(2,301)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG2	2	0.9
(2,301)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG3	2	0.9
(2,223)	1:13:A:LYS:HE2	1:13:A:LYS:HG3	4	0.9
(2,223)	1:13:A:LYS:HE3	1:13:A:LYS:HG3	4	0.9
(3,403)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	1	0.89
(3,391)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HD3	1	0.89
(3,391)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HD3	1	0.89
(3,391)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HD3	1	0.89
(3,346)	1:23:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	8	0.89
(2,456)	1:12:A:LEU:HA	1:16:A:GLY:HA2	3	0.89
(2,378)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HG2	5	0.89
(2,343)	1:8:A:TYR:HB3	1:9:A:ILE:H	10	0.89
(2,223)	1:13:A:LYS:HE2	1:13:A:LYS:HG3	10	0.89
(2,223)	1:13:A:LYS:HE3	1:13:A:LYS:HG3	10	0.89
(2,182)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG13	3	0.89
(1,435)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	1	0.89
(1,421)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HD3	1	0.89
(1,421)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HD3	1	0.89
(1,421)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HD3	1	0.89
(1,369)	1:23:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	8	0.89
(3,374)	1:2:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB1	6	0.88
(3,374)	1:2:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB2	6	0.88
(3,374)	1:2:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB3	6	0.88
(2,463)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB3	5	0.88
(2,463)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB3	5	0.88
(2,463)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB3	5	0.88
(2,430)	1:20:A:GLY:H	1:21:A:ARG:H	9	0.88

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,417)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HB2	9	0.88
(2,417)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HB2	9	0.88
(2,417)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HB2	9	0.88
(2,261)	1:18:A:SER:H	1:18:A:SER:HB2	3	0.88
(2,261)	1:18:A:SER:H	1:18:A:SER:HB3	3	0.88
(2,261)	1:18:A:SER:H	1:18:A:SER:HB2	9	0.88
(2,261)	1:18:A:SER:H	1:18:A:SER:HB3	9	0.88
(1,401)	1:2:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB1	6	0.88
(1,401)	1:2:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB2	6	0.88
(1,401)	1:2:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB3	6	0.88
(4,8)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG2	1	0.87
(4,8)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	1	0.87
(3,237)	1:14:A:GLU:H	1:14:A:GLU:HB3	6	0.87
(2,383)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB3	4	0.87
(2,383)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB3	10	0.87
(2,374)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB3	4	0.87
(2,343)	1:8:A:TYR:HB3	1:9:A:ILE:H	9	0.87
(2,224)	1:13:A:LYS:HE2	1:13:A:LYS:HG2	9	0.87
(2,224)	1:13:A:LYS:HE3	1:13:A:LYS:HG2	9	0.87
(2,41)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HG2	4	0.87
(1,248)	1:14:A:GLU:H	1:14:A:GLU:HB3	6	0.87
(1,187)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG2	1	0.87
(1,187)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	1	0.87
(4,8)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG2	2	0.86
(4,8)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	2	0.86
(4,8)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG2	9	0.86
(4,8)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	9	0.86
(3,428)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	4	0.86
(3,428)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	4	0.86
(3,428)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	4	0.86
(3,420)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	2	0.86
(3,420)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	2	0.86
(3,420)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	9	0.86
(3,420)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	9	0.86
(2,512)	1:2:A:GLU:HB2	1:3:A:GLU:HA	10	0.86
(2,470)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:H	3	0.86
(2,388)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HD2	1	0.86
(2,388)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HD2	3	0.86
(2,383)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB3	8	0.86
(2,382)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB2	3	0.86
(2,369)	1:23:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	3	0.86
(2,121)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HD3	3	0.86

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,465)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	4	0.86
(1,465)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	4	0.86
(1,465)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	4	0.86
(1,455)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	2	0.86
(1,455)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	2	0.86
(1,455)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	9	0.86
(1,455)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	9	0.86
(1,187)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG2	2	0.86
(1,187)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	2	0.86
(1,187)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG2	9	0.86
(1,187)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	9	0.86
(4,36)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB3	6	0.85
(4,36)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB3	6	0.85
(4,36)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB3	6	0.85
(3,420)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	10	0.85
(3,420)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	10	0.85
(3,405)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG12	7	0.85
(3,405)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG12	7	0.85
(2,463)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB3	8	0.85
(2,463)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB3	8	0.85
(2,463)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB3	8	0.85
(2,433)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD3	2	0.85
(2,383)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB3	5	0.85
(2,374)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB3	9	0.85
(2,369)	1:23:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	6	0.85
(2,261)	1:18:A:SER:H	1:18:A:SER:HB2	5	0.85
(2,261)	1:18:A:SER:H	1:18:A:SER:HB3	5	0.85
(2,224)	1:13:A:LYS:HE2	1:13:A:LYS:HG2	8	0.85
(2,224)	1:13:A:LYS:HE3	1:13:A:LYS:HG2	8	0.85
(1,463)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB3	6	0.85
(1,463)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB3	6	0.85
(1,463)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB3	6	0.85
(1,455)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	10	0.85
(1,455)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	10	0.85
(1,437)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG12	7	0.85
(1,437)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG12	7	0.85
(3,325)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:H	7	0.84
(2,463)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB3	3	0.84
(2,463)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB3	3	0.84
(2,463)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB3	3	0.84
(2,433)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD3	7	0.84
(2,388)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HD2	6	0.84

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,374)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB3	2	0.84
(2,313)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HG	6	0.84
(2,224)	1:13:A:LYS:HE2	1:13:A:LYS:HG2	3	0.84
(2,224)	1:13:A:LYS:HE3	1:13:A:LYS:HG2	3	0.84
(2,217)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD11	6	0.84
(2,217)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD12	6	0.84
(2,217)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD13	6	0.84
(1,344)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:H	7	0.84
(3,405)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG12	4	0.83
(3,405)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG12	4	0.83
(2,497)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD21	2	0.83
(2,497)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD22	2	0.83
(2,497)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD23	2	0.83
(2,323)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HZ3	1	0.83
(2,323)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HZ3	1	0.83
(1,437)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG12	4	0.83
(1,437)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG12	4	0.83
(4,2)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	4	0.82
(4,2)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	4	0.82
(4,2)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	4	0.82
(3,428)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	8	0.82
(3,428)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	8	0.82
(3,428)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	8	0.82
(3,420)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	7	0.82
(3,420)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	7	0.82
(2,482)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HB2	10	0.82
(2,402)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD11	1	0.82
(2,402)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD12	1	0.82
(2,402)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD13	1	0.82
(2,334)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HB2	1	0.82
(2,334)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HB3	1	0.82
(2,319)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HG2	3	0.82
(2,301)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG2	5	0.82
(2,301)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG3	5	0.82
(2,224)	1:13:A:LYS:HE2	1:13:A:LYS:HG2	5	0.82
(2,224)	1:13:A:LYS:HE3	1:13:A:LYS:HG2	5	0.82
(1,465)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	8	0.82
(1,465)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	8	0.82
(1,465)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	8	0.82
(1,455)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	7	0.82
(1,455)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	7	0.82
(1,113)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	4	0.82

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,113)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	4	0.82
(1,113)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	4	0.82
(4,2)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	1	0.81
(4,2)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	1	0.81
(4,2)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	1	0.81
(4,2)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	9	0.81
(4,2)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	9	0.81
(4,2)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	9	0.81
(3,420)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	4	0.81
(3,420)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	4	0.81
(3,420)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	5	0.81
(3,420)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	5	0.81
(3,405)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG12	6	0.81
(3,405)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG12	6	0.81
(2,465)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	10	0.81
(2,465)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	10	0.81
(2,465)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	10	0.81
(2,433)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD3	4	0.81
(2,387)	1:21:A:ARG:HB2	1:22:A:PRO:HD2	4	0.81
(2,383)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB3	3	0.81
(2,379)	1:10:A:GLN:HA	1:13:A:LYS:HB3	8	0.81
(2,374)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB3	1	0.81
(2,349)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:H	7	0.81
(1,455)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	4	0.81
(1,455)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	4	0.81
(1,455)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	5	0.81
(1,455)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	5	0.81
(1,437)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG12	6	0.81
(1,437)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG12	6	0.81
(1,113)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	1	0.81
(1,113)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	1	0.81
(1,113)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	1	0.81
(1,113)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	9	0.81
(1,113)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	9	0.81
(1,113)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	9	0.81
(4,2)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	3	0.8
(4,2)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	3	0.8
(4,2)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	3	0.8
(4,2)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	10	0.8
(4,2)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	10	0.8
(4,2)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	10	0.8
(3,420)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	8	0.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,420)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	8	0.8
(3,405)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG12	5	0.8
(3,405)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG12	5	0.8
(3,405)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG12	8	0.8
(3,405)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG12	8	0.8
(3,403)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	4	0.8
(2,491)	1:19:A:SER:HB3	1:20:A:GLY:H	5	0.8
(2,482)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HB2	1	0.8
(2,465)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	3	0.8
(2,465)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	3	0.8
(2,465)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	3	0.8
(2,465)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	7	0.8
(2,465)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	7	0.8
(2,465)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	7	0.8
(2,418)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG11	3	0.8
(2,418)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG12	3	0.8
(2,418)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG13	3	0.8
(2,382)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB2	6	0.8
(2,381)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG2	2	0.8
(2,381)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG3	2	0.8
(2,379)	1:10:A:GLN:HA	1:13:A:LYS:HB3	2	0.8
(2,323)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HZ3	5	0.8
(2,323)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HZ3	5	0.8
(1,455)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	8	0.8
(1,455)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	8	0.8
(1,437)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG12	5	0.8
(1,437)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG12	5	0.8
(1,437)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG12	8	0.8
(1,437)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG12	8	0.8
(1,435)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	4	0.8
(1,113)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	3	0.8
(1,113)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	3	0.8
(1,113)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	3	0.8
(1,113)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	10	0.8
(1,113)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	10	0.8
(1,113)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	10	0.8
(4,2)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	2	0.79
(4,2)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	2	0.79
(4,2)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	2	0.79
(3,405)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG12	2	0.79
(3,405)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG12	2	0.79
(3,346)	1:23:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	4	0.79

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,325)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:H	3	0.79
(2,454)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HD3	3	0.79
(2,423)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	7	0.79
(2,423)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	7	0.79
(2,423)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	7	0.79
(2,423)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	7	0.79
(2,423)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	7	0.79
(2,423)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	7	0.79
(2,423)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	7	0.79
(2,423)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	7	0.79
(2,423)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	7	0.79
(2,374)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB3	3	0.79
(2,334)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HB2	6	0.79
(2,334)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HB3	6	0.79
(2,334)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HB2	7	0.79
(2,334)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HB3	7	0.79
(2,301)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG2	10	0.79
(2,301)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG3	10	0.79
(2,26)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HB3	2	0.79
(2,26)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HB3	7	0.79
(1,437)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG12	2	0.79
(1,437)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG12	2	0.79
(1,369)	1:23:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	4	0.79
(1,344)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:H	3	0.79
(1,113)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	2	0.79
(1,113)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	2	0.79
(1,113)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	2	0.79
(4,2)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	5	0.78
(4,2)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	5	0.78
(4,2)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	5	0.78
(4,2)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	6	0.78
(4,2)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	6	0.78
(4,2)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	6	0.78
(4,2)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	7	0.78
(4,2)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	7	0.78
(4,2)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	7	0.78
(3,405)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG12	1	0.78
(3,405)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG12	1	0.78
(3,405)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG12	10	0.78
(3,405)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG12	10	0.78
(2,433)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD3	5	0.78
(2,402)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD11	8	0.78

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,402)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD12	8	0.78
(2,402)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD13	8	0.78
(2,388)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HD2	5	0.78
(2,388)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HD2	8	0.78
(2,374)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB3	5	0.78
(2,354)	1:15:A:GLY:HA2	1:16:A:GLY:H	3	0.78
(2,323)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HZ3	2	0.78
(2,323)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HZ3	2	0.78
(2,313)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HG	3	0.78
(2,279)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HD1	9	0.78
(2,279)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HD2	9	0.78
(2,279)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HD1	9	0.78
(2,279)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HD2	9	0.78
(2,279)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HD1	9	0.78
(2,279)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HD2	9	0.78
(2,126)	1:6:A:ARG:HD2	1:6:A:ARG:HG3	9	0.78
(2,124)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HD3	8	0.78
(2,26)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HB3	3	0.78
(2,26)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HB3	5	0.78
(2,26)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HB3	10	0.78
(1,437)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG12	1	0.78
(1,437)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG12	1	0.78
(1,437)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG12	10	0.78
(1,437)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG12	10	0.78
(1,113)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	5	0.78
(1,113)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	5	0.78
(1,113)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	5	0.78
(1,113)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	6	0.78
(1,113)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	6	0.78
(1,113)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	6	0.78
(1,113)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	7	0.78
(1,113)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	7	0.78
(1,113)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	7	0.78
(4,2)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	8	0.77
(4,2)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	8	0.77
(4,2)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	8	0.77
(3,428)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	5	0.77
(3,428)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	5	0.77
(3,428)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	5	0.77
(3,403)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	6	0.77
(3,403)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	8	0.77
(2,417)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HB2	3	0.77

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,417)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HB2	3	0.77
(2,417)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HB2	3	0.77
(2,412)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HE2	8	0.77
(2,412)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HE2	8	0.77
(2,412)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HE2	8	0.77
(2,412)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HE3	8	0.77
(2,412)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HE3	8	0.77
(2,412)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HE3	8	0.77
(2,408)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HD3	7	0.77
(2,408)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HD3	7	0.77
(2,408)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HD3	7	0.77
(2,402)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD11	2	0.77
(2,402)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD12	2	0.77
(2,402)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD13	2	0.77
(2,402)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD11	4	0.77
(2,402)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD12	4	0.77
(2,402)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD13	4	0.77
(2,402)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD11	5	0.77
(2,402)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD12	5	0.77
(2,402)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD13	5	0.77
(2,402)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD11	10	0.77
(2,402)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD12	10	0.77
(2,402)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD13	10	0.77
(2,382)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB2	2	0.77
(2,343)	1:8:A:TYR:HB3	1:9:A:ILE:H	7	0.77
(2,313)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HG	4	0.77
(2,301)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG2	4	0.77
(2,301)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG3	4	0.77
(2,273)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HD2	7	0.77
(2,273)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HD2	7	0.77
(2,26)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HB3	1	0.77
(2,26)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HB3	9	0.77
(1,465)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	5	0.77
(1,465)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	5	0.77
(1,465)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	5	0.77
(1,435)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	6	0.77
(1,435)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	8	0.77
(1,113)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	8	0.77
(1,113)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	8	0.77
(1,113)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	8	0.77
(3,420)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	3	0.76
(3,420)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	3	0.76

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,420)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	6	0.76
(3,420)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	6	0.76
(3,405)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG12	9	0.76
(3,405)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG12	9	0.76
(3,334)	1:16:A:GLY:H	1:19:A:SER:HB3	2	0.76
(3,293)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HE3	8	0.76
(3,293)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HE3	10	0.76
(2,491)	1:19:A:SER:HB3	1:20:A:GLY:H	2	0.76
(2,491)	1:19:A:SER:HB3	1:20:A:GLY:H	10	0.76
(2,454)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HD3	1	0.76
(2,430)	1:20:A:GLY:H	1:21:A:ARG:H	3	0.76
(2,388)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HD2	4	0.76
(2,379)	1:10:A:GLN:HA	1:13:A:LYS:HB3	5	0.76
(2,354)	1:15:A:GLY:HA2	1:16:A:GLY:H	7	0.76
(2,353)	1:16:A:GLY:H	1:19:A:SER:HB3	10	0.76
(2,314)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD11	1	0.76
(2,314)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD12	1	0.76
(2,314)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD13	1	0.76
(2,76)	1:24:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	9	0.76
(2,26)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HB3	4	0.76
(1,455)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	3	0.76
(1,455)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	3	0.76
(1,455)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	6	0.76
(1,455)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	6	0.76
(1,437)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG12	9	0.76
(1,437)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG12	9	0.76
(1,353)	1:16:A:GLY:H	1:19:A:SER:HB3	2	0.76
(1,308)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HE3	8	0.76
(1,308)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HE3	10	0.76
(3,391)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HD3	6	0.75
(3,391)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HD3	6	0.75
(3,391)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HD3	6	0.75
(3,293)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HE3	3	0.75
(3,293)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HE3	4	0.75
(2,497)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD21	4	0.75
(2,497)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD22	4	0.75
(2,497)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD23	4	0.75
(2,433)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD3	6	0.75
(2,412)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HE2	3	0.75
(2,412)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HE2	3	0.75
(2,412)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HE2	3	0.75
(2,412)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HE3	3	0.75

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,412)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HE3	3	0.75
(2,412)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HE3	3	0.75
(2,382)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB2	1	0.75
(2,382)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB2	4	0.75
(2,369)	1:23:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	5	0.75
(2,323)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HZ3	9	0.75
(2,323)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HZ3	9	0.75
(2,313)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HG	8	0.75
(2,313)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HG	10	0.75
(2,224)	1:13:A:LYS:HE2	1:13:A:LYS:HG2	1	0.75
(2,224)	1:13:A:LYS:HE3	1:13:A:LYS:HG2	1	0.75
(2,93)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HB3	7	0.75
(2,91)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG2	3	0.75
(2,91)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG3	3	0.75
(2,26)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HB3	6	0.75
(2,26)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HB3	8	0.75
(1,421)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HD3	6	0.75
(1,421)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HD3	6	0.75
(1,421)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HD3	6	0.75
(1,308)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HE3	3	0.75
(1,308)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HE3	4	0.75
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	3	0.74
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	3	0.74
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	3	0.74
(3,428)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	2	0.74
(3,428)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	2	0.74
(3,428)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	2	0.74
(3,293)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HE3	2	0.74
(3,293)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HE3	5	0.74
(3,293)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HE3	7	0.74
(3,293)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HE3	9	0.74
(2,433)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD3	1	0.74
(2,388)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HD2	7	0.74
(2,388)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HD2	9	0.74
(2,381)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG2	9	0.74
(2,381)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG3	9	0.74
(2,354)	1:15:A:GLY:HA2	1:16:A:GLY:H	1	0.74
(2,349)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:H	3	0.74
(2,349)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:H	10	0.74
(2,323)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HZ3	4	0.74
(2,323)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HZ3	4	0.74
(2,313)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HG	9	0.74

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,298)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	10	0.74
(2,269)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HD1	3	0.74
(2,269)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HD2	3	0.74
(2,265)	1:19:A:SER:H	1:19:A:SER:HB2	5	0.74
(2,126)	1:6:A:ARG:HD2	1:6:A:ARG:HG3	3	0.74
(2,119)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG2	9	0.74
(2,93)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HB3	2	0.74
(1,465)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	2	0.74
(1,465)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	2	0.74
(1,465)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	2	0.74
(1,308)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HE3	2	0.74
(1,308)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HE3	5	0.74
(1,308)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HE3	7	0.74
(1,308)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HE3	9	0.74
(1,143)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	3	0.74
(1,143)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	3	0.74
(1,143)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	3	0.74
(3,289)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB2	3	0.73
(2,405)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD11	3	0.73
(2,405)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD12	3	0.73
(2,405)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD13	3	0.73
(2,382)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB2	9	0.73
(2,374)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB3	6	0.73
(2,349)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:H	2	0.73
(2,251)	1:20:A:GLY:HA2	1:20:A:GLY:HA3	1	0.73
(2,251)	1:20:A:GLY:HA2	1:20:A:GLY:HA3	2	0.73
(2,251)	1:20:A:GLY:HA2	1:20:A:GLY:HA3	3	0.73
(2,251)	1:20:A:GLY:HA2	1:20:A:GLY:HA3	4	0.73
(2,251)	1:20:A:GLY:HA2	1:20:A:GLY:HA3	5	0.73
(2,251)	1:20:A:GLY:HA2	1:20:A:GLY:HA3	7	0.73
(2,251)	1:20:A:GLY:HA2	1:20:A:GLY:HA3	8	0.73
(2,251)	1:20:A:GLY:HA2	1:20:A:GLY:HA3	9	0.73
(2,251)	1:20:A:GLY:HA2	1:20:A:GLY:HA3	10	0.73
(2,250)	1:15:A:GLY:HA2	1:15:A:GLY:HA3	6	0.73
(2,250)	1:15:A:GLY:HA2	1:15:A:GLY:HA3	9	0.73
(2,232)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HG2	8	0.73
(2,223)	1:13:A:LYS:HE2	1:13:A:LYS:HG3	6	0.73
(2,223)	1:13:A:LYS:HE3	1:13:A:LYS:HG3	6	0.73
(2,126)	1:6:A:ARG:HD2	1:6:A:ARG:HG3	4	0.73
(2,126)	1:6:A:ARG:HD2	1:6:A:ARG:HG3	8	0.73
(2,91)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG2	6	0.73
(2,91)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG3	6	0.73

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,304)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB2	3	0.73
(4,21)	1:5:A:VAL:HB	1:6:A:ARG:H	3	0.72
(3,462)	1:8:A:TYR:HB3	1:24:A:PRO:HG3	10	0.72
(3,134)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HG2	1	0.72
(2,497)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD21	1	0.72
(2,497)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD22	1	0.72
(2,497)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD23	1	0.72
(2,433)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD3	10	0.72
(2,423)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	9	0.72
(2,423)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	9	0.72
(2,423)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	9	0.72
(2,423)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	9	0.72
(2,423)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	9	0.72
(2,423)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	9	0.72
(2,423)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	9	0.72
(2,423)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	9	0.72
(2,423)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	9	0.72
(2,405)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD11	5	0.72
(2,405)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD12	5	0.72
(2,405)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD13	5	0.72
(2,405)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD11	8	0.72
(2,405)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD12	8	0.72
(2,405)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD13	8	0.72
(2,392)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HD3	3	0.72
(2,381)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG2	10	0.72
(2,381)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG3	10	0.72
(2,313)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HG	5	0.72
(2,301)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG2	8	0.72
(2,301)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG3	8	0.72
(2,298)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	9	0.72
(2,273)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HD2	10	0.72
(2,273)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HD2	10	0.72
(2,251)	1:20:A:GLY:HA2	1:20:A:GLY:HA3	6	0.72
(2,250)	1:15:A:GLY:HA2	1:15:A:GLY:HA3	1	0.72
(2,250)	1:15:A:GLY:HA2	1:15:A:GLY:HA3	2	0.72
(2,250)	1:15:A:GLY:HA2	1:15:A:GLY:HA3	3	0.72
(2,250)	1:15:A:GLY:HA2	1:15:A:GLY:HA3	4	0.72
(2,250)	1:15:A:GLY:HA2	1:15:A:GLY:HA3	5	0.72
(2,250)	1:15:A:GLY:HA2	1:15:A:GLY:HA3	7	0.72
(2,250)	1:15:A:GLY:HA2	1:15:A:GLY:HA3	8	0.72
(2,250)	1:15:A:GLY:HA2	1:15:A:GLY:HA3	10	0.72
(2,76)	1:24:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	7	0.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,504)	1:8:A:TYR:HB3	1:24:A:PRO:HG3	10	0.72
(1,364)	1:5:A:VAL:HB	1:6:A:ARG:H	3	0.72
(1,136)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HG2	1	0.72
(3,462)	1:8:A:TYR:HB3	1:24:A:PRO:HG3	1	0.71
(3,462)	1:8:A:TYR:HB3	1:24:A:PRO:HG3	8	0.71
(3,420)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	1	0.71
(3,420)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	1	0.71
(2,497)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD21	10	0.71
(2,497)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD22	10	0.71
(2,497)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD23	10	0.71
(2,449)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB2	6	0.71
(2,449)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB2	6	0.71
(2,423)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	3	0.71
(2,423)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	3	0.71
(2,423)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	3	0.71
(2,423)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	3	0.71
(2,423)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	3	0.71
(2,423)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	3	0.71
(2,423)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	3	0.71
(2,423)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	3	0.71
(2,423)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	3	0.71
(2,423)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	6	0.71
(2,423)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	6	0.71
(2,423)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	6	0.71
(2,423)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	6	0.71
(2,423)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	6	0.71
(2,423)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	6	0.71
(2,423)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	6	0.71
(2,423)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	6	0.71
(2,423)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	6	0.71
(2,408)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HD3	1	0.71
(2,408)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HD3	1	0.71
(2,408)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HD3	1	0.71
(2,392)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HD3	5	0.71
(2,382)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB2	5	0.71
(2,382)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB2	7	0.71
(2,382)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB2	8	0.71
(2,381)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG2	1	0.71
(2,381)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG3	1	0.71
(2,381)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG2	4	0.71
(2,381)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG3	4	0.71
(2,349)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:H	5	0.71

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,313)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HG	2	0.71
(2,291)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HG3	4	0.71
(2,204)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HG	1	0.71
(2,126)	1:6:A:ARG:HD2	1:6:A:ARG:HG3	10	0.71
(1,504)	1:8:A:TYR:HB3	1:24:A:PRO:HG3	1	0.71
(1,504)	1:8:A:TYR:HB3	1:24:A:PRO:HG3	8	0.71
(1,455)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	1	0.71
(1,455)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	1	0.71
(3,266)	1:8:A:TYR:HD1	1:23:A:PRO:HB3	4	0.7
(3,266)	1:8:A:TYR:HD2	1:23:A:PRO:HB3	4	0.7
(2,423)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	10	0.7
(2,423)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	10	0.7
(2,423)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	10	0.7
(2,423)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	10	0.7
(2,423)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	10	0.7
(2,423)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	10	0.7
(2,423)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	10	0.7
(2,423)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	10	0.7
(2,423)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	10	0.7
(2,323)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HZ3	8	0.7
(2,323)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HZ3	8	0.7
(2,313)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HG	7	0.7
(2,276)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG3	9	0.7
(2,276)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG3	9	0.7
(2,91)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG2	5	0.7
(2,91)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG3	5	0.7
(1,278)	1:8:A:TYR:HD1	1:23:A:PRO:HB3	4	0.7
(1,278)	1:8:A:TYR:HD2	1:23:A:PRO:HB3	4	0.7
(3,462)	1:8:A:TYR:HB3	1:24:A:PRO:HG3	2	0.69
(3,462)	1:8:A:TYR:HB3	1:24:A:PRO:HG3	5	0.69
(3,284)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD2	6	0.69
(3,284)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD2	10	0.69
(3,134)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HG2	5	0.69
(2,461)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:HD21	8	0.69
(2,461)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:HD22	8	0.69
(2,461)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:HD23	8	0.69
(2,416)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD21	6	0.69
(2,416)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD22	6	0.69
(2,416)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD23	6	0.69
(2,416)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD21	6	0.69
(2,416)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD22	6	0.69
(2,416)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD23	6	0.69

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,408)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HD3	10	0.69
(2,408)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HD3	10	0.69
(2,408)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HD3	10	0.69
(2,324)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HE3	1	0.69
(2,324)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HE3	5	0.69
(2,324)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HE3	10	0.69
(2,301)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG2	6	0.69
(2,301)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG3	6	0.69
(2,276)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG3	7	0.69
(2,276)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG3	7	0.69
(2,91)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG2	4	0.69
(2,91)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG3	4	0.69
(2,44)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD3	4	0.69
(2,35)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HG3	2	0.69
(2,35)	1:21:A:ARG:HD3	1:21:A:ARG:HG3	2	0.69
(1,504)	1:8:A:TYR:HB3	1:24:A:PRO:HG3	2	0.69
(1,504)	1:8:A:TYR:HB3	1:24:A:PRO:HG3	5	0.69
(1,299)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD2	6	0.69
(1,299)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD2	10	0.69
(1,136)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HG2	5	0.69
(3,443)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HG2	9	0.68
(3,293)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HE3	1	0.68
(3,293)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HE3	6	0.68
(3,266)	1:8:A:TYR:HD1	1:23:A:PRO:HB3	10	0.68
(3,266)	1:8:A:TYR:HD2	1:23:A:PRO:HB3	10	0.68
(2,423)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	4	0.68
(2,423)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	4	0.68
(2,423)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	4	0.68
(2,423)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	4	0.68
(2,423)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	4	0.68
(2,423)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	4	0.68
(2,423)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	4	0.68
(2,423)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	4	0.68
(2,423)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	4	0.68
(2,382)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB2	10	0.68
(2,379)	1:10:A:GLN:HA	1:13:A:LYS:HB3	9	0.68
(2,374)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB3	8	0.68
(2,369)	1:23:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	2	0.68
(2,324)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HE3	2	0.68
(2,324)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HE3	3	0.68
(2,324)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HE3	4	0.68
(2,324)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HE3	6	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,324)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HE3	8	0.68
(2,324)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HE3	9	0.68
(2,313)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HG	1	0.68
(2,298)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	2	0.68
(2,298)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	3	0.68
(2,279)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HD1	6	0.68
(2,279)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HD2	6	0.68
(2,279)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HD1	6	0.68
(2,279)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HD2	6	0.68
(2,279)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HD1	6	0.68
(2,279)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HD2	6	0.68
(2,273)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HD2	9	0.68
(2,273)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HD2	9	0.68
(2,265)	1:19:A:SER:H	1:19:A:SER:HB2	10	0.68
(2,126)	1:6:A:ARG:HD2	1:6:A:ARG:HG3	6	0.68
(2,119)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG2	10	0.68
(2,35)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HG3	1	0.68
(2,35)	1:21:A:ARG:HD3	1:21:A:ARG:HG3	1	0.68
(2,35)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HG3	3	0.68
(2,35)	1:21:A:ARG:HD3	1:21:A:ARG:HG3	3	0.68
(2,35)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HG3	4	0.68
(2,35)	1:21:A:ARG:HD3	1:21:A:ARG:HG3	4	0.68
(2,35)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HG3	6	0.68
(2,35)	1:21:A:ARG:HD3	1:21:A:ARG:HG3	6	0.68
(2,35)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HG3	7	0.68
(2,35)	1:21:A:ARG:HD3	1:21:A:ARG:HG3	7	0.68
(2,35)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HG3	8	0.68
(2,35)	1:21:A:ARG:HD3	1:21:A:ARG:HG3	8	0.68
(2,35)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HG3	9	0.68
(2,35)	1:21:A:ARG:HD3	1:21:A:ARG:HG3	9	0.68
(1,483)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HG2	9	0.68
(1,308)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HE3	1	0.68
(1,308)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HE3	6	0.68
(1,278)	1:8:A:TYR:HD1	1:23:A:PRO:HB3	10	0.68
(1,278)	1:8:A:TYR:HD2	1:23:A:PRO:HB3	10	0.68
(2,466)	1:12:A:LEU:HA	1:16:A:GLY:HA3	3	0.67
(2,461)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:HD21	1	0.67
(2,461)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:HD22	1	0.67
(2,461)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:HD23	1	0.67
(2,461)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:HD21	10	0.67
(2,461)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:HD22	10	0.67
(2,461)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:HD23	10	0.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,454)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HD3	5	0.67
(2,423)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	2	0.67
(2,423)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	2	0.67
(2,423)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	2	0.67
(2,423)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	2	0.67
(2,423)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	2	0.67
(2,423)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	2	0.67
(2,423)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	2	0.67
(2,423)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	2	0.67
(2,423)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	2	0.67
(2,423)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	5	0.67
(2,423)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	5	0.67
(2,423)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	5	0.67
(2,423)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	5	0.67
(2,423)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	5	0.67
(2,423)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	5	0.67
(2,423)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	5	0.67
(2,423)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	5	0.67
(2,423)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	5	0.67
(2,388)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HD2	10	0.67
(2,373)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HD2	3	0.67
(2,349)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:H	9	0.67
(2,337)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:H	7	0.67
(2,324)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HE3	7	0.67
(2,298)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	1	0.67
(2,298)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	5	0.67
(2,279)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HD1	3	0.67
(2,279)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HD2	3	0.67
(2,279)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HD1	3	0.67
(2,279)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HD2	3	0.67
(2,279)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HD1	3	0.67
(2,279)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HD2	3	0.67
(2,279)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HD1	4	0.67
(2,279)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HD2	4	0.67
(2,279)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HD1	4	0.67
(2,279)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HD2	4	0.67
(2,279)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HD1	4	0.67
(2,279)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HD2	4	0.67
(2,279)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HD1	5	0.67
(2,279)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HD2	5	0.67
(2,279)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HD1	5	0.67
(2,279)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HD2	5	0.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,279)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HD1	5	0.67
(2,279)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HD2	5	0.67
(2,119)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG2	8	0.67
(2,58)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG2	3	0.67
(2,58)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG2	6	0.67
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	7	0.66
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	7	0.66
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	7	0.66
(3,462)	1:8:A:TYR:HB3	1:24:A:PRO:HG3	4	0.66
(3,266)	1:8:A:TYR:HD1	1:23:A:PRO:HB3	5	0.66
(3,266)	1:8:A:TYR:HD2	1:23:A:PRO:HB3	5	0.66
(2,461)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:HD21	4	0.66
(2,461)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:HD22	4	0.66
(2,461)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:HD23	4	0.66
(2,454)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HD3	6	0.66
(2,408)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HD3	3	0.66
(2,408)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HD3	3	0.66
(2,408)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HD3	3	0.66
(2,392)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HD3	4	0.66
(2,279)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HD1	8	0.66
(2,279)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HD2	8	0.66
(2,279)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HD1	8	0.66
(2,279)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HD2	8	0.66
(2,279)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HD1	8	0.66
(2,279)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HD2	8	0.66
(2,232)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HG2	4	0.66
(2,204)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HG	6	0.66
(2,120)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG3	1	0.66
(2,119)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG2	4	0.66
(2,58)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG2	8	0.66
(1,504)	1:8:A:TYR:HB3	1:24:A:PRO:HG3	4	0.66
(1,278)	1:8:A:TYR:HD1	1:23:A:PRO:HB3	5	0.66
(1,278)	1:8:A:TYR:HD2	1:23:A:PRO:HB3	5	0.66
(1,143)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	7	0.66
(1,143)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	7	0.66
(1,143)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	7	0.66
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	5	0.65
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	5	0.65
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	5	0.65
(2,461)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:HD21	5	0.65
(2,461)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:HD22	5	0.65
(2,461)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:HD23	5	0.65

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,430)	1:20:A:GLY:H	1:21:A:ARG:H	4	0.65
(2,408)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HD3	4	0.65
(2,408)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HD3	4	0.65
(2,408)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HD3	4	0.65
(2,401)	1:2:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	9	0.65
(2,401)	1:2:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	9	0.65
(2,401)	1:2:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	9	0.65
(2,379)	1:10:A:GLN:HA	1:13:A:LYS:HB3	7	0.65
(2,374)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB3	7	0.65
(2,349)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:H	4	0.65
(2,334)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HB2	4	0.65
(2,334)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HB3	4	0.65
(2,334)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HB2	5	0.65
(2,334)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HB3	5	0.65
(2,334)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HB2	10	0.65
(2,334)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HB3	10	0.65
(2,310)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HE3	2	0.65
(2,291)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HG3	3	0.65
(2,279)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HD1	10	0.65
(2,279)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HD2	10	0.65
(2,279)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HD1	10	0.65
(2,279)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HD2	10	0.65
(2,279)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HD1	10	0.65
(2,279)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HD2	10	0.65
(2,119)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG2	6	0.65
(2,58)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG2	2	0.65
(2,58)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG2	5	0.65
(2,58)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG2	10	0.65
(1,143)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	5	0.65
(1,143)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	5	0.65
(1,143)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	5	0.65
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	6	0.64
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	6	0.64
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	6	0.64
(3,428)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	9	0.64
(3,428)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	9	0.64
(3,428)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	9	0.64
(3,265)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG3	3	0.64
(3,265)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG3	3	0.64
(2,461)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:HD21	2	0.64
(2,461)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:HD22	2	0.64
(2,461)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:HD23	2	0.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,423)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	1	0.64
(2,423)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	1	0.64
(2,423)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	1	0.64
(2,423)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	1	0.64
(2,423)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	1	0.64
(2,423)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	1	0.64
(2,423)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	1	0.64
(2,423)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	1	0.64
(2,423)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	1	0.64
(2,423)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	8	0.64
(2,423)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	8	0.64
(2,423)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	8	0.64
(2,423)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	8	0.64
(2,423)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	8	0.64
(2,423)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	8	0.64
(2,423)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	8	0.64
(2,423)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	8	0.64
(2,423)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	8	0.64
(2,418)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG11	4	0.64
(2,418)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG12	4	0.64
(2,418)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG13	4	0.64
(2,402)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD11	3	0.64
(2,402)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD12	3	0.64
(2,402)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HD13	3	0.64
(2,349)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:H	8	0.64
(2,310)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HE3	3	0.64
(2,310)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HE3	4	0.64
(2,310)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HE3	5	0.64
(2,310)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HE3	6	0.64
(2,310)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HE3	8	0.64
(2,310)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HE3	10	0.64
(2,279)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HD1	1	0.64
(2,279)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HD2	1	0.64
(2,279)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HD1	1	0.64
(2,279)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HD2	1	0.64
(2,279)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HD1	1	0.64
(2,279)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HD2	1	0.64
(2,279)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HD1	2	0.64
(2,279)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HD2	2	0.64
(2,279)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HD1	2	0.64
(2,279)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HD2	2	0.64
(2,279)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HD1	2	0.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,279)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HD2	2	0.64
(2,232)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HG2	10	0.64
(2,223)	1:13:A:LYS:HE2	1:13:A:LYS:HG3	5	0.64
(2,223)	1:13:A:LYS:HE3	1:13:A:LYS:HG3	5	0.64
(2,223)	1:13:A:LYS:HE2	1:13:A:LYS:HG3	8	0.64
(2,223)	1:13:A:LYS:HE3	1:13:A:LYS:HG3	8	0.64
(2,69)	1:23:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD2	5	0.64
(2,58)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG2	1	0.64
(2,58)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG2	4	0.64
(1,465)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	9	0.64
(1,465)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	9	0.64
(1,465)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	9	0.64
(1,276)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG3	3	0.64
(1,276)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG3	3	0.64
(1,143)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	6	0.64
(1,143)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	6	0.64
(1,143)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	6	0.64
(4,21)	1:5:A:VAL:HB	1:6:A:ARG:H	7	0.63
(4,8)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG2	6	0.63
(4,8)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	6	0.63
(3,391)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HD3	5	0.63
(3,391)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HD3	5	0.63
(3,391)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HD3	5	0.63
(3,284)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD2	5	0.63
(3,265)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG3	6	0.63
(3,265)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG3	6	0.63
(3,134)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HG2	2	0.63
(3,134)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HG2	8	0.63
(2,454)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HD3	4	0.63
(2,337)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:H	2	0.63
(2,310)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HE3	7	0.63
(2,310)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HE3	9	0.63
(2,265)	1:19:A:SER:H	1:19:A:SER:HB2	1	0.63
(2,223)	1:13:A:LYS:HE2	1:13:A:LYS:HG3	3	0.63
(2,223)	1:13:A:LYS:HE3	1:13:A:LYS:HG3	3	0.63
(2,204)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HG	2	0.63
(2,164)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:H	7	0.63
(1,421)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HD3	5	0.63
(1,421)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HD3	5	0.63
(1,421)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HD3	5	0.63
(1,364)	1:5:A:VAL:HB	1:6:A:ARG:H	7	0.63
(1,299)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD2	5	0.63

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,276)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG3	6	0.63
(1,276)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG3	6	0.63
(1,187)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG2	6	0.63
(1,187)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	6	0.63
(1,136)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HG2	2	0.63
(1,136)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HG2	8	0.63
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	8	0.62
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	8	0.62
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	8	0.62
(2,405)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD11	7	0.62
(2,405)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD12	7	0.62
(2,405)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD13	7	0.62
(2,377)	1:11:A:TRP:HA	1:14:A:GLU:HB3	6	0.62
(2,361)	1:20:A:GLY:HA3	1:21:A:ARG:H	1	0.62
(2,334)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HB2	2	0.62
(2,334)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HB3	2	0.62
(2,323)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HZ3	10	0.62
(2,323)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HZ3	10	0.62
(2,314)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD11	6	0.62
(2,314)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD12	6	0.62
(2,314)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD13	6	0.62
(2,298)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	6	0.62
(2,273)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HD2	4	0.62
(2,273)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HD2	4	0.62
(2,232)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HG2	3	0.62
(2,64)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HB3	1	0.62
(2,64)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HB3	10	0.62
(2,58)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG2	7	0.62
(2,58)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG2	9	0.62
(2,40)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HB3	8	0.62
(1,143)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	8	0.62
(1,143)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	8	0.62
(1,143)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	8	0.62
(2,463)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB3	10	0.61
(2,463)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB3	10	0.61
(2,463)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB3	10	0.61
(2,408)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HD3	2	0.61
(2,408)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HD3	2	0.61
(2,408)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HD3	2	0.61
(2,375)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:HA	10	0.61
(2,369)	1:23:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	9	0.61
(2,334)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HB2	3	0.61

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,334)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HB3	3	0.61
(2,334)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HB2	8	0.61
(2,334)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HB3	8	0.61
(2,331)	1:19:A:SER:H	1:20:A:GLY:H	8	0.61
(2,310)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HE3	1	0.61
(2,302)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	10	0.61
(2,298)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	7	0.61
(2,269)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HD1	8	0.61
(2,269)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HD2	8	0.61
(2,261)	1:18:A:SER:H	1:18:A:SER:HB2	4	0.61
(2,261)	1:18:A:SER:H	1:18:A:SER:HB3	4	0.61
(2,221)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HG2	1	0.61
(2,221)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HG2	6	0.61
(2,217)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD11	2	0.61
(2,217)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD12	2	0.61
(2,217)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD13	2	0.61
(2,204)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HG	9	0.61
(2,64)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HB3	2	0.61
(4,21)	1:5:A:VAL:HB	1:6:A:ARG:H	4	0.6
(3,443)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HG2	7	0.6
(3,284)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD2	4	0.6
(3,266)	1:8:A:TYR:HD1	1:23:A:PRO:HB3	8	0.6
(3,266)	1:8:A:TYR:HD2	1:23:A:PRO:HB3	8	0.6
(3,223)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HD2	1	0.6
(2,511)	1:10:A:GLN:HG2	1:14:A:GLU:HG2	6	0.6
(2,511)	1:10:A:GLN:HG3	1:14:A:GLU:HG2	6	0.6
(2,430)	1:20:A:GLY:H	1:21:A:ARG:H	2	0.6
(2,408)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HD3	5	0.6
(2,408)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HD3	5	0.6
(2,408)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HD3	5	0.6
(2,388)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HD2	2	0.6
(2,375)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:HA	4	0.6
(2,361)	1:20:A:GLY:HA3	1:21:A:ARG:H	7	0.6
(2,298)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	8	0.6
(2,279)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HD1	7	0.6
(2,279)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HD2	7	0.6
(2,279)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HD1	7	0.6
(2,279)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HD2	7	0.6
(2,279)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HD1	7	0.6
(2,279)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HD2	7	0.6
(2,269)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HD1	2	0.6
(2,269)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HD2	2	0.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,232)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HG2	9	0.6
(2,204)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HG	5	0.6
(2,204)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HG	8	0.6
(2,164)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:H	6	0.6
(2,64)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HB3	3	0.6
(2,64)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HB3	8	0.6
(2,40)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HB3	6	0.6
(2,33)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD2	10	0.6
(2,33)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD3	10	0.6
(2,33)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HD2	10	0.6
(2,33)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HD3	10	0.6
(1,483)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HG2	7	0.6
(1,364)	1:5:A:VAL:HB	1:6:A:ARG:H	4	0.6
(1,299)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD2	4	0.6
(1,278)	1:8:A:TYR:HD1	1:23:A:PRO:HB3	8	0.6
(1,278)	1:8:A:TYR:HD2	1:23:A:PRO:HB3	8	0.6
(1,233)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HD2	1	0.6
(4,21)	1:5:A:VAL:HB	1:6:A:ARG:H	9	0.59
(3,266)	1:8:A:TYR:HD1	1:23:A:PRO:HB3	6	0.59
(3,266)	1:8:A:TYR:HD2	1:23:A:PRO:HB3	6	0.59
(2,415)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HB2	6	0.59
(2,415)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HB2	6	0.59
(2,415)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HB2	6	0.59
(2,405)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD11	6	0.59
(2,405)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD12	6	0.59
(2,405)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD13	6	0.59
(2,375)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:HA	1	0.59
(2,352)	1:15:A:GLY:HA3	1:16:A:GLY:H	6	0.59
(2,303)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	10	0.59
(2,302)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	5	0.59
(2,298)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	4	0.59
(2,204)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HG	4	0.59
(2,89)	1:25:A:SER:HA	1:25:A:SER:HB2	7	0.59
(2,89)	1:25:A:SER:HA	1:25:A:SER:HB3	7	0.59
(2,69)	1:23:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD2	4	0.59
(2,64)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HB3	5	0.59
(2,64)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HB3	6	0.59
(2,64)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HB3	7	0.59
(2,64)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HB3	9	0.59
(1,364)	1:5:A:VAL:HB	1:6:A:ARG:H	9	0.59
(1,278)	1:8:A:TYR:HD1	1:23:A:PRO:HB3	6	0.59
(1,278)	1:8:A:TYR:HD2	1:23:A:PRO:HB3	6	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,21)	1:5:A:VAL:HB	1:6:A:ARG:H	10	0.58
(3,417)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HB3	3	0.58
(2,486)	1:23:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HD2	2	0.58
(2,446)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG21	2	0.58
(2,446)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG22	2	0.58
(2,446)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG23	2	0.58
(2,446)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG21	3	0.58
(2,446)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG22	3	0.58
(2,446)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG23	3	0.58
(2,446)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG21	4	0.58
(2,446)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG22	4	0.58
(2,446)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG23	4	0.58
(2,446)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG21	9	0.58
(2,446)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG22	9	0.58
(2,446)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG23	9	0.58
(2,416)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD21	9	0.58
(2,416)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD22	9	0.58
(2,416)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD23	9	0.58
(2,416)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD21	9	0.58
(2,416)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD22	9	0.58
(2,416)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD23	9	0.58
(2,401)	1:2:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	3	0.58
(2,401)	1:2:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	3	0.58
(2,401)	1:2:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	3	0.58
(2,269)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HD1	4	0.58
(2,269)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HD2	4	0.58
(2,269)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HD1	5	0.58
(2,269)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HD2	5	0.58
(2,269)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HD1	10	0.58
(2,269)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HD2	10	0.58
(2,217)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD11	8	0.58
(2,217)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD12	8	0.58
(2,217)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD13	8	0.58
(2,64)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HB3	4	0.58
(2,40)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HB3	2	0.58
(1,452)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HB3	3	0.58
(1,364)	1:5:A:VAL:HB	1:6:A:ARG:H	10	0.58
(3,391)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HD3	3	0.57
(3,391)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HD3	3	0.57
(3,391)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HD3	3	0.57
(3,329)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:H	4	0.57
(3,329)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:H	8	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,266)	1:8:A:TYR:HD1	1:23:A:PRO:HB3	1	0.57
(3,266)	1:8:A:TYR:HD2	1:23:A:PRO:HB3	1	0.57
(2,497)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD21	8	0.57
(2,497)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD22	8	0.57
(2,497)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD23	8	0.57
(2,463)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB3	4	0.57
(2,463)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB3	4	0.57
(2,463)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB3	4	0.57
(2,438)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB2	3	0.57
(2,438)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB2	3	0.57
(2,417)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HB2	5	0.57
(2,417)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HB2	5	0.57
(2,417)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HB2	5	0.57
(2,392)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HD3	7	0.57
(2,217)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD11	9	0.57
(2,217)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD12	9	0.57
(2,217)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD13	9	0.57
(2,150)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HG	3	0.57
(2,150)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HG	7	0.57
(2,125)	1:6:A:ARG:HD2	1:6:A:ARG:HG2	7	0.57
(2,123)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HD2	2	0.57
(1,421)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HD3	3	0.57
(1,421)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HD3	3	0.57
(1,421)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HD3	3	0.57
(1,348)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:H	4	0.57
(1,348)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:H	8	0.57
(1,278)	1:8:A:TYR:HD1	1:23:A:PRO:HB3	1	0.57
(1,278)	1:8:A:TYR:HD2	1:23:A:PRO:HB3	1	0.57
(3,426)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:HD21	7	0.56
(3,426)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:HD22	7	0.56
(3,426)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:HD23	7	0.56
(2,412)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HE2	5	0.56
(2,412)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HE2	5	0.56
(2,412)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HE2	5	0.56
(2,412)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HE3	5	0.56
(2,412)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HE3	5	0.56
(2,412)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HE3	5	0.56
(2,352)	1:15:A:GLY:HA3	1:16:A:GLY:H	2	0.56
(2,302)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	6	0.56
(2,217)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD11	5	0.56
(2,217)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD12	5	0.56
(2,217)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD13	5	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,123)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HD2	6	0.56
(2,69)	1:23:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD2	2	0.56
(1,461)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:HD21	7	0.56
(1,461)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:HD22	7	0.56
(1,461)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:HD23	7	0.56
(4,8)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG2	7	0.55
(4,8)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	7	0.55
(3,391)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HD3	8	0.55
(3,391)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HD3	8	0.55
(3,391)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HD3	8	0.55
(2,486)	1:23:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HD2	5	0.55
(2,478)	1:21:A:ARG:HB3	1:22:A:PRO:HD3	1	0.55
(2,446)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG21	1	0.55
(2,446)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG22	1	0.55
(2,446)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG23	1	0.55
(2,446)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG21	6	0.55
(2,446)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG22	6	0.55
(2,446)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG23	6	0.55
(2,401)	1:2:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	8	0.55
(2,401)	1:2:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	8	0.55
(2,401)	1:2:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	8	0.55
(2,303)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	3	0.55
(2,302)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	3	0.55
(2,134)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HB2	1	0.55
(2,119)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG2	2	0.55
(2,69)	1:23:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD2	8	0.55
(2,40)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HB3	5	0.55
(1,421)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HD3	8	0.55
(1,421)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HD3	8	0.55
(1,421)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HD3	8	0.55
(1,187)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG2	7	0.55
(1,187)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	7	0.55
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	9	0.54
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	9	0.54
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	9	0.54
(3,365)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HD2	7	0.54
(3,329)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:H	9	0.54
(3,266)	1:8:A:TYR:HD1	1:23:A:PRO:HB3	2	0.54
(3,266)	1:8:A:TYR:HD2	1:23:A:PRO:HB3	2	0.54
(2,480)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HG2	3	0.54
(2,478)	1:21:A:ARG:HB3	1:22:A:PRO:HD3	7	0.54
(2,470)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:H	9	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,454)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HD3	8	0.54
(2,392)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HD3	10	0.54
(2,379)	1:10:A:GLN:HA	1:13:A:LYS:HB3	1	0.54
(2,375)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:HA	7	0.54
(2,334)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HB2	9	0.54
(2,334)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HB3	9	0.54
(2,150)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HG	6	0.54
(2,134)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HB2	6	0.54
(1,391)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HD2	7	0.54
(1,348)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:H	9	0.54
(1,278)	1:8:A:TYR:HD1	1:23:A:PRO:HB3	2	0.54
(1,278)	1:8:A:TYR:HD2	1:23:A:PRO:HB3	2	0.54
(1,143)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	9	0.54
(1,143)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	9	0.54
(1,143)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	9	0.54
(3,364)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	10	0.53
(3,289)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB2	6	0.53
(3,284)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD2	2	0.53
(3,266)	1:8:A:TYR:HD1	1:23:A:PRO:HB3	9	0.53
(3,266)	1:8:A:TYR:HD2	1:23:A:PRO:HB3	9	0.53
(3,223)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HD2	5	0.53
(2,401)	1:2:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	1	0.53
(2,401)	1:2:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	1	0.53
(2,401)	1:2:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	1	0.53
(2,375)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:HA	2	0.53
(2,375)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:HA	6	0.53
(2,232)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HG2	2	0.53
(2,134)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HB2	2	0.53
(2,123)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HD2	10	0.53
(2,120)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG3	5	0.53
(2,68)	1:23:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD3	1	0.53
(1,390)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	10	0.53
(1,304)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB2	6	0.53
(1,299)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD2	2	0.53
(1,278)	1:8:A:TYR:HD1	1:23:A:PRO:HB3	9	0.53
(1,278)	1:8:A:TYR:HD2	1:23:A:PRO:HB3	9	0.53
(1,233)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HD2	5	0.53
(3,417)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HB3	4	0.52
(3,360)	1:21:A:ARG:HB2	1:22:A:PRO:HD3	5	0.52
(3,329)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:H	5	0.52
(3,289)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB2	2	0.52
(3,289)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB2	10	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,284)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD2	1	0.52
(3,284)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD2	8	0.52
(2,497)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD21	5	0.52
(2,497)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD22	5	0.52
(2,497)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD23	5	0.52
(2,438)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB2	6	0.52
(2,438)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB2	6	0.52
(2,392)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HD3	2	0.52
(2,323)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HZ3	7	0.52
(2,323)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HZ3	7	0.52
(2,302)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	2	0.52
(2,302)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	8	0.52
(2,269)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HD1	1	0.52
(2,269)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HD2	1	0.52
(2,266)	1:19:A:SER:H	1:19:A:SER:HB3	3	0.52
(2,232)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HG2	5	0.52
(2,217)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD11	4	0.52
(2,217)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD12	4	0.52
(2,217)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD13	4	0.52
(2,134)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HB2	5	0.52
(1,452)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HB3	4	0.52
(1,386)	1:21:A:ARG:HB2	1:22:A:PRO:HD3	5	0.52
(1,348)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:H	5	0.52
(1,304)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB2	2	0.52
(1,304)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB2	10	0.52
(1,299)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD2	1	0.52
(1,299)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD2	8	0.52
(4,21)	1:5:A:VAL:HB	1:6:A:ARG:H	5	0.51
(3,329)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:H	2	0.51
(2,454)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HD3	10	0.51
(2,387)	1:21:A:ARG:HB2	1:22:A:PRO:HD2	1	0.51
(2,375)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:HA	3	0.51
(2,375)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:HA	9	0.51
(2,303)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	5	0.51
(2,261)	1:18:A:SER:H	1:18:A:SER:HB2	6	0.51
(2,261)	1:18:A:SER:H	1:18:A:SER:HB3	6	0.51
(2,150)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HG	9	0.51
(2,134)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HB2	4	0.51
(2,134)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HB2	9	0.51
(2,134)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HB2	10	0.51
(2,68)	1:23:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD3	3	0.51
(2,40)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HB3	9	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,364)	1:5:A:VAL:HB	1:6:A:ARG:H	5	0.51
(1,348)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:H	2	0.51
(4,21)	1:5:A:VAL:HB	1:6:A:ARG:H	1	0.5
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	2	0.5
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	2	0.5
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	2	0.5
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	4	0.5
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	4	0.5
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	4	0.5
(3,360)	1:21:A:ARG:HB2	1:22:A:PRO:HD3	9	0.5
(3,289)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB2	5	0.5
(3,266)	1:8:A:TYR:HD1	1:23:A:PRO:HB3	7	0.5
(3,266)	1:8:A:TYR:HD2	1:23:A:PRO:HB3	7	0.5
(2,478)	1:21:A:ARG:HB3	1:22:A:PRO:HD3	6	0.5
(2,463)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB3	1	0.5
(2,463)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB3	1	0.5
(2,463)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB3	1	0.5
(2,446)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG21	5	0.5
(2,446)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG22	5	0.5
(2,446)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG23	5	0.5
(2,446)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG21	8	0.5
(2,446)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG22	8	0.5
(2,446)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG23	8	0.5
(2,385)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HB2	10	0.5
(2,269)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HD1	6	0.5
(2,269)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HD2	6	0.5
(2,198)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HB2	2	0.5
(2,198)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HB2	4	0.5
(2,198)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HB2	5	0.5
(2,123)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HD2	5	0.5
(2,63)	1:23:A:PRO:HD2	1:23:A:PRO:HG3	1	0.5
(2,63)	1:23:A:PRO:HD3	1:23:A:PRO:HG3	1	0.5
(2,63)	1:23:A:PRO:HD2	1:23:A:PRO:HG3	3	0.5
(2,63)	1:23:A:PRO:HD3	1:23:A:PRO:HG3	3	0.5
(2,63)	1:23:A:PRO:HD2	1:23:A:PRO:HG3	6	0.5
(2,63)	1:23:A:PRO:HD3	1:23:A:PRO:HG3	6	0.5
(2,63)	1:23:A:PRO:HD2	1:23:A:PRO:HG3	8	0.5
(2,63)	1:23:A:PRO:HD3	1:23:A:PRO:HG3	8	0.5
(2,35)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HG3	5	0.5
(2,35)	1:21:A:ARG:HD3	1:21:A:ARG:HG3	5	0.5
(2,32)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD2	10	0.5
(2,32)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD3	10	0.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,28)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HB2	1	0.5
(2,28)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HB2	2	0.5
(1,386)	1:21:A:ARG:HB2	1:22:A:PRO:HD3	9	0.5
(1,364)	1:5:A:VAL:HB	1:6:A:ARG:H	1	0.5
(1,304)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB2	5	0.5
(1,278)	1:8:A:TYR:HD1	1:23:A:PRO:HB3	7	0.5
(1,278)	1:8:A:TYR:HD2	1:23:A:PRO:HB3	7	0.5
(1,143)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	2	0.5
(1,143)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	2	0.5
(1,143)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	2	0.5
(1,143)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	4	0.5
(1,143)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	4	0.5
(1,143)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	4	0.5
(4,21)	1:5:A:VAL:HB	1:6:A:ARG:H	8	0.49
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	1	0.49
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	1	0.49
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	1	0.49
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	10	0.49
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	10	0.49
(4,3)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	10	0.49
(3,360)	1:21:A:ARG:HB2	1:22:A:PRO:HD3	8	0.49
(3,360)	1:21:A:ARG:HB2	1:22:A:PRO:HD3	10	0.49
(3,329)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:H	3	0.49
(3,329)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:H	10	0.49
(2,459)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HD2	1	0.49
(2,459)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HD2	1	0.49
(2,459)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HD2	1	0.49
(2,446)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG21	10	0.49
(2,446)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG22	10	0.49
(2,446)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG23	10	0.49
(2,418)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG11	1	0.49
(2,418)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG12	1	0.49
(2,418)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG13	1	0.49
(2,385)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HB2	3	0.49
(2,373)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HD2	6	0.49
(2,335)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HG2	3	0.49
(2,335)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HG3	3	0.49
(2,303)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	9	0.49
(2,302)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	4	0.49
(2,198)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HB2	3	0.49
(2,198)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HB2	8	0.49
(2,198)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HB2	10	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,164)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:H	9	0.49
(2,123)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HD2	1	0.49
(2,123)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HD2	4	0.49
(2,63)	1:23:A:PRO:HD2	1:23:A:PRO:HG3	2	0.49
(2,63)	1:23:A:PRO:HD3	1:23:A:PRO:HG3	2	0.49
(2,63)	1:23:A:PRO:HD2	1:23:A:PRO:HG3	4	0.49
(2,63)	1:23:A:PRO:HD3	1:23:A:PRO:HG3	4	0.49
(2,63)	1:23:A:PRO:HD2	1:23:A:PRO:HG3	5	0.49
(2,63)	1:23:A:PRO:HD3	1:23:A:PRO:HG3	5	0.49
(2,63)	1:23:A:PRO:HD2	1:23:A:PRO:HG3	7	0.49
(2,63)	1:23:A:PRO:HD3	1:23:A:PRO:HG3	7	0.49
(2,63)	1:23:A:PRO:HD2	1:23:A:PRO:HG3	9	0.49
(2,63)	1:23:A:PRO:HD3	1:23:A:PRO:HG3	9	0.49
(2,63)	1:23:A:PRO:HD2	1:23:A:PRO:HG3	10	0.49
(2,63)	1:23:A:PRO:HD3	1:23:A:PRO:HG3	10	0.49
(2,28)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HB2	7	0.49
(1,386)	1:21:A:ARG:HB2	1:22:A:PRO:HD3	8	0.49
(1,386)	1:21:A:ARG:HB2	1:22:A:PRO:HD3	10	0.49
(1,364)	1:5:A:VAL:HB	1:6:A:ARG:H	8	0.49
(1,348)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:H	3	0.49
(1,348)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:H	10	0.49
(1,143)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	1	0.49
(1,143)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	1	0.49
(1,143)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	1	0.49
(1,143)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	10	0.49
(1,143)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	10	0.49
(1,143)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	10	0.49
(4,21)	1:5:A:VAL:HB	1:6:A:ARG:H	2	0.48
(4,21)	1:5:A:VAL:HB	1:6:A:ARG:H	6	0.48
(3,417)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HB3	8	0.48
(3,360)	1:21:A:ARG:HB2	1:22:A:PRO:HD3	6	0.48
(3,223)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HD2	6	0.48
(2,486)	1:23:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HD2	8	0.48
(2,478)	1:21:A:ARG:HB3	1:22:A:PRO:HD3	5	0.48
(2,478)	1:21:A:ARG:HB3	1:22:A:PRO:HD3	8	0.48
(2,478)	1:21:A:ARG:HB3	1:22:A:PRO:HD3	10	0.48
(2,446)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG21	7	0.48
(2,446)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG22	7	0.48
(2,446)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HG23	7	0.48
(2,409)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	7	0.48
(2,409)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	7	0.48
(2,409)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	7	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,375)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:HA	5	0.48
(2,303)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	4	0.48
(2,232)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HG2	6	0.48
(2,134)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HB2	8	0.48
(2,119)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG2	5	0.48
(2,106)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HB	7	0.48
(2,93)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HB3	10	0.48
(2,91)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG2	9	0.48
(2,91)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG3	9	0.48
(2,88)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HB2	9	0.48
(2,88)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HB3	9	0.48
(2,81)	1:24:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HG3	1	0.48
(2,44)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD3	3	0.48
(2,35)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HG3	10	0.48
(2,35)	1:21:A:ARG:HD3	1:21:A:ARG:HG3	10	0.48
(2,14)	1:20:A:GLY:H	1:20:A:GLY:HA3	2	0.48
(1,452)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HB3	8	0.48
(1,386)	1:21:A:ARG:HB2	1:22:A:PRO:HD3	6	0.48
(1,364)	1:5:A:VAL:HB	1:6:A:ARG:H	2	0.48
(1,364)	1:5:A:VAL:HB	1:6:A:ARG:H	6	0.48
(1,233)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HD2	6	0.48
(3,305)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB3	4	0.47
(3,289)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB2	8	0.47
(3,284)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD2	3	0.47
(3,284)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD2	7	0.47
(3,264)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB3	8	0.47
(3,264)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB3	8	0.47
(2,478)	1:21:A:ARG:HB3	1:22:A:PRO:HD3	9	0.47
(2,463)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB3	2	0.47
(2,463)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB3	2	0.47
(2,463)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB3	2	0.47
(2,454)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HD3	9	0.47
(2,430)	1:20:A:GLY:H	1:21:A:ARG:H	5	0.47
(2,418)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG11	5	0.47
(2,418)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG12	5	0.47
(2,418)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG13	5	0.47
(2,405)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD11	9	0.47
(2,405)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD12	9	0.47
(2,405)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD13	9	0.47
(2,392)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HD3	8	0.47
(2,392)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HD3	9	0.47
(2,375)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:HA	8	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,323)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HZ3	6	0.47
(2,323)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HZ3	6	0.47
(2,232)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HG2	7	0.47
(2,198)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HB2	1	0.47
(2,198)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HB2	7	0.47
(2,198)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HB2	9	0.47
(2,125)	1:6:A:ARG:HD2	1:6:A:ARG:HG2	5	0.47
(2,106)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HB	3	0.47
(2,106)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HB	9	0.47
(2,40)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HB3	7	0.47
(2,40)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HB3	10	0.47
(2,28)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HB2	5	0.47
(2,28)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HB2	6	0.47
(2,28)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HB2	8	0.47
(2,28)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HB2	9	0.47
(2,14)	1:20:A:GLY:H	1:20:A:GLY:HA3	4	0.47
(1,320)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB3	4	0.47
(1,304)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB2	8	0.47
(1,299)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD2	3	0.47
(1,299)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD2	7	0.47
(1,275)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB3	8	0.47
(1,275)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB3	8	0.47
(4,45)	1:2:A:GLU:HB2	1:3:A:GLU:HA	7	0.46
(4,13)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD21	6	0.46
(4,13)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD22	6	0.46
(4,13)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD23	6	0.46
(4,13)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD21	6	0.46
(4,13)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD22	6	0.46
(4,13)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD23	6	0.46
(3,360)	1:21:A:ARG:HB2	1:22:A:PRO:HD3	7	0.46
(3,284)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD2	9	0.46
(3,264)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB3	4	0.46
(3,264)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB3	4	0.46
(2,471)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:H	1	0.46
(2,471)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:H	1	0.46
(2,454)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HD3	2	0.46
(2,405)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD11	1	0.46
(2,405)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD12	1	0.46
(2,405)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD13	1	0.46
(2,352)	1:15:A:GLY:HA3	1:16:A:GLY:H	4	0.46
(2,325)	1:11:A:TRP:HZ2	1:11:A:TRP:HZ3	3	0.46
(2,325)	1:11:A:TRP:HZ2	1:11:A:TRP:HZ3	4	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,325)	1:11:A:TRP:HZ2	1:11:A:TRP:HZ3	5	0.46
(2,325)	1:11:A:TRP:HZ2	1:11:A:TRP:HZ3	6	0.46
(2,325)	1:11:A:TRP:HZ2	1:11:A:TRP:HZ3	8	0.46
(2,325)	1:11:A:TRP:HZ2	1:11:A:TRP:HZ3	10	0.46
(2,316)	1:10:A:GLN:HE21	1:14:A:GLU:HG2	7	0.46
(2,288)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	10	0.46
(2,273)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HD2	8	0.46
(2,273)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HD2	8	0.46
(2,187)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG2	5	0.46
(2,187)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	5	0.46
(2,171)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HD11	7	0.46
(2,171)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HD12	7	0.46
(2,171)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HD13	7	0.46
(2,123)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HD2	9	0.46
(2,106)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HB	6	0.46
(2,57)	1:16:A:GLY:HA2	1:16:A:GLY:HA3	1	0.46
(2,57)	1:16:A:GLY:HA2	1:16:A:GLY:HA3	3	0.46
(2,57)	1:16:A:GLY:HA2	1:16:A:GLY:HA3	7	0.46
(2,48)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HB3	1	0.46
(2,48)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HB3	4	0.46
(2,33)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD2	9	0.46
(2,33)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD3	9	0.46
(2,33)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HD2	9	0.46
(2,33)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HD3	9	0.46
(2,28)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HB2	10	0.46
(1,516)	1:2:A:GLU:HB2	1:3:A:GLU:HA	7	0.46
(1,386)	1:21:A:ARG:HB2	1:22:A:PRO:HD3	7	0.46
(1,299)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD2	9	0.46
(1,281)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD21	6	0.46
(1,281)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD22	6	0.46
(1,281)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD23	6	0.46
(1,281)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD21	6	0.46
(1,281)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD22	6	0.46
(1,281)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD23	6	0.46
(1,275)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB3	4	0.46
(1,275)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB3	4	0.46
(3,264)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB3	2	0.45
(3,264)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB3	2	0.45
(3,264)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB3	5	0.45
(3,264)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB3	5	0.45
(2,491)	1:19:A:SER:HB3	1:20:A:GLY:H	4	0.45
(2,478)	1:21:A:ARG:HB3	1:22:A:PRO:HD3	2	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,417)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HB2	2	0.45
(2,417)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HB2	2	0.45
(2,417)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HB2	2	0.45
(2,409)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	9	0.45
(2,409)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	9	0.45
(2,409)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	9	0.45
(2,408)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HD3	9	0.45
(2,408)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HD3	9	0.45
(2,408)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HD3	9	0.45
(2,353)	1:16:A:GLY:H	1:19:A:SER:HB3	5	0.45
(2,353)	1:16:A:GLY:H	1:19:A:SER:HB3	6	0.45
(2,353)	1:16:A:GLY:H	1:19:A:SER:HB3	7	0.45
(2,325)	1:11:A:TRP:HZ2	1:11:A:TRP:HZ3	2	0.45
(2,325)	1:11:A:TRP:HZ2	1:11:A:TRP:HZ3	7	0.45
(2,325)	1:11:A:TRP:HZ2	1:11:A:TRP:HZ3	9	0.45
(2,288)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	2	0.45
(2,288)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	3	0.45
(2,288)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	4	0.45
(2,288)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	5	0.45
(2,288)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	8	0.45
(2,187)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG2	3	0.45
(2,187)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	3	0.45
(2,135)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HB3	7	0.45
(2,106)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HB	4	0.45
(2,106)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HB	5	0.45
(2,106)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HB	10	0.45
(2,93)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HB3	6	0.45
(2,57)	1:16:A:GLY:HA2	1:16:A:GLY:HA3	4	0.45
(2,57)	1:16:A:GLY:HA2	1:16:A:GLY:HA3	5	0.45
(2,57)	1:16:A:GLY:HA2	1:16:A:GLY:HA3	6	0.45
(2,57)	1:16:A:GLY:HA2	1:16:A:GLY:HA3	9	0.45
(2,57)	1:16:A:GLY:HA2	1:16:A:GLY:HA3	10	0.45
(2,48)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HB3	7	0.45
(2,33)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD2	1	0.45
(2,33)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD3	1	0.45
(2,33)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HD2	1	0.45
(2,33)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HD3	1	0.45
(2,31)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HG3	5	0.45
(2,23)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HB3	2	0.45
(2,23)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HB3	7	0.45
(2,23)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HB3	8	0.45
(2,23)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HB3	9	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,275)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB3	2	0.45
(1,275)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB3	2	0.45
(1,275)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB3	5	0.45
(1,275)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB3	5	0.45
(4,22)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:H	3	0.44
(4,22)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:H	3	0.44
(4,22)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:H	3	0.44
(3,364)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	2	0.44
(3,329)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:H	7	0.44
(3,266)	1:8:A:TYR:HD1	1:23:A:PRO:HB3	3	0.44
(3,266)	1:8:A:TYR:HD2	1:23:A:PRO:HB3	3	0.44
(3,223)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HD2	3	0.44
(2,471)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:H	2	0.44
(2,471)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:H	2	0.44
(2,470)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:H	8	0.44
(2,464)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:HA2	3	0.44
(2,464)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:HA2	3	0.44
(2,464)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:HA2	3	0.44
(2,436)	1:11:A:TRP:HZ3	1:17:A:PRO:HG2	1	0.44
(2,436)	1:11:A:TRP:HZ3	1:17:A:PRO:HG3	1	0.44
(2,409)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	1	0.44
(2,409)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	1	0.44
(2,409)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	1	0.44
(2,409)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	8	0.44
(2,409)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	8	0.44
(2,409)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	8	0.44
(2,387)	1:21:A:ARG:HB2	1:22:A:PRO:HD2	2	0.44
(2,336)	1:1:A:GLU:HB2	1:1:A:GLU:HG2	8	0.44
(2,336)	1:1:A:GLU:HB2	1:1:A:GLU:HG3	8	0.44
(2,336)	1:1:A:GLU:HB3	1:1:A:GLU:HG2	8	0.44
(2,336)	1:1:A:GLU:HB3	1:1:A:GLU:HG3	8	0.44
(2,335)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HG2	2	0.44
(2,335)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HG3	2	0.44
(2,325)	1:11:A:TRP:HZ2	1:11:A:TRP:HZ3	1	0.44
(2,318)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HG3	1	0.44
(2,293)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB3	3	0.44
(2,288)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	6	0.44
(2,288)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	9	0.44
(2,221)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HG2	5	0.44
(2,189)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HB3	7	0.44
(2,187)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG2	8	0.44
(2,187)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	8	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,173)	1:9:A:ILE:HG12	1:9:A:ILE:HG21	8	0.44
(2,173)	1:9:A:ILE:HG12	1:9:A:ILE:HG22	8	0.44
(2,173)	1:9:A:ILE:HG12	1:9:A:ILE:HG23	8	0.44
(2,125)	1:6:A:ARG:HD2	1:6:A:ARG:HG2	2	0.44
(2,106)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HB	2	0.44
(2,106)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HB	8	0.44
(2,93)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HB3	8	0.44
(2,81)	1:24:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HG3	3	0.44
(2,81)	1:24:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HG3	10	0.44
(2,57)	1:16:A:GLY:HA2	1:16:A:GLY:HA3	2	0.44
(2,57)	1:16:A:GLY:HA2	1:16:A:GLY:HA3	8	0.44
(2,48)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HB3	6	0.44
(2,40)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HB3	1	0.44
(2,33)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD2	6	0.44
(2,33)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD3	6	0.44
(2,33)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HD2	6	0.44
(2,33)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HD3	6	0.44
(2,23)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HB3	1	0.44
(2,23)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HB3	3	0.44
(2,23)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HB3	4	0.44
(2,23)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HB3	5	0.44
(2,23)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HB3	6	0.44
(2,23)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HB3	10	0.44
(1,390)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	2	0.44
(1,366)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:H	3	0.44
(1,366)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:H	3	0.44
(1,366)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:H	3	0.44
(1,348)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:H	7	0.44
(1,278)	1:8:A:TYR:HD1	1:23:A:PRO:HB3	3	0.44
(1,278)	1:8:A:TYR:HD2	1:23:A:PRO:HB3	3	0.44
(1,233)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HD2	3	0.44
(4,37)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:HA2	4	0.43
(4,37)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:HA2	4	0.43
(4,37)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:HA2	4	0.43
(4,19)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:H	7	0.43
(4,19)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:H	7	0.43
(3,364)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	5	0.43
(2,495)	1:3:A:GLU:HA	1:6:A:ARG:HB3	3	0.43
(2,463)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB3	9	0.43
(2,463)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB3	9	0.43
(2,463)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB3	9	0.43
(2,449)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB2	3	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,449)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB2	3	0.43
(2,409)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	10	0.43
(2,409)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	10	0.43
(2,409)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	10	0.43
(2,405)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD11	10	0.43
(2,405)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD12	10	0.43
(2,405)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD13	10	0.43
(2,397)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HG3	1	0.43
(2,397)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HG3	1	0.43
(2,397)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HG3	5	0.43
(2,397)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HG3	5	0.43
(2,397)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HG3	7	0.43
(2,397)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HG3	7	0.43
(2,390)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD2	4	0.43
(2,390)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	4	0.43
(2,387)	1:21:A:ARG:HB2	1:22:A:PRO:HD2	7	0.43
(2,336)	1:1:A:GLU:HB2	1:1:A:GLU:HG2	4	0.43
(2,336)	1:1:A:GLU:HB2	1:1:A:GLU:HG3	4	0.43
(2,336)	1:1:A:GLU:HB3	1:1:A:GLU:HG2	4	0.43
(2,336)	1:1:A:GLU:HB3	1:1:A:GLU:HG3	4	0.43
(2,336)	1:1:A:GLU:HB2	1:1:A:GLU:HG2	9	0.43
(2,336)	1:1:A:GLU:HB2	1:1:A:GLU:HG3	9	0.43
(2,336)	1:1:A:GLU:HB3	1:1:A:GLU:HG2	9	0.43
(2,336)	1:1:A:GLU:HB3	1:1:A:GLU:HG3	9	0.43
(2,303)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	7	0.43
(2,288)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	1	0.43
(2,274)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG2	7	0.43
(2,274)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG2	7	0.43
(2,273)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HD2	2	0.43
(2,273)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HD2	2	0.43
(2,237)	1:15:A:GLY:H	1:16:A:GLY:H	10	0.43
(2,221)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HG2	7	0.43
(2,215)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HG	7	0.43
(2,198)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HB2	6	0.43
(2,106)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HB	1	0.43
(2,105)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:H	10	0.43
(2,98)	1:3:A:GLU:H	1:3:A:GLU:HB2	10	0.43
(2,81)	1:24:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HG3	6	0.43
(2,48)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HB3	3	0.43
(2,48)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HB3	5	0.43
(2,48)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HB3	8	0.43
(2,48)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HB3	10	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,464)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:HA2	4	0.43
(1,464)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:HA2	4	0.43
(1,464)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:HA2	4	0.43
(1,390)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	5	0.43
(1,326)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:H	7	0.43
(1,326)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:H	7	0.43
(4,45)	1:2:A:GLU:HB2	1:3:A:GLU:HA	2	0.42
(4,36)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB3	7	0.42
(4,36)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB3	7	0.42
(4,36)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB3	7	0.42
(3,386)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HB2	5	0.42
(3,386)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HB2	5	0.42
(3,386)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HB2	5	0.42
(3,364)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	9	0.42
(3,229)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HG3	6	0.42
(2,461)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:HD21	3	0.42
(2,461)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:HD22	3	0.42
(2,461)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:HD23	3	0.42
(2,422)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HG2	8	0.42
(2,422)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HG2	8	0.42
(2,422)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HG2	8	0.42
(2,409)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	5	0.42
(2,409)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	5	0.42
(2,409)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	5	0.42
(2,405)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD11	4	0.42
(2,405)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD12	4	0.42
(2,405)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD13	4	0.42
(2,397)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HG3	2	0.42
(2,397)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HG3	2	0.42
(2,397)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HG3	3	0.42
(2,397)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HG3	3	0.42
(2,397)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HG3	4	0.42
(2,397)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HG3	4	0.42
(2,397)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HG3	6	0.42
(2,397)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HG3	6	0.42
(2,397)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HG3	8	0.42
(2,397)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HG3	8	0.42
(2,397)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HG3	9	0.42
(2,397)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HG3	9	0.42
(2,397)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HG3	10	0.42
(2,397)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HG3	10	0.42
(2,353)	1:16:A:GLY:H	1:19:A:SER:HB3	4	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,336)	1:1:A:GLU:HB2	1:1:A:GLU:HG2	1	0.42
(2,336)	1:1:A:GLU:HB2	1:1:A:GLU:HG3	1	0.42
(2,336)	1:1:A:GLU:HB3	1:1:A:GLU:HG2	1	0.42
(2,336)	1:1:A:GLU:HB3	1:1:A:GLU:HG3	1	0.42
(2,336)	1:1:A:GLU:HB2	1:1:A:GLU:HG2	2	0.42
(2,336)	1:1:A:GLU:HB2	1:1:A:GLU:HG3	2	0.42
(2,336)	1:1:A:GLU:HB3	1:1:A:GLU:HG2	2	0.42
(2,336)	1:1:A:GLU:HB3	1:1:A:GLU:HG3	2	0.42
(2,336)	1:1:A:GLU:HB2	1:1:A:GLU:HG2	6	0.42
(2,336)	1:1:A:GLU:HB2	1:1:A:GLU:HG3	6	0.42
(2,336)	1:1:A:GLU:HB3	1:1:A:GLU:HG2	6	0.42
(2,336)	1:1:A:GLU:HB3	1:1:A:GLU:HG3	6	0.42
(2,336)	1:1:A:GLU:HB2	1:1:A:GLU:HG2	10	0.42
(2,336)	1:1:A:GLU:HB2	1:1:A:GLU:HG3	10	0.42
(2,336)	1:1:A:GLU:HB3	1:1:A:GLU:HG2	10	0.42
(2,336)	1:1:A:GLU:HB3	1:1:A:GLU:HG3	10	0.42
(2,302)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	1	0.42
(2,288)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	7	0.42
(2,265)	1:19:A:SER:H	1:19:A:SER:HB2	2	0.42
(2,173)	1:9:A:ILE:HG12	1:9:A:ILE:HG21	1	0.42
(2,173)	1:9:A:ILE:HG12	1:9:A:ILE:HG22	1	0.42
(2,173)	1:9:A:ILE:HG12	1:9:A:ILE:HG23	1	0.42
(2,173)	1:9:A:ILE:HG12	1:9:A:ILE:HG21	3	0.42
(2,173)	1:9:A:ILE:HG12	1:9:A:ILE:HG22	3	0.42
(2,173)	1:9:A:ILE:HG12	1:9:A:ILE:HG23	3	0.42
(2,173)	1:9:A:ILE:HG12	1:9:A:ILE:HG21	5	0.42
(2,173)	1:9:A:ILE:HG12	1:9:A:ILE:HG22	5	0.42
(2,173)	1:9:A:ILE:HG12	1:9:A:ILE:HG23	5	0.42
(2,120)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG3	2	0.42
(2,68)	1:23:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD3	6	0.42
(2,67)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HG3	10	0.42
(2,48)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HB3	2	0.42
(2,48)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HB3	9	0.42
(2,33)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD2	8	0.42
(2,33)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD3	8	0.42
(2,33)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HD2	8	0.42
(2,33)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HD3	8	0.42
(2,31)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HG3	9	0.42
(2,31)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HG3	10	0.42
(2,14)	1:20:A:GLY:H	1:20:A:GLY:HA3	3	0.42
(1,516)	1:2:A:GLU:HB2	1:3:A:GLU:HA	2	0.42
(1,463)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB3	7	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,463)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB3	7	0.42
(1,463)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB3	7	0.42
(1,415)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HB2	5	0.42
(1,415)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HB2	5	0.42
(1,415)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HB2	5	0.42
(1,390)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	9	0.42
(1,239)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HG3	6	0.42
(4,29)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD11	10	0.41
(4,29)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD12	10	0.41
(4,29)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD13	10	0.41
(4,13)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD21	2	0.41
(4,13)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD22	2	0.41
(4,13)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD23	2	0.41
(4,13)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD21	2	0.41
(4,13)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD22	2	0.41
(4,13)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD23	2	0.41
(3,402)	1:11:A:TRP:HZ3	1:17:A:PRO:HD2	4	0.41
(2,422)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HG2	10	0.41
(2,422)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HG2	10	0.41
(2,422)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HG2	10	0.41
(2,409)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	4	0.41
(2,409)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	4	0.41
(2,409)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	4	0.41
(2,371)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD2	6	0.41
(2,371)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD3	6	0.41
(2,371)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD2	10	0.41
(2,371)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD3	10	0.41
(2,356)	1:7:A:LEU:HB2	1:8:A:TYR:H	8	0.41
(2,336)	1:1:A:GLU:HB2	1:1:A:GLU:HG2	3	0.41
(2,336)	1:1:A:GLU:HB2	1:1:A:GLU:HG3	3	0.41
(2,336)	1:1:A:GLU:HB3	1:1:A:GLU:HG2	3	0.41
(2,336)	1:1:A:GLU:HB3	1:1:A:GLU:HG3	3	0.41
(2,316)	1:10:A:GLN:HE21	1:14:A:GLU:HG2	2	0.41
(2,303)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	1	0.41
(2,302)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	9	0.41
(2,244)	1:14:A:GLU:HB3	1:14:A:GLU:HG2	7	0.41
(2,242)	1:14:A:GLU:HG2	1:14:A:GLU:HG3	1	0.41
(2,242)	1:14:A:GLU:HG2	1:14:A:GLU:HG3	3	0.41
(2,242)	1:14:A:GLU:HG2	1:14:A:GLU:HG3	5	0.41
(2,242)	1:14:A:GLU:HG2	1:14:A:GLU:HG3	8	0.41
(2,232)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HG2	1	0.41
(2,173)	1:9:A:ILE:HG12	1:9:A:ILE:HG21	2	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,173)	1:9:A:ILE:HG12	1:9:A:ILE:HG22	2	0.41
(2,173)	1:9:A:ILE:HG12	1:9:A:ILE:HG23	2	0.41
(2,173)	1:9:A:ILE:HG12	1:9:A:ILE:HG21	4	0.41
(2,173)	1:9:A:ILE:HG12	1:9:A:ILE:HG22	4	0.41
(2,173)	1:9:A:ILE:HG12	1:9:A:ILE:HG23	4	0.41
(2,173)	1:9:A:ILE:HG12	1:9:A:ILE:HG21	7	0.41
(2,173)	1:9:A:ILE:HG12	1:9:A:ILE:HG22	7	0.41
(2,173)	1:9:A:ILE:HG12	1:9:A:ILE:HG23	7	0.41
(2,173)	1:9:A:ILE:HG12	1:9:A:ILE:HG21	9	0.41
(2,173)	1:9:A:ILE:HG12	1:9:A:ILE:HG22	9	0.41
(2,173)	1:9:A:ILE:HG12	1:9:A:ILE:HG23	9	0.41
(2,164)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:H	3	0.41
(2,127)	1:6:A:ARG:HD3	1:6:A:ARG:HG3	7	0.41
(2,125)	1:6:A:ARG:HD2	1:6:A:ARG:HG2	1	0.41
(2,105)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:H	7	0.41
(2,89)	1:25:A:SER:HA	1:25:A:SER:HB2	8	0.41
(2,89)	1:25:A:SER:HA	1:25:A:SER:HB3	8	0.41
(2,81)	1:24:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HG3	2	0.41
(2,81)	1:24:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HG3	5	0.41
(2,67)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HG3	6	0.41
(2,33)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD2	2	0.41
(2,33)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD3	2	0.41
(2,33)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HD2	2	0.41
(2,33)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HD3	2	0.41
(2,32)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD2	9	0.41
(2,32)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD3	9	0.41
(1,434)	1:11:A:TRP:HZ3	1:17:A:PRO:HD2	4	0.41
(1,410)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD11	10	0.41
(1,410)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD12	10	0.41
(1,410)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD13	10	0.41
(1,281)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD21	2	0.41
(1,281)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD22	2	0.41
(1,281)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD23	2	0.41
(1,281)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD21	2	0.41
(1,281)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD22	2	0.41
(1,281)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD23	2	0.41
(4,37)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:HA2	2	0.4
(4,37)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:HA2	2	0.4
(4,37)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:HA2	2	0.4
(4,37)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:HA2	8	0.4
(4,37)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:HA2	8	0.4
(4,37)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:HA2	8	0.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,29)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD11	3	0.4
(4,29)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD12	3	0.4
(4,29)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD13	3	0.4
(4,19)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:H	5	0.4
(4,19)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:H	5	0.4
(4,16)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB2	2	0.4
(4,13)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD21	4	0.4
(4,13)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD22	4	0.4
(4,13)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD23	4	0.4
(4,13)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD21	4	0.4
(4,13)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD22	4	0.4
(4,13)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD23	4	0.4
(3,430)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	10	0.4
(3,430)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	10	0.4
(3,430)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	10	0.4
(3,402)	1:11:A:TRP:HZ3	1:17:A:PRO:HD2	6	0.4
(3,386)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HB2	2	0.4
(3,386)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HB2	2	0.4
(3,386)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HB2	2	0.4
(3,305)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB3	3	0.4
(3,289)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB2	4	0.4
(2,473)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:HE3	1	0.4
(2,473)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:HE3	1	0.4
(2,470)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:H	6	0.4
(2,409)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	2	0.4
(2,409)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	2	0.4
(2,409)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	2	0.4
(2,409)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	6	0.4
(2,409)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	6	0.4
(2,409)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	6	0.4
(2,371)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD2	5	0.4
(2,371)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD3	5	0.4
(2,318)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HG3	7	0.4
(2,242)	1:14:A:GLU:HG2	1:14:A:GLU:HG3	2	0.4
(2,242)	1:14:A:GLU:HG2	1:14:A:GLU:HG3	4	0.4
(2,242)	1:14:A:GLU:HG2	1:14:A:GLU:HG3	6	0.4
(2,242)	1:14:A:GLU:HG2	1:14:A:GLU:HG3	7	0.4
(2,242)	1:14:A:GLU:HG2	1:14:A:GLU:HG3	9	0.4
(2,242)	1:14:A:GLU:HG2	1:14:A:GLU:HG3	10	0.4
(2,221)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HG2	2	0.4
(2,215)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HG	3	0.4
(2,173)	1:9:A:ILE:HG12	1:9:A:ILE:HG21	6	0.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,173)	1:9:A:ILE:HG12	1:9:A:ILE:HG22	6	0.4
(2,173)	1:9:A:ILE:HG12	1:9:A:ILE:HG23	6	0.4
(2,173)	1:9:A:ILE:HG12	1:9:A:ILE:HG21	10	0.4
(2,173)	1:9:A:ILE:HG12	1:9:A:ILE:HG22	10	0.4
(2,173)	1:9:A:ILE:HG12	1:9:A:ILE:HG23	10	0.4
(2,125)	1:6:A:ARG:HD2	1:6:A:ARG:HG2	3	0.4
(2,105)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:H	5	0.4
(2,91)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG2	8	0.4
(2,91)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG3	8	0.4
(2,89)	1:25:A:SER:HA	1:25:A:SER:HB2	5	0.4
(2,89)	1:25:A:SER:HA	1:25:A:SER:HB3	5	0.4
(2,79)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HG2	1	0.4
(2,79)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HG2	5	0.4
(2,67)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HG3	1	0.4
(2,67)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HG3	2	0.4
(2,67)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HG3	3	0.4
(2,67)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HG3	5	0.4
(2,67)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HG3	8	0.4
(2,52)	1:22:A:PRO:HD3	1:22:A:PRO:HG2	4	0.4
(2,52)	1:22:A:PRO:HD3	1:22:A:PRO:HG3	4	0.4
(2,32)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD2	1	0.4
(2,32)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD3	1	0.4
(2,31)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HG3	8	0.4
(2,29)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HB3	3	0.4
(1,468)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	10	0.4
(1,468)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	10	0.4
(1,468)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	10	0.4
(1,464)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:HA2	2	0.4
(1,464)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:HA2	2	0.4
(1,464)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:HA2	2	0.4
(1,464)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:HA2	8	0.4
(1,464)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:HA2	8	0.4
(1,464)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:HA2	8	0.4
(1,434)	1:11:A:TRP:HZ3	1:17:A:PRO:HD2	6	0.4
(1,415)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HB2	2	0.4
(1,415)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HB2	2	0.4
(1,415)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HB2	2	0.4
(1,410)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD11	3	0.4
(1,410)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD12	3	0.4
(1,410)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD13	3	0.4
(1,326)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:H	5	0.4
(1,326)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:H	5	0.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,321)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB2	2	0.4
(1,320)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB3	3	0.4
(1,304)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB2	4	0.4
(1,281)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD21	4	0.4
(1,281)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD22	4	0.4
(1,281)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD23	4	0.4
(1,281)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD21	4	0.4
(1,281)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD22	4	0.4
(1,281)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD23	4	0.4
(4,44)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:H	8	0.39
(4,42)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD21	9	0.39
(4,42)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD22	9	0.39
(4,42)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD23	9	0.39
(4,41)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	9	0.39
(4,41)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	9	0.39
(4,41)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	9	0.39
(4,41)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG3	9	0.39
(4,41)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG3	9	0.39
(4,41)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG3	9	0.39
(4,29)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD11	7	0.39
(4,29)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD12	7	0.39
(4,29)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD13	7	0.39
(4,13)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD21	8	0.39
(4,13)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD22	8	0.39
(4,13)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD23	8	0.39
(4,13)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD21	8	0.39
(4,13)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD22	8	0.39
(4,13)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD23	8	0.39
(4,13)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD21	9	0.39
(4,13)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD22	9	0.39
(4,13)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD23	9	0.39
(4,13)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD21	9	0.39
(4,13)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD22	9	0.39
(4,13)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD23	9	0.39
(3,430)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	7	0.39
(3,430)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	7	0.39
(3,430)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	7	0.39
(3,360)	1:21:A:ARG:HB2	1:22:A:PRO:HD3	1	0.39
(3,289)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB2	1	0.39
(2,494)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HD3	7	0.39
(2,486)	1:23:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HD2	4	0.39
(2,425)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD21	6	0.39

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,425)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD22	6	0.39
(2,425)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD23	6	0.39
(2,392)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HD3	1	0.39
(2,390)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD2	3	0.39
(2,390)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	3	0.39
(2,371)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD2	3	0.39
(2,371)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD3	3	0.39
(2,365)	1:9:A:ILE:HB	1:10:A:GLN:H	7	0.39
(2,352)	1:15:A:GLY:HA3	1:16:A:GLY:H	10	0.39
(2,318)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HG3	9	0.39
(2,244)	1:14:A:GLU:HB3	1:14:A:GLU:HG2	2	0.39
(2,244)	1:14:A:GLU:HB3	1:14:A:GLU:HG2	9	0.39
(2,244)	1:14:A:GLU:HB3	1:14:A:GLU:HG2	10	0.39
(2,225)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HE2	1	0.39
(2,225)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HE3	1	0.39
(2,225)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HE2	1	0.39
(2,225)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HE3	1	0.39
(2,225)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HE2	2	0.39
(2,225)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HE3	2	0.39
(2,225)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HE2	2	0.39
(2,225)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HE3	2	0.39
(2,225)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HE2	6	0.39
(2,225)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HE3	6	0.39
(2,225)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HE2	6	0.39
(2,225)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HE3	6	0.39
(2,225)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HE2	7	0.39
(2,225)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HE3	7	0.39
(2,225)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HE2	7	0.39
(2,225)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HE3	7	0.39
(2,189)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HB3	6	0.39
(2,105)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:H	1	0.39
(2,105)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:H	8	0.39
(2,89)	1:25:A:SER:HA	1:25:A:SER:HB2	4	0.39
(2,89)	1:25:A:SER:HA	1:25:A:SER:HB3	4	0.39
(2,89)	1:25:A:SER:HA	1:25:A:SER:HB2	6	0.39
(2,89)	1:25:A:SER:HA	1:25:A:SER:HB3	6	0.39
(2,89)	1:25:A:SER:HA	1:25:A:SER:HB2	10	0.39
(2,89)	1:25:A:SER:HA	1:25:A:SER:HB3	10	0.39
(2,81)	1:24:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HG3	4	0.39
(2,81)	1:24:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HG3	8	0.39
(2,79)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HG2	2	0.39
(2,79)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HG2	10	0.39

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,75)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HD2	6	0.39
(2,68)	1:23:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD3	10	0.39
(2,52)	1:22:A:PRO:HD3	1:22:A:PRO:HG2	3	0.39
(2,52)	1:22:A:PRO:HD3	1:22:A:PRO:HG3	3	0.39
(2,51)	1:22:A:PRO:HD2	1:22:A:PRO:HG2	3	0.39
(2,51)	1:22:A:PRO:HD2	1:22:A:PRO:HG3	3	0.39
(2,34)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HG2	5	0.39
(2,34)	1:21:A:ARG:HD3	1:21:A:ARG:HG2	5	0.39
(2,33)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD2	7	0.39
(2,33)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD3	7	0.39
(2,33)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HD2	7	0.39
(2,33)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HD3	7	0.39
(2,29)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HB3	4	0.39
(1,513)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:H	8	0.39
(1,501)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD21	9	0.39
(1,501)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD22	9	0.39
(1,501)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD23	9	0.39
(1,487)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	9	0.39
(1,487)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	9	0.39
(1,487)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	9	0.39
(1,487)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG3	9	0.39
(1,487)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG3	9	0.39
(1,487)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG3	9	0.39
(1,468)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	7	0.39
(1,468)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	7	0.39
(1,468)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	7	0.39
(1,410)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD11	7	0.39
(1,410)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD12	7	0.39
(1,410)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD13	7	0.39
(1,386)	1:21:A:ARG:HB2	1:22:A:PRO:HD3	1	0.39
(1,304)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB2	1	0.39
(1,281)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD21	8	0.39
(1,281)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD22	8	0.39
(1,281)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD23	8	0.39
(1,281)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD21	8	0.39
(1,281)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD22	8	0.39
(1,281)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD23	8	0.39
(1,281)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD21	9	0.39
(1,281)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD22	9	0.39
(1,281)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD23	9	0.39
(1,281)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD21	9	0.39
(1,281)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD22	9	0.39

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,281)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD23	9	0.39
(4,44)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:H	3	0.38
(4,42)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD21	3	0.38
(4,42)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD22	3	0.38
(4,42)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD23	3	0.38
(4,19)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:H	8	0.38
(4,19)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:H	8	0.38
(4,13)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD21	5	0.38
(4,13)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD22	5	0.38
(4,13)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD23	5	0.38
(4,13)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD21	5	0.38
(4,13)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD22	5	0.38
(4,13)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD23	5	0.38
(3,442)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HD3	3	0.38
(3,430)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	5	0.38
(3,430)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	5	0.38
(3,430)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	5	0.38
(3,430)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	8	0.38
(3,430)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	8	0.38
(3,430)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	8	0.38
(3,417)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HB3	2	0.38
(3,223)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HD2	9	0.38
(3,65)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HG2	7	0.38
(3,65)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HG2	9	0.38
(2,473)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:HE3	9	0.38
(2,473)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:HE3	9	0.38
(2,435)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	10	0.38
(2,355)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:H	9	0.38
(2,352)	1:15:A:GLY:HA3	1:16:A:GLY:H	5	0.38
(2,330)	1:14:A:GLU:H	1:15:A:GLY:H	1	0.38
(2,269)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HD1	9	0.38
(2,269)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HD2	9	0.38
(2,266)	1:19:A:SER:H	1:19:A:SER:HB3	7	0.38
(2,261)	1:18:A:SER:H	1:18:A:SER:HB2	7	0.38
(2,261)	1:18:A:SER:H	1:18:A:SER:HB3	7	0.38
(2,244)	1:14:A:GLU:HB3	1:14:A:GLU:HG2	1	0.38
(2,244)	1:14:A:GLU:HB3	1:14:A:GLU:HG2	5	0.38
(2,231)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HB3	3	0.38
(2,229)	1:13:A:LYS:HG2	1:13:A:LYS:HG3	2	0.38
(2,229)	1:13:A:LYS:HG2	1:13:A:LYS:HG3	3	0.38
(2,229)	1:13:A:LYS:HG2	1:13:A:LYS:HG3	4	0.38
(2,229)	1:13:A:LYS:HG2	1:13:A:LYS:HG3	7	0.38

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,229)	1:13:A:LYS:HG2	1:13:A:LYS:HG3	9	0.38
(2,229)	1:13:A:LYS:HG2	1:13:A:LYS:HG3	10	0.38
(2,204)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HG	10	0.38
(2,89)	1:25:A:SER:HA	1:25:A:SER:HB2	2	0.38
(2,89)	1:25:A:SER:HA	1:25:A:SER:HB3	2	0.38
(2,88)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HB2	10	0.38
(2,88)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HB3	10	0.38
(2,79)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HG2	4	0.38
(2,75)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HD2	3	0.38
(2,67)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HG3	4	0.38
(2,67)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HG3	9	0.38
(2,51)	1:22:A:PRO:HD2	1:22:A:PRO:HG2	1	0.38
(2,51)	1:22:A:PRO:HD2	1:22:A:PRO:HG3	1	0.38
(2,51)	1:22:A:PRO:HD2	1:22:A:PRO:HG2	4	0.38
(2,51)	1:22:A:PRO:HD2	1:22:A:PRO:HG3	4	0.38
(2,51)	1:22:A:PRO:HD2	1:22:A:PRO:HG2	7	0.38
(2,51)	1:22:A:PRO:HD2	1:22:A:PRO:HG3	7	0.38
(2,32)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD2	6	0.38
(2,32)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD3	6	0.38
(2,31)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HG3	6	0.38
(1,513)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:H	3	0.38
(1,501)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD21	3	0.38
(1,501)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD22	3	0.38
(1,501)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD23	3	0.38
(1,482)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HD3	3	0.38
(1,468)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	5	0.38
(1,468)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	5	0.38
(1,468)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	5	0.38
(1,468)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	8	0.38
(1,468)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	8	0.38
(1,468)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	8	0.38
(1,452)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HB3	2	0.38
(1,326)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:H	8	0.38
(1,326)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:H	8	0.38
(1,281)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD21	5	0.38
(1,281)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD22	5	0.38
(1,281)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD23	5	0.38
(1,281)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD21	5	0.38
(1,281)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD22	5	0.38
(1,281)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD23	5	0.38
(1,233)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HD2	9	0.38
(1,65)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HG2	7	0.38

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,65)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HG2	9	0.38
(4,42)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD21	6	0.37
(4,42)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD22	6	0.37
(4,42)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD23	6	0.37
(4,41)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	4	0.37
(4,41)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	4	0.37
(4,41)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	4	0.37
(4,41)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG3	4	0.37
(4,41)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG3	4	0.37
(4,41)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG3	4	0.37
(4,37)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:HA2	5	0.37
(4,37)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:HA2	5	0.37
(4,37)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:HA2	5	0.37
(4,30)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HB2	10	0.37
(4,30)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HB2	10	0.37
(4,30)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HB2	10	0.37
(4,22)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:H	10	0.37
(4,22)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:H	10	0.37
(4,22)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:H	10	0.37
(4,19)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:H	2	0.37
(4,19)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:H	2	0.37
(4,19)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:H	4	0.37
(4,19)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:H	4	0.37
(3,453)	1:19:A:SER:HB3	1:20:A:GLY:H	6	0.37
(3,430)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	9	0.37
(3,430)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	9	0.37
(3,430)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	9	0.37
(3,360)	1:21:A:ARG:HB2	1:22:A:PRO:HD3	2	0.37
(3,323)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:H	7	0.37
(3,175)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG12	3	0.37
(3,65)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HG2	1	0.37
(3,65)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HG2	2	0.37
(3,65)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HG2	3	0.37
(3,65)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HG2	4	0.37
(3,65)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HG2	5	0.37
(3,65)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HG2	8	0.37
(2,371)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD2	8	0.37
(2,371)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD3	8	0.37
(2,356)	1:7:A:LEU:HB2	1:8:A:TYR:H	3	0.37
(2,260)	1:18:A:SER:HA	1:18:A:SER:HB2	6	0.37
(2,260)	1:18:A:SER:HA	1:18:A:SER:HB3	6	0.37
(2,229)	1:13:A:LYS:HG2	1:13:A:LYS:HG3	1	0.37

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,229)	1:13:A:LYS:HG2	1:13:A:LYS:HG3	5	0.37
(2,229)	1:13:A:LYS:HG2	1:13:A:LYS:HG3	8	0.37
(2,210)	1:12:A:LEU:HD11	1:12:A:LEU:HG	1	0.37
(2,210)	1:12:A:LEU:HD12	1:12:A:LEU:HG	1	0.37
(2,210)	1:12:A:LEU:HD13	1:12:A:LEU:HG	1	0.37
(2,124)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HD3	9	0.37
(2,123)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HD2	7	0.37
(2,120)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG3	8	0.37
(2,94)	1:3:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HG2	5	0.37
(2,94)	1:3:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HG3	5	0.37
(2,91)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG2	1	0.37
(2,91)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG3	1	0.37
(2,79)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HG2	8	0.37
(2,67)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HG3	7	0.37
(2,51)	1:22:A:PRO:HD2	1:22:A:PRO:HG2	2	0.37
(2,51)	1:22:A:PRO:HD2	1:22:A:PRO:HG3	2	0.37
(2,51)	1:22:A:PRO:HD2	1:22:A:PRO:HG2	6	0.37
(2,51)	1:22:A:PRO:HD2	1:22:A:PRO:HG3	6	0.37
(2,51)	1:22:A:PRO:HD2	1:22:A:PRO:HG2	8	0.37
(2,51)	1:22:A:PRO:HD2	1:22:A:PRO:HG3	8	0.37
(2,51)	1:22:A:PRO:HD2	1:22:A:PRO:HG2	9	0.37
(2,51)	1:22:A:PRO:HD2	1:22:A:PRO:HG3	9	0.37
(2,9)	1:16:A:GLY:H	1:16:A:GLY:HA2	10	0.37
(1,501)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD21	6	0.37
(1,501)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD22	6	0.37
(1,501)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD23	6	0.37
(1,494)	1:19:A:SER:HB3	1:20:A:GLY:H	6	0.37
(1,487)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	4	0.37
(1,487)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	4	0.37
(1,487)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	4	0.37
(1,487)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG3	4	0.37
(1,487)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG3	4	0.37
(1,487)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG3	4	0.37
(1,468)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	9	0.37
(1,468)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	9	0.37
(1,468)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	9	0.37
(1,464)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:HA2	5	0.37
(1,464)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:HA2	5	0.37
(1,464)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:HA2	5	0.37
(1,417)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HB2	10	0.37
(1,417)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HB2	10	0.37
(1,417)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HB2	10	0.37

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,386)	1:21:A:ARG:HB2	1:22:A:PRO:HD3	2	0.37
(1,366)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:H	10	0.37
(1,366)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:H	10	0.37
(1,366)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:H	10	0.37
(1,342)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:H	7	0.37
(1,326)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:H	2	0.37
(1,326)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:H	2	0.37
(1,326)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:H	4	0.37
(1,326)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:H	4	0.37
(1,181)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG12	3	0.37
(1,65)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HG2	1	0.37
(1,65)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HG2	2	0.37
(1,65)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HG2	3	0.37
(1,65)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HG2	4	0.37
(1,65)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HG2	5	0.37
(1,65)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HG2	8	0.37
(4,41)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	1	0.36
(4,41)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	1	0.36
(4,41)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	1	0.36
(4,41)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG3	1	0.36
(4,41)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG3	1	0.36
(4,41)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG3	1	0.36
(4,22)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:H	4	0.36
(4,22)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:H	4	0.36
(4,22)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:H	4	0.36
(4,13)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD21	1	0.36
(4,13)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD22	1	0.36
(4,13)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD23	1	0.36
(4,13)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD21	1	0.36
(4,13)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD22	1	0.36
(4,13)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD23	1	0.36
(4,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	1	0.36
(4,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	1	0.36
(4,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	1	0.36
(4,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	2	0.36
(4,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	2	0.36
(4,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	2	0.36
(4,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	3	0.36
(4,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	3	0.36
(4,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	3	0.36
(4,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	4	0.36
(4,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	4	0.36

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	4	0.36
(4,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	5	0.36
(4,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	5	0.36
(4,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	5	0.36
(4,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	6	0.36
(4,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	6	0.36
(4,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	6	0.36
(4,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	8	0.36
(4,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	8	0.36
(4,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	8	0.36
(3,175)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG12	7	0.36
(3,65)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HG2	6	0.36
(3,65)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HG2	10	0.36
(2,447)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HG13	7	0.36
(2,447)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HG13	7	0.36
(2,408)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HD3	8	0.36
(2,408)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HD3	8	0.36
(2,408)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HD3	8	0.36
(2,355)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:H	6	0.36
(2,352)	1:15:A:GLY:HA3	1:16:A:GLY:H	8	0.36
(2,352)	1:15:A:GLY:HA3	1:16:A:GLY:H	9	0.36
(2,335)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HG2	5	0.36
(2,335)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HG3	5	0.36
(2,330)	1:14:A:GLU:H	1:15:A:GLY:H	3	0.36
(2,260)	1:18:A:SER:HA	1:18:A:SER:HB2	4	0.36
(2,260)	1:18:A:SER:HA	1:18:A:SER:HB3	4	0.36
(2,260)	1:18:A:SER:HA	1:18:A:SER:HB2	7	0.36
(2,260)	1:18:A:SER:HA	1:18:A:SER:HB3	7	0.36
(2,254)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG2	1	0.36
(2,254)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG3	1	0.36
(2,254)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG2	3	0.36
(2,254)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG3	3	0.36
(2,254)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG2	5	0.36
(2,254)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG3	5	0.36
(2,254)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG2	6	0.36
(2,254)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG3	6	0.36
(2,254)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG2	8	0.36
(2,254)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG3	8	0.36
(2,254)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG2	9	0.36
(2,254)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG3	9	0.36
(2,245)	1:14:A:GLU:H	1:14:A:GLU:HG2	3	0.36
(2,244)	1:14:A:GLU:HB3	1:14:A:GLU:HG2	3	0.36

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,244)	1:14:A:GLU:HB3	1:14:A:GLU:HG2	8	0.36
(2,231)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HB3	4	0.36
(2,231)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HB3	5	0.36
(2,231)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HB3	8	0.36
(2,229)	1:13:A:LYS:HG2	1:13:A:LYS:HG3	6	0.36
(2,135)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HB3	3	0.36
(2,105)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:H	4	0.36
(2,89)	1:25:A:SER:HA	1:25:A:SER:HB2	3	0.36
(2,89)	1:25:A:SER:HA	1:25:A:SER:HB3	3	0.36
(2,83)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HG2	5	0.36
(2,79)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HG2	3	0.36
(2,79)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HG2	6	0.36
(2,76)	1:24:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	4	0.36
(2,76)	1:24:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	8	0.36
(2,52)	1:22:A:PRO:HD3	1:22:A:PRO:HG2	2	0.36
(2,52)	1:22:A:PRO:HD3	1:22:A:PRO:HG3	2	0.36
(2,51)	1:22:A:PRO:HD2	1:22:A:PRO:HG2	5	0.36
(2,51)	1:22:A:PRO:HD2	1:22:A:PRO:HG3	5	0.36
(2,51)	1:22:A:PRO:HD2	1:22:A:PRO:HG2	10	0.36
(2,51)	1:22:A:PRO:HD2	1:22:A:PRO:HG3	10	0.36
(2,33)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD2	3	0.36
(2,33)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD3	3	0.36
(2,33)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HD2	3	0.36
(2,33)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HD3	3	0.36
(2,32)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD2	2	0.36
(2,32)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD3	2	0.36
(2,32)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD2	8	0.36
(2,32)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD3	8	0.36
(1,487)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	1	0.36
(1,487)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	1	0.36
(1,487)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	1	0.36
(1,487)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG3	1	0.36
(1,487)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG3	1	0.36
(1,487)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG3	1	0.36
(1,366)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:H	4	0.36
(1,366)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:H	4	0.36
(1,366)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:H	4	0.36
(1,281)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD21	1	0.36
(1,281)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD22	1	0.36
(1,281)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD23	1	0.36
(1,281)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD21	1	0.36
(1,281)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD22	1	0.36

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,281)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD23	1	0.36
(1,181)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG12	7	0.36
(1,107)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	1	0.36
(1,107)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	1	0.36
(1,107)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	1	0.36
(1,107)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	2	0.36
(1,107)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	2	0.36
(1,107)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	2	0.36
(1,107)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	3	0.36
(1,107)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	3	0.36
(1,107)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	3	0.36
(1,107)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	4	0.36
(1,107)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	4	0.36
(1,107)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	4	0.36
(1,107)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	5	0.36
(1,107)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	5	0.36
(1,107)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	5	0.36
(1,107)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	6	0.36
(1,107)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	6	0.36
(1,107)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	6	0.36
(1,107)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	8	0.36
(1,107)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	8	0.36
(1,107)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	8	0.36
(1,65)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HG2	6	0.36
(1,65)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HG2	10	0.36
(4,42)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD21	7	0.35
(4,42)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD22	7	0.35
(4,42)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD23	7	0.35
(4,22)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:H	1	0.35
(4,22)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:H	1	0.35
(4,22)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:H	1	0.35
(4,22)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:H	7	0.35
(4,22)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:H	7	0.35
(4,22)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:H	7	0.35
(4,19)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:H	9	0.35
(4,19)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:H	9	0.35
(4,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	7	0.35
(4,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	7	0.35
(4,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	7	0.35
(4,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	9	0.35
(4,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	9	0.35
(4,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	9	0.35

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	10	0.35
(4,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	10	0.35
(4,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	10	0.35
(3,430)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	1	0.35
(3,430)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	1	0.35
(3,430)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	1	0.35
(3,430)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	4	0.35
(3,430)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	4	0.35
(3,430)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	4	0.35
(3,417)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HB3	5	0.35
(3,364)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	8	0.35
(3,175)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG12	4	0.35
(3,175)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG12	5	0.35
(3,175)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG12	9	0.35
(2,505)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HE3	6	0.35
(2,505)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HE3	6	0.35
(2,371)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD2	1	0.35
(2,371)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD3	1	0.35
(2,356)	1:7:A:LEU:HB2	1:8:A:TYR:H	1	0.35
(2,356)	1:7:A:LEU:HB2	1:8:A:TYR:H	5	0.35
(2,254)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG2	2	0.35
(2,254)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG3	2	0.35
(2,254)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG2	4	0.35
(2,254)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG3	4	0.35
(2,254)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG2	7	0.35
(2,254)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG3	7	0.35
(2,254)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG2	10	0.35
(2,254)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG3	10	0.35
(2,244)	1:14:A:GLU:HB3	1:14:A:GLU:HG2	4	0.35
(2,231)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HB3	2	0.35
(2,210)	1:12:A:LEU:HD11	1:12:A:LEU:HG	6	0.35
(2,210)	1:12:A:LEU:HD12	1:12:A:LEU:HG	6	0.35
(2,210)	1:12:A:LEU:HD13	1:12:A:LEU:HG	6	0.35
(2,210)	1:12:A:LEU:HD11	1:12:A:LEU:HG	7	0.35
(2,210)	1:12:A:LEU:HD12	1:12:A:LEU:HG	7	0.35
(2,210)	1:12:A:LEU:HD13	1:12:A:LEU:HG	7	0.35
(2,142)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HB3	6	0.35
(2,117)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HB2	7	0.35
(2,94)	1:3:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HG2	1	0.35
(2,94)	1:3:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HG3	1	0.35
(2,89)	1:25:A:SER:HA	1:25:A:SER:HB2	1	0.35
(2,89)	1:25:A:SER:HA	1:25:A:SER:HB3	1	0.35

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,89)	1:25:A:SER:HA	1:25:A:SER:HB2	9	0.35
(2,89)	1:25:A:SER:HA	1:25:A:SER:HB3	9	0.35
(2,76)	1:24:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	10	0.35
(2,52)	1:22:A:PRO:HD3	1:22:A:PRO:HG2	7	0.35
(2,52)	1:22:A:PRO:HD3	1:22:A:PRO:HG3	7	0.35
(2,52)	1:22:A:PRO:HD3	1:22:A:PRO:HG2	8	0.35
(2,52)	1:22:A:PRO:HD3	1:22:A:PRO:HG3	8	0.35
(2,52)	1:22:A:PRO:HD3	1:22:A:PRO:HG2	9	0.35
(2,52)	1:22:A:PRO:HD3	1:22:A:PRO:HG3	9	0.35
(2,44)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD3	9	0.35
(1,501)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD21	7	0.35
(1,501)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD22	7	0.35
(1,501)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD23	7	0.35
(1,468)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	1	0.35
(1,468)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	1	0.35
(1,468)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	1	0.35
(1,468)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	4	0.35
(1,468)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	4	0.35
(1,468)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	4	0.35
(1,452)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HB3	5	0.35
(1,390)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	8	0.35
(1,366)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:H	1	0.35
(1,366)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:H	1	0.35
(1,366)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:H	1	0.35
(1,366)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:H	7	0.35
(1,366)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:H	7	0.35
(1,366)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:H	7	0.35
(1,326)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:H	9	0.35
(1,326)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:H	9	0.35
(1,181)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG12	4	0.35
(1,181)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG12	5	0.35
(1,181)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG12	9	0.35
(1,107)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	7	0.35
(1,107)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	7	0.35
(1,107)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	7	0.35
(1,107)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	9	0.35
(1,107)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	9	0.35
(1,107)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	9	0.35
(1,107)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	10	0.35
(1,107)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	10	0.35
(1,107)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	10	0.35
(4,44)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:H	5	0.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,37)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:HA2	1	0.34
(4,37)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:HA2	1	0.34
(4,37)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:HA2	1	0.34
(4,37)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:HA2	9	0.34
(4,37)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:HA2	9	0.34
(4,37)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:HA2	9	0.34
(4,30)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HB2	1	0.34
(4,30)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HB2	1	0.34
(4,30)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HB2	1	0.34
(4,22)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:H	8	0.34
(4,22)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:H	8	0.34
(4,22)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:H	8	0.34
(4,12)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HG	6	0.34
(4,12)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HG	6	0.34
(4,5)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	2	0.34
(4,5)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	2	0.34
(4,5)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	4	0.34
(4,5)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	4	0.34
(4,5)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	5	0.34
(4,5)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	5	0.34
(3,430)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	2	0.34
(3,430)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	2	0.34
(3,430)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	2	0.34
(3,402)	1:11:A:TRP:HZ3	1:17:A:PRO:HD2	10	0.34
(3,175)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG12	1	0.34
(3,175)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG12	2	0.34
(3,175)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG12	6	0.34
(3,175)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG12	8	0.34
(3,175)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG12	10	0.34
(2,435)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	3	0.34
(2,416)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD21	7	0.34
(2,416)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD22	7	0.34
(2,416)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD23	7	0.34
(2,416)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD21	7	0.34
(2,416)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD22	7	0.34
(2,416)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD23	7	0.34
(2,412)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HE2	6	0.34
(2,412)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HE2	6	0.34
(2,412)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HE2	6	0.34
(2,412)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HE3	6	0.34
(2,412)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HE3	6	0.34
(2,412)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HE3	6	0.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,410)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD11	1	0.34
(2,410)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD12	1	0.34
(2,410)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD13	1	0.34
(2,406)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	1	0.34
(2,406)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	1	0.34
(2,406)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	1	0.34
(2,405)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD11	2	0.34
(2,405)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD12	2	0.34
(2,405)	1:4:A:ALA:HA	1:7:A:LEU:HD13	2	0.34
(2,401)	1:2:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	7	0.34
(2,401)	1:2:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	7	0.34
(2,401)	1:2:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	7	0.34
(2,371)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD2	2	0.34
(2,371)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD3	2	0.34
(2,365)	1:9:A:ILE:HB	1:10:A:GLN:H	9	0.34
(2,356)	1:7:A:LEU:HB2	1:8:A:TYR:H	4	0.34
(2,356)	1:7:A:LEU:HB2	1:8:A:TYR:H	10	0.34
(2,336)	1:1:A:GLU:HB2	1:1:A:GLU:HG2	5	0.34
(2,336)	1:1:A:GLU:HB2	1:1:A:GLU:HG3	5	0.34
(2,336)	1:1:A:GLU:HB3	1:1:A:GLU:HG2	5	0.34
(2,336)	1:1:A:GLU:HB3	1:1:A:GLU:HG3	5	0.34
(2,336)	1:1:A:GLU:HB2	1:1:A:GLU:HG2	7	0.34
(2,336)	1:1:A:GLU:HB2	1:1:A:GLU:HG3	7	0.34
(2,336)	1:1:A:GLU:HB3	1:1:A:GLU:HG2	7	0.34
(2,336)	1:1:A:GLU:HB3	1:1:A:GLU:HG3	7	0.34
(2,316)	1:10:A:GLN:HE21	1:14:A:GLU:HG2	4	0.34
(2,293)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB3	4	0.34
(2,274)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG2	9	0.34
(2,274)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG2	9	0.34
(2,259)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HB3	1	0.34
(2,259)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HB3	2	0.34
(2,259)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HB3	3	0.34
(2,259)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HB3	4	0.34
(2,259)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HB3	5	0.34
(2,259)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HB3	6	0.34
(2,259)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HB3	7	0.34
(2,259)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HB3	9	0.34
(2,259)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HB3	10	0.34
(2,231)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HB3	7	0.34
(2,231)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HB3	9	0.34
(2,231)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HB3	10	0.34
(2,210)	1:12:A:LEU:HD11	1:12:A:LEU:HG	3	0.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,210)	1:12:A:LEU:HD12	1:12:A:LEU:HG	3	0.34
(2,210)	1:12:A:LEU:HD13	1:12:A:LEU:HG	3	0.34
(2,210)	1:12:A:LEU:HD11	1:12:A:LEU:HG	10	0.34
(2,210)	1:12:A:LEU:HD12	1:12:A:LEU:HG	10	0.34
(2,210)	1:12:A:LEU:HD13	1:12:A:LEU:HG	10	0.34
(2,204)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HG	3	0.34
(2,164)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:H	5	0.34
(2,164)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:H	8	0.34
(2,119)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG2	1	0.34
(2,105)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:H	3	0.34
(2,105)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:H	6	0.34
(2,105)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:H	9	0.34
(2,94)	1:3:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HG2	8	0.34
(2,94)	1:3:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HG3	8	0.34
(2,83)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HG2	2	0.34
(2,52)	1:22:A:PRO:HD3	1:22:A:PRO:HG2	1	0.34
(2,52)	1:22:A:PRO:HD3	1:22:A:PRO:HG3	1	0.34
(2,52)	1:22:A:PRO:HD3	1:22:A:PRO:HG2	5	0.34
(2,52)	1:22:A:PRO:HD3	1:22:A:PRO:HG3	5	0.34
(2,52)	1:22:A:PRO:HD3	1:22:A:PRO:HG2	6	0.34
(2,52)	1:22:A:PRO:HD3	1:22:A:PRO:HG3	6	0.34
(2,52)	1:22:A:PRO:HD3	1:22:A:PRO:HG2	10	0.34
(2,52)	1:22:A:PRO:HD3	1:22:A:PRO:HG3	10	0.34
(2,14)	1:20:A:GLY:H	1:20:A:GLY:HA3	5	0.34
(2,9)	1:16:A:GLY:H	1:16:A:GLY:HA2	2	0.34
(2,9)	1:16:A:GLY:H	1:16:A:GLY:HA2	5	0.34
(2,9)	1:16:A:GLY:H	1:16:A:GLY:HA2	9	0.34
(1,513)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:H	5	0.34
(1,468)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	2	0.34
(1,468)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	2	0.34
(1,468)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	2	0.34
(1,464)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:HA2	1	0.34
(1,464)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:HA2	1	0.34
(1,464)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:HA2	1	0.34
(1,464)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:HA2	9	0.34
(1,464)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:HA2	9	0.34
(1,464)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:HA2	9	0.34
(1,434)	1:11:A:TRP:HZ3	1:17:A:PRO:HD2	10	0.34
(1,417)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HB2	1	0.34
(1,417)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HB2	1	0.34
(1,417)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HB2	1	0.34
(1,366)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:H	8	0.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,366)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:H	8	0.34
(1,366)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:H	8	0.34
(1,277)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HG	6	0.34
(1,277)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HG	6	0.34
(1,181)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG12	1	0.34
(1,181)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG12	2	0.34
(1,181)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG12	6	0.34
(1,181)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG12	8	0.34
(1,181)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG12	10	0.34
(1,160)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	2	0.34
(1,160)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	2	0.34
(1,160)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	4	0.34
(1,160)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	4	0.34
(1,160)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	5	0.34
(1,160)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	5	0.34
(4,41)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	10	0.33
(4,41)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	10	0.33
(4,41)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	10	0.33
(4,41)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG3	10	0.33
(4,41)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG3	10	0.33
(4,41)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG3	10	0.33
(4,22)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:H	6	0.33
(4,22)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:H	6	0.33
(4,22)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:H	6	0.33
(4,19)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:H	1	0.33
(4,19)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:H	1	0.33
(4,19)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:H	3	0.33
(4,19)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:H	3	0.33
(4,5)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	6	0.33
(4,5)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	6	0.33
(4,5)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	8	0.33
(4,5)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	8	0.33
(3,430)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	6	0.33
(3,430)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	6	0.33
(3,430)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	6	0.33
(3,402)	1:11:A:TRP:HZ3	1:17:A:PRO:HD2	8	0.33
(2,495)	1:3:A:GLU:HA	1:6:A:ARG:HB3	7	0.33
(2,437)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG12	3	0.33
(2,437)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG12	3	0.33
(2,422)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HG2	3	0.33
(2,422)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HG2	3	0.33
(2,422)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HG2	3	0.33

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,406)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	10	0.33
(2,406)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	10	0.33
(2,406)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	10	0.33
(2,365)	1:9:A:ILE:HB	1:10:A:GLN:H	1	0.33
(2,365)	1:9:A:ILE:HB	1:10:A:GLN:H	2	0.33
(2,355)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:H	3	0.33
(2,259)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HB3	8	0.33
(2,231)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HB3	1	0.33
(2,215)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HG	10	0.33
(2,210)	1:12:A:LEU:HD11	1:12:A:LEU:HG	2	0.33
(2,210)	1:12:A:LEU:HD12	1:12:A:LEU:HG	2	0.33
(2,210)	1:12:A:LEU:HD13	1:12:A:LEU:HG	2	0.33
(2,210)	1:12:A:LEU:HD11	1:12:A:LEU:HG	4	0.33
(2,210)	1:12:A:LEU:HD12	1:12:A:LEU:HG	4	0.33
(2,210)	1:12:A:LEU:HD13	1:12:A:LEU:HG	4	0.33
(2,210)	1:12:A:LEU:HD11	1:12:A:LEU:HG	5	0.33
(2,210)	1:12:A:LEU:HD12	1:12:A:LEU:HG	5	0.33
(2,210)	1:12:A:LEU:HD13	1:12:A:LEU:HG	5	0.33
(2,210)	1:12:A:LEU:HD11	1:12:A:LEU:HG	8	0.33
(2,210)	1:12:A:LEU:HD12	1:12:A:LEU:HG	8	0.33
(2,210)	1:12:A:LEU:HD13	1:12:A:LEU:HG	8	0.33
(2,210)	1:12:A:LEU:HD11	1:12:A:LEU:HG	9	0.33
(2,210)	1:12:A:LEU:HD12	1:12:A:LEU:HG	9	0.33
(2,210)	1:12:A:LEU:HD13	1:12:A:LEU:HG	9	0.33
(2,162)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HB2	7	0.33
(2,162)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HB2	10	0.33
(2,142)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HB3	9	0.33
(2,127)	1:6:A:ARG:HD3	1:6:A:ARG:HG3	5	0.33
(2,117)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HB2	3	0.33
(2,90)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:H	1	0.33
(2,83)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HG2	4	0.33
(2,61)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	7	0.33
(2,61)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD3	7	0.33
(2,33)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD2	4	0.33
(2,33)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD3	4	0.33
(2,33)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HD2	4	0.33
(2,33)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HD3	4	0.33
(2,33)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD2	5	0.33
(2,33)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD3	5	0.33
(2,33)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HD2	5	0.33
(2,33)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HD3	5	0.33
(2,32)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD2	7	0.33

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,32)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD3	7	0.33
(2,9)	1:16:A:GLY:H	1:16:A:GLY:HA2	4	0.33
(2,9)	1:16:A:GLY:H	1:16:A:GLY:HA2	8	0.33
(1,487)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	10	0.33
(1,487)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	10	0.33
(1,487)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	10	0.33
(1,487)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG3	10	0.33
(1,487)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG3	10	0.33
(1,487)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG3	10	0.33
(1,468)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	6	0.33
(1,468)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	6	0.33
(1,468)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	6	0.33
(1,434)	1:11:A:TRP:HZ3	1:17:A:PRO:HD2	8	0.33
(1,366)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:H	6	0.33
(1,366)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:H	6	0.33
(1,366)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:H	6	0.33
(1,326)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:H	1	0.33
(1,326)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:H	1	0.33
(1,326)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:H	3	0.33
(1,326)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:H	3	0.33
(1,160)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	6	0.33
(1,160)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	6	0.33
(1,160)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	8	0.33
(1,160)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	8	0.33
(4,41)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	2	0.32
(4,41)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	2	0.32
(4,41)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	2	0.32
(4,41)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG3	2	0.32
(4,41)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG3	2	0.32
(4,41)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG3	2	0.32
(4,41)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	7	0.32
(4,41)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	7	0.32
(4,41)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	7	0.32
(4,41)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG3	7	0.32
(4,41)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG3	7	0.32
(4,41)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG3	7	0.32
(4,40)	1:1:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:H	10	0.32
(4,40)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:H	10	0.32
(4,22)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:H	2	0.32
(4,22)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:H	2	0.32
(4,22)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:H	2	0.32
(4,22)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:H	5	0.32

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,22)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:H	5	0.32
(4,22)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:H	5	0.32
(4,22)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:H	9	0.32
(4,22)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:H	9	0.32
(4,22)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:H	9	0.32
(4,19)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:H	10	0.32
(4,19)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:H	10	0.32
(4,16)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB2	7	0.32
(4,16)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB2	8	0.32
(4,16)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB2	9	0.32
(2,496)	1:3:A:GLU:HA	1:6:A:ARG:HB2	2	0.32
(2,456)	1:12:A:LEU:HA	1:16:A:GLY:HA2	7	0.32
(2,447)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HG13	9	0.32
(2,447)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HG13	9	0.32
(2,435)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	5	0.32
(2,430)	1:20:A:GLY:H	1:21:A:ARG:H	10	0.32
(2,410)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD11	6	0.32
(2,410)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD12	6	0.32
(2,410)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD13	6	0.32
(2,406)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	2	0.32
(2,406)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	2	0.32
(2,406)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	2	0.32
(2,406)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	4	0.32
(2,406)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	4	0.32
(2,406)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	4	0.32
(2,371)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD2	4	0.32
(2,371)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD3	4	0.32
(2,365)	1:9:A:ILE:HB	1:10:A:GLN:H	4	0.32
(2,365)	1:9:A:ILE:HB	1:10:A:GLN:H	8	0.32
(2,356)	1:7:A:LEU:HB2	1:8:A:TYR:H	2	0.32
(2,330)	1:14:A:GLU:H	1:15:A:GLY:H	7	0.32
(2,329)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:H	7	0.32
(2,329)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:H	7	0.32
(2,314)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD11	2	0.32
(2,314)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD12	2	0.32
(2,314)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD13	2	0.32
(2,266)	1:19:A:SER:H	1:19:A:SER:HB3	6	0.32
(2,264)	1:19:A:SER:HB2	1:19:A:SER:HB3	9	0.32
(2,245)	1:14:A:GLU:H	1:14:A:GLU:HG2	4	0.32
(2,240)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HB2	2	0.32
(2,225)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HE2	4	0.32
(2,225)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HE3	4	0.32

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,225)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HE2	4	0.32
(2,225)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HE3	4	0.32
(2,225)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HE2	10	0.32
(2,225)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HE3	10	0.32
(2,225)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HE2	10	0.32
(2,225)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HE3	10	0.32
(2,221)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HG2	9	0.32
(2,199)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HB3	1	0.32
(2,199)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HB3	2	0.32
(2,199)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HB3	4	0.32
(2,199)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HB3	6	0.32
(2,199)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HB3	8	0.32
(2,199)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HB3	9	0.32
(2,162)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HB2	1	0.32
(2,162)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HB2	6	0.32
(2,142)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HB3	7	0.32
(2,128)	1:6:A:ARG:HD3	1:6:A:ARG:HG2	1	0.32
(2,105)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:H	2	0.32
(2,83)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HG2	8	0.32
(2,71)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HB3	5	0.32
(2,61)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	9	0.32
(2,61)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD3	9	0.32
(2,43)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD2	9	0.32
(2,28)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HB2	4	0.32
(2,14)	1:20:A:GLY:H	1:20:A:GLY:HA3	9	0.32
(2,11)	1:19:A:SER:H	1:19:A:SER:HA	4	0.32
(2,9)	1:16:A:GLY:H	1:16:A:GLY:HA2	6	0.32
(1,487)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	2	0.32
(1,487)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	2	0.32
(1,487)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	2	0.32
(1,487)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG3	2	0.32
(1,487)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG3	2	0.32
(1,487)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG3	2	0.32
(1,487)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	7	0.32
(1,487)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	7	0.32
(1,487)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	7	0.32
(1,487)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG3	7	0.32
(1,487)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG3	7	0.32
(1,487)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG3	7	0.32
(1,470)	1:1:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:H	10	0.32
(1,470)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:H	10	0.32
(1,366)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:H	2	0.32

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,366)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:H	2	0.32
(1,366)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:H	2	0.32
(1,366)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:H	5	0.32
(1,366)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:H	5	0.32
(1,366)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:H	5	0.32
(1,366)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:H	9	0.32
(1,366)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:H	9	0.32
(1,366)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:H	9	0.32
(1,326)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:H	10	0.32
(1,326)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:H	10	0.32
(1,321)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB2	7	0.32
(1,321)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB2	8	0.32
(1,321)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB2	9	0.32
(4,44)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:H	4	0.31
(4,16)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB2	5	0.31
(4,10)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD21	1	0.31
(4,10)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD22	1	0.31
(4,10)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD23	1	0.31
(4,5)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	9	0.31
(4,5)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	9	0.31
(3,364)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	6	0.31
(3,329)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:H	1	0.31
(3,289)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB2	7	0.31
(3,264)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB3	1	0.31
(3,264)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB3	1	0.31
(3,264)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB3	10	0.31
(3,264)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB3	10	0.31
(2,425)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD21	1	0.31
(2,425)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD22	1	0.31
(2,425)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD23	1	0.31
(2,425)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD21	2	0.31
(2,425)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD22	2	0.31
(2,425)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD23	2	0.31
(2,425)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD21	5	0.31
(2,425)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD22	5	0.31
(2,425)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD23	5	0.31
(2,425)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD21	8	0.31
(2,425)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD22	8	0.31
(2,425)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD23	8	0.31
(2,425)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD21	9	0.31
(2,425)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD22	9	0.31
(2,425)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD23	9	0.31

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,422)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HG2	5	0.31
(2,422)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HG2	5	0.31
(2,422)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HG2	5	0.31
(2,401)	1:2:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	2	0.31
(2,401)	1:2:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	2	0.31
(2,401)	1:2:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	2	0.31
(2,390)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD2	1	0.31
(2,390)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	1	0.31
(2,387)	1:21:A:ARG:HB2	1:22:A:PRO:HD2	6	0.31
(2,371)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD2	9	0.31
(2,371)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD3	9	0.31
(2,369)	1:23:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	10	0.31
(2,365)	1:9:A:ILE:HB	1:10:A:GLN:H	6	0.31
(2,264)	1:19:A:SER:HB2	1:19:A:SER:HB3	2	0.31
(2,264)	1:19:A:SER:HB2	1:19:A:SER:HB3	3	0.31
(2,264)	1:19:A:SER:HB2	1:19:A:SER:HB3	4	0.31
(2,264)	1:19:A:SER:HB2	1:19:A:SER:HB3	5	0.31
(2,264)	1:19:A:SER:HB2	1:19:A:SER:HB3	6	0.31
(2,264)	1:19:A:SER:HB2	1:19:A:SER:HB3	8	0.31
(2,264)	1:19:A:SER:HB2	1:19:A:SER:HB3	10	0.31
(2,225)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HE2	3	0.31
(2,225)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HE3	3	0.31
(2,225)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HE2	3	0.31
(2,225)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HE3	3	0.31
(2,225)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HE2	5	0.31
(2,225)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HE3	5	0.31
(2,225)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HE2	5	0.31
(2,225)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HE3	5	0.31
(2,225)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HE2	8	0.31
(2,225)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HE3	8	0.31
(2,225)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HE2	8	0.31
(2,225)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HE3	8	0.31
(2,225)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HE2	9	0.31
(2,225)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HE3	9	0.31
(2,225)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HE2	9	0.31
(2,225)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HE3	9	0.31
(2,199)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HB3	3	0.31
(2,199)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HB3	5	0.31
(2,199)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HB3	7	0.31
(2,199)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HB3	10	0.31
(2,162)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HB2	2	0.31
(2,162)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HB2	3	0.31

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,162)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HB2	4	0.31
(2,130)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HG2	3	0.31
(2,122)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HD2	8	0.31
(2,98)	1:3:A:GLU:H	1:3:A:GLU:HB2	1	0.31
(2,71)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HB3	2	0.31
(2,62)	1:23:A:PRO:HD2	1:23:A:PRO:HG2	3	0.31
(2,62)	1:23:A:PRO:HD3	1:23:A:PRO:HG2	3	0.31
(2,62)	1:23:A:PRO:HD2	1:23:A:PRO:HG2	6	0.31
(2,62)	1:23:A:PRO:HD3	1:23:A:PRO:HG2	6	0.31
(2,55)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HB3	1	0.31
(2,55)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HB3	2	0.31
(2,55)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HB3	3	0.31
(2,55)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HB3	4	0.31
(2,55)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HB3	5	0.31
(2,55)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HB3	6	0.31
(2,55)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HB3	7	0.31
(2,55)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HB3	8	0.31
(2,55)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HB3	9	0.31
(2,55)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HB3	10	0.31
(2,44)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD3	2	0.31
(2,44)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD3	8	0.31
(2,43)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD2	8	0.31
(2,11)	1:19:A:SER:H	1:19:A:SER:HA	8	0.31
(1,513)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:H	4	0.31
(1,390)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	6	0.31
(1,348)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:H	1	0.31
(1,321)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB2	5	0.31
(1,304)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB2	7	0.31
(1,275)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB3	1	0.31
(1,275)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB3	1	0.31
(1,275)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB3	10	0.31
(1,275)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB3	10	0.31
(1,206)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD21	1	0.31
(1,206)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD22	1	0.31
(1,206)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD23	1	0.31
(1,160)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	9	0.31
(1,160)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	9	0.31
(4,44)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:H	1	0.3
(4,16)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB2	6	0.3
(4,13)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD21	3	0.3
(4,13)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD22	3	0.3
(4,13)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD23	3	0.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,13)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD21	3	0.3
(4,13)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD22	3	0.3
(4,13)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD23	3	0.3
(4,5)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	7	0.3
(4,5)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	7	0.3
(3,454)	1:19:A:SER:HA	1:20:A:GLY:H	6	0.3
(3,454)	1:19:A:SER:HA	1:20:A:GLY:H	8	0.3
(3,364)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	7	0.3
(3,223)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HD2	8	0.3
(2,460)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HG2	4	0.3
(2,460)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HG3	4	0.3
(2,435)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	2	0.3
(2,425)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD21	4	0.3
(2,425)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD22	4	0.3
(2,425)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD23	4	0.3
(2,371)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD2	7	0.3
(2,371)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD3	7	0.3
(2,369)	1:23:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	1	0.3
(2,369)	1:23:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	7	0.3
(2,365)	1:9:A:ILE:HB	1:10:A:GLN:H	10	0.3
(2,316)	1:10:A:GLN:HE21	1:14:A:GLU:HG2	5	0.3
(2,314)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD11	9	0.3
(2,314)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD12	9	0.3
(2,314)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD13	9	0.3
(2,264)	1:19:A:SER:HB2	1:19:A:SER:HB3	1	0.3
(2,264)	1:19:A:SER:HB2	1:19:A:SER:HB3	7	0.3
(2,240)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HB2	8	0.3
(2,240)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HB2	9	0.3
(2,231)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HB3	6	0.3
(2,164)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:H	1	0.3
(2,164)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:H	2	0.3
(2,162)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HB2	5	0.3
(2,162)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HB2	8	0.3
(2,162)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HB2	9	0.3
(2,128)	1:6:A:ARG:HD3	1:6:A:ARG:HG2	2	0.3
(2,128)	1:6:A:ARG:HD3	1:6:A:ARG:HG2	6	0.3
(2,127)	1:6:A:ARG:HD3	1:6:A:ARG:HG3	2	0.3
(2,93)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HB3	9	0.3
(2,91)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG2	10	0.3
(2,91)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG3	10	0.3
(2,71)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HB3	6	0.3
(2,69)	1:23:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD2	6	0.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,62)	1:23:A:PRO:HD2	1:23:A:PRO:HG2	1	0.3
(2,62)	1:23:A:PRO:HD3	1:23:A:PRO:HG2	1	0.3
(2,62)	1:23:A:PRO:HD2	1:23:A:PRO:HG2	4	0.3
(2,62)	1:23:A:PRO:HD3	1:23:A:PRO:HG2	4	0.3
(2,62)	1:23:A:PRO:HD2	1:23:A:PRO:HG2	8	0.3
(2,62)	1:23:A:PRO:HD3	1:23:A:PRO:HG2	8	0.3
(2,44)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD3	5	0.3
(2,28)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HB2	3	0.3
(2,14)	1:20:A:GLY:H	1:20:A:GLY:HA3	10	0.3
(2,11)	1:19:A:SER:H	1:19:A:SER:HA	6	0.3
(1,513)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:H	1	0.3
(1,495)	1:19:A:SER:HA	1:20:A:GLY:H	6	0.3
(1,495)	1:19:A:SER:HA	1:20:A:GLY:H	8	0.3
(1,390)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	7	0.3
(1,321)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB2	6	0.3
(1,281)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD21	3	0.3
(1,281)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD22	3	0.3
(1,281)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD23	3	0.3
(1,281)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD21	3	0.3
(1,281)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD22	3	0.3
(1,281)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD23	3	0.3
(1,233)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HD2	8	0.3
(1,160)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	7	0.3
(1,160)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	7	0.3
(4,16)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB2	10	0.29
(4,5)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	1	0.29
(4,5)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	1	0.29
(4,5)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	10	0.29
(4,5)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	10	0.29
(3,386)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HB2	3	0.29
(3,386)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HB2	3	0.29
(3,386)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HB2	3	0.29
(3,323)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:H	9	0.29
(3,289)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB2	9	0.29
(2,494)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HD3	9	0.29
(2,460)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HG2	1	0.29
(2,460)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HG3	1	0.29
(2,460)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HG2	5	0.29
(2,460)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HG3	5	0.29
(2,460)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HG2	6	0.29
(2,460)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HG3	6	0.29
(2,460)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HG2	7	0.29

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,460)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HG3	7	0.29
(2,460)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HG2	8	0.29
(2,460)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HG3	8	0.29
(2,460)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HG2	9	0.29
(2,460)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HG3	9	0.29
(2,460)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HG2	10	0.29
(2,460)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HG3	10	0.29
(2,435)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	7	0.29
(2,435)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	9	0.29
(2,422)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HG2	4	0.29
(2,422)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HG2	4	0.29
(2,422)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HG2	4	0.29
(2,401)	1:2:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	4	0.29
(2,401)	1:2:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	4	0.29
(2,401)	1:2:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	4	0.29
(2,390)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD2	7	0.29
(2,390)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	7	0.29
(2,384)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HD3	2	0.29
(2,365)	1:9:A:ILE:HB	1:10:A:GLN:H	5	0.29
(2,333)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HB2	7	0.29
(2,330)	1:14:A:GLU:H	1:15:A:GLY:H	4	0.29
(2,318)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HG3	2	0.29
(2,317)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HG2	6	0.29
(2,317)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HG3	6	0.29
(2,316)	1:10:A:GLN:HE21	1:14:A:GLU:HG2	9	0.29
(2,316)	1:10:A:GLN:HE21	1:14:A:GLU:HG2	10	0.29
(2,314)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD11	5	0.29
(2,314)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD12	5	0.29
(2,314)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD13	5	0.29
(2,303)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	2	0.29
(2,302)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	7	0.29
(2,269)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HD1	7	0.29
(2,269)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HD2	7	0.29
(2,247)	1:14:A:GLU:H	1:14:A:GLU:HB2	6	0.29
(2,245)	1:14:A:GLU:H	1:14:A:GLU:HG2	6	0.29
(2,240)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HB2	1	0.29
(2,240)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HB2	5	0.29
(2,237)	1:15:A:GLY:H	1:16:A:GLY:H	9	0.29
(2,221)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HG2	3	0.29
(2,208)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HB3	1	0.29
(2,208)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HB3	2	0.29
(2,208)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HB3	3	0.29

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,208)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HB3	4	0.29
(2,208)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HB3	5	0.29
(2,208)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HB3	6	0.29
(2,208)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HB3	7	0.29
(2,208)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HB3	8	0.29
(2,208)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HB3	9	0.29
(2,208)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HB3	10	0.29
(2,204)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HG	7	0.29
(2,175)	1:9:A:ILE:HG12	1:9:A:ILE:HG13	1	0.29
(2,175)	1:9:A:ILE:HG12	1:9:A:ILE:HG13	2	0.29
(2,175)	1:9:A:ILE:HG12	1:9:A:ILE:HG13	3	0.29
(2,175)	1:9:A:ILE:HG12	1:9:A:ILE:HG13	4	0.29
(2,175)	1:9:A:ILE:HG12	1:9:A:ILE:HG13	5	0.29
(2,175)	1:9:A:ILE:HG12	1:9:A:ILE:HG13	6	0.29
(2,175)	1:9:A:ILE:HG12	1:9:A:ILE:HG13	7	0.29
(2,175)	1:9:A:ILE:HG12	1:9:A:ILE:HG13	8	0.29
(2,175)	1:9:A:ILE:HG12	1:9:A:ILE:HG13	9	0.29
(2,175)	1:9:A:ILE:HG12	1:9:A:ILE:HG13	10	0.29
(2,164)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:H	4	0.29
(2,94)	1:3:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HG2	2	0.29
(2,94)	1:3:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HG3	2	0.29
(2,62)	1:23:A:PRO:HD2	1:23:A:PRO:HG2	2	0.29
(2,62)	1:23:A:PRO:HD3	1:23:A:PRO:HG2	2	0.29
(2,62)	1:23:A:PRO:HD2	1:23:A:PRO:HG2	5	0.29
(2,62)	1:23:A:PRO:HD3	1:23:A:PRO:HG2	5	0.29
(2,62)	1:23:A:PRO:HD2	1:23:A:PRO:HG2	10	0.29
(2,62)	1:23:A:PRO:HD3	1:23:A:PRO:HG2	10	0.29
(2,43)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD2	2	0.29
(2,31)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HG3	2	0.29
(2,31)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HG3	7	0.29
(1,415)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HB2	3	0.29
(1,415)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HB2	3	0.29
(1,415)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HB2	3	0.29
(1,342)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:H	9	0.29
(1,321)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB2	10	0.29
(1,304)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB2	9	0.29
(1,160)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	1	0.29
(1,160)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	1	0.29
(1,160)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	10	0.29
(1,160)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	10	0.29
(4,44)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:H	2	0.28
(4,41)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	6	0.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,41)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	6	0.28
(4,41)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	6	0.28
(4,41)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG3	6	0.28
(4,41)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG3	6	0.28
(4,41)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG3	6	0.28
(4,37)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:HA2	6	0.28
(4,37)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:HA2	6	0.28
(4,37)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:HA2	6	0.28
(4,13)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD21	10	0.28
(4,13)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD22	10	0.28
(4,13)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD23	10	0.28
(4,13)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD21	10	0.28
(4,13)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD22	10	0.28
(4,13)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD23	10	0.28
(4,10)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD21	6	0.28
(4,10)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD22	6	0.28
(4,10)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD23	6	0.28
(4,9)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HB2	7	0.28
(4,5)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	3	0.28
(4,5)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	3	0.28
(3,422)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HG2	7	0.28
(3,422)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HG3	7	0.28
(3,417)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HB3	1	0.28
(3,416)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HA	3	0.28
(2,464)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:HA2	10	0.28
(2,464)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:HA2	10	0.28
(2,464)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:HA2	10	0.28
(2,460)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HG2	2	0.28
(2,460)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HG3	2	0.28
(2,460)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HG2	3	0.28
(2,460)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HG3	3	0.28
(2,459)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HD2	2	0.28
(2,459)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HD2	2	0.28
(2,459)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HD2	2	0.28
(2,417)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HB2	4	0.28
(2,417)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HB2	4	0.28
(2,417)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HB2	4	0.28
(2,409)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD11	3	0.28
(2,409)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD12	3	0.28
(2,409)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:HD13	3	0.28
(2,387)	1:21:A:ARG:HB2	1:22:A:PRO:HD2	8	0.28
(2,355)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:H	4	0.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,355)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:H	7	0.28
(2,330)	1:14:A:GLU:H	1:15:A:GLY:H	2	0.28
(2,317)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HG2	8	0.28
(2,317)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HG3	8	0.28
(2,303)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	6	0.28
(2,303)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	8	0.28
(2,245)	1:14:A:GLU:H	1:14:A:GLU:HG2	5	0.28
(2,245)	1:14:A:GLU:H	1:14:A:GLU:HG2	7	0.28
(2,240)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HB2	3	0.28
(2,240)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HB2	4	0.28
(2,240)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HB2	7	0.28
(2,237)	1:15:A:GLY:H	1:16:A:GLY:H	8	0.28
(2,176)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HG13	1	0.28
(2,176)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HG13	2	0.28
(2,176)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HG13	5	0.28
(2,176)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HG13	8	0.28
(2,176)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HG13	10	0.28
(2,171)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HD11	6	0.28
(2,171)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HD12	6	0.28
(2,171)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HD13	6	0.28
(2,142)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HB3	3	0.28
(2,88)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HB2	3	0.28
(2,88)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HB3	3	0.28
(2,81)	1:24:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HG3	7	0.28
(2,79)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HG2	7	0.28
(2,79)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HG2	9	0.28
(2,71)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HB3	3	0.28
(2,71)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HB3	8	0.28
(2,62)	1:23:A:PRO:HD2	1:23:A:PRO:HG2	7	0.28
(2,62)	1:23:A:PRO:HD3	1:23:A:PRO:HG2	7	0.28
(2,62)	1:23:A:PRO:HD2	1:23:A:PRO:HG2	9	0.28
(2,62)	1:23:A:PRO:HD3	1:23:A:PRO:HG2	9	0.28
(2,11)	1:19:A:SER:H	1:19:A:SER:HA	5	0.28
(1,513)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:H	2	0.28
(1,487)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	6	0.28
(1,487)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	6	0.28
(1,487)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	6	0.28
(1,487)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG3	6	0.28
(1,487)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG3	6	0.28
(1,487)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG3	6	0.28
(1,464)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:HA2	6	0.28
(1,464)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:HA2	6	0.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,464)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:HA2	6	0.28
(1,457)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HG2	7	0.28
(1,457)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HG3	7	0.28
(1,452)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HB3	1	0.28
(1,451)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HA	3	0.28
(1,281)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD21	10	0.28
(1,281)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD22	10	0.28
(1,281)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD23	10	0.28
(1,281)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD21	10	0.28
(1,281)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD22	10	0.28
(1,281)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD23	10	0.28
(1,206)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD21	6	0.28
(1,206)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD22	6	0.28
(1,206)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD23	6	0.28
(1,188)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HB2	7	0.28
(1,160)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	3	0.28
(1,160)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	3	0.28
(4,44)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:H	9	0.27
(4,20)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:H	2	0.27
(4,20)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:H	2	0.27
(4,20)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:H	2	0.27
(4,19)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:H	6	0.27
(4,19)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:H	6	0.27
(3,441)	1:21:A:ARG:HB3	1:22:A:PRO:HD3	3	0.27
(3,417)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HB3	6	0.27
(3,410)	1:14:A:GLU:HB3	1:15:A:GLY:H	6	0.27
(3,402)	1:11:A:TRP:HZ3	1:17:A:PRO:HD2	3	0.27
(3,402)	1:11:A:TRP:HZ3	1:17:A:PRO:HD2	5	0.27
(3,133)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HB3	2	0.27
(2,496)	1:3:A:GLU:HA	1:6:A:ARG:HB2	4	0.27
(2,459)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HD2	5	0.27
(2,459)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HD2	5	0.27
(2,459)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HD2	5	0.27
(2,447)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HG13	6	0.27
(2,447)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HG13	6	0.27
(2,330)	1:14:A:GLU:H	1:15:A:GLY:H	8	0.27
(2,328)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:H	8	0.27
(2,317)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HG2	3	0.27
(2,317)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HG3	3	0.27
(2,245)	1:14:A:GLU:H	1:14:A:GLU:HG2	1	0.27
(2,245)	1:14:A:GLU:H	1:14:A:GLU:HG2	8	0.27
(2,245)	1:14:A:GLU:H	1:14:A:GLU:HG2	10	0.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,240)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HB2	10	0.27
(2,184)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD11	7	0.27
(2,184)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD12	7	0.27
(2,184)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD13	7	0.27
(2,176)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HG13	4	0.27
(2,176)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HG13	6	0.27
(2,176)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HG13	9	0.27
(2,171)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HD11	1	0.27
(2,171)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HD12	1	0.27
(2,171)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HD13	1	0.27
(2,171)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HD11	10	0.27
(2,171)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HD12	10	0.27
(2,171)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HD13	10	0.27
(2,170)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	2	0.27
(2,170)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	2	0.27
(2,170)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	2	0.27
(2,164)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:H	10	0.27
(2,128)	1:6:A:ARG:HD3	1:6:A:ARG:HG2	10	0.27
(2,127)	1:6:A:ARG:HD3	1:6:A:ARG:HG3	1	0.27
(2,95)	1:3:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	7	0.27
(2,88)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HB2	1	0.27
(2,88)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HB3	1	0.27
(2,83)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HG2	1	0.27
(2,83)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HG2	3	0.27
(2,83)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HG2	10	0.27
(2,81)	1:24:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HG3	9	0.27
(2,76)	1:24:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	1	0.27
(2,73)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG3	6	0.27
(2,11)	1:19:A:SER:H	1:19:A:SER:HA	10	0.27
(1,513)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:H	9	0.27
(1,481)	1:21:A:ARG:HB3	1:22:A:PRO:HD3	3	0.27
(1,452)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HB3	6	0.27
(1,442)	1:14:A:GLU:HB3	1:15:A:GLY:H	6	0.27
(1,434)	1:11:A:TRP:HZ3	1:17:A:PRO:HD2	3	0.27
(1,434)	1:11:A:TRP:HZ3	1:17:A:PRO:HD2	5	0.27
(1,358)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:H	2	0.27
(1,358)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:H	2	0.27
(1,358)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:H	2	0.27
(1,326)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:H	6	0.27
(1,326)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:H	6	0.27
(1,135)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HB3	2	0.27
(4,44)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:H	7	0.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,44)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:H	10	0.26
(4,28)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HA	1	0.26
(4,28)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HA	1	0.26
(4,28)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HA	1	0.26
(4,28)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HA	8	0.26
(4,28)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HA	8	0.26
(4,28)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HA	8	0.26
(4,20)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:H	4	0.26
(4,20)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:H	4	0.26
(4,20)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:H	4	0.26
(4,20)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:H	10	0.26
(4,20)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:H	10	0.26
(4,20)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:H	10	0.26
(4,16)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB2	1	0.26
(4,7)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG21	5	0.26
(4,7)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG22	5	0.26
(4,7)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG23	5	0.26
(4,7)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG21	7	0.26
(4,7)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG22	7	0.26
(4,7)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG23	7	0.26
(3,430)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	3	0.26
(3,430)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	3	0.26
(3,430)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	3	0.26
(3,323)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:H	6	0.26
(3,323)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:H	10	0.26
(3,244)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD3	4	0.26
(3,244)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD3	6	0.26
(3,244)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD3	8	0.26
(3,133)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HB3	4	0.26
(2,496)	1:3:A:GLU:HA	1:6:A:ARG:HB2	10	0.26
(2,491)	1:19:A:SER:HB3	1:20:A:GLY:H	1	0.26
(2,447)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HG13	1	0.26
(2,447)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HG13	1	0.26
(2,385)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HB2	7	0.26
(2,333)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HB2	2	0.26
(2,333)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HB2	6	0.26
(2,330)	1:14:A:GLU:H	1:15:A:GLY:H	9	0.26
(2,328)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:H	3	0.26
(2,323)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HZ3	3	0.26
(2,323)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HZ3	3	0.26
(2,316)	1:10:A:GLN:HE21	1:14:A:GLU:HG2	3	0.26
(2,314)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD11	8	0.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,314)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD12	8	0.26
(2,314)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD13	8	0.26
(2,211)	1:12:A:LEU:HD21	1:12:A:LEU:HG	6	0.26
(2,211)	1:12:A:LEU:HD22	1:12:A:LEU:HG	6	0.26
(2,211)	1:12:A:LEU:HD23	1:12:A:LEU:HG	6	0.26
(2,176)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HG13	3	0.26
(2,171)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HD11	2	0.26
(2,171)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HD12	2	0.26
(2,171)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HD13	2	0.26
(2,171)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HD11	3	0.26
(2,171)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HD12	3	0.26
(2,171)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HD13	3	0.26
(2,170)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	1	0.26
(2,170)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	1	0.26
(2,170)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	1	0.26
(2,170)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	4	0.26
(2,170)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	4	0.26
(2,170)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	4	0.26
(2,170)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	5	0.26
(2,170)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	5	0.26
(2,170)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	5	0.26
(2,170)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	8	0.26
(2,170)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	8	0.26
(2,170)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	8	0.26
(2,133)	1:6:A:ARG:HG2	1:6:A:ARG:HG3	1	0.26
(2,133)	1:6:A:ARG:HG2	1:6:A:ARG:HG3	2	0.26
(2,133)	1:6:A:ARG:HG2	1:6:A:ARG:HG3	3	0.26
(2,133)	1:6:A:ARG:HG2	1:6:A:ARG:HG3	5	0.26
(2,133)	1:6:A:ARG:HG2	1:6:A:ARG:HG3	7	0.26
(2,128)	1:6:A:ARG:HD3	1:6:A:ARG:HG2	5	0.26
(2,127)	1:6:A:ARG:HD3	1:6:A:ARG:HG3	3	0.26
(2,99)	1:3:A:GLU:H	1:3:A:GLU:HB3	9	0.26
(2,71)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HB3	4	0.26
(2,71)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HB3	10	0.26
(2,44)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD3	10	0.26
(2,43)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD2	5	0.26
(2,11)	1:19:A:SER:H	1:19:A:SER:HA	3	0.26
(2,10)	1:16:A:GLY:H	1:16:A:GLY:HA3	1	0.26
(2,10)	1:16:A:GLY:H	1:16:A:GLY:HA3	3	0.26
(1,513)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:H	7	0.26
(1,513)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:H	10	0.26
(1,468)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	3	0.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,468)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	3	0.26
(1,468)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	3	0.26
(1,404)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HA	1	0.26
(1,404)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HA	1	0.26
(1,404)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HA	1	0.26
(1,404)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HA	8	0.26
(1,404)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HA	8	0.26
(1,404)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HA	8	0.26
(1,358)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:H	4	0.26
(1,358)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:H	4	0.26
(1,358)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:H	4	0.26
(1,358)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:H	10	0.26
(1,358)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:H	10	0.26
(1,358)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:H	10	0.26
(1,342)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:H	6	0.26
(1,342)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:H	10	0.26
(1,321)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB2	1	0.26
(1,255)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD3	4	0.26
(1,255)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD3	6	0.26
(1,255)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD3	8	0.26
(1,183)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG21	5	0.26
(1,183)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG22	5	0.26
(1,183)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG23	5	0.26
(1,183)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG21	7	0.26
(1,183)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG22	7	0.26
(1,183)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG23	7	0.26
(1,135)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HB3	4	0.26
(4,43)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG2	5	0.25
(4,43)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG2	6	0.25
(4,28)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HA	5	0.25
(4,28)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HA	5	0.25
(4,28)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HA	5	0.25
(4,20)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:H	9	0.25
(4,20)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:H	9	0.25
(4,20)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:H	9	0.25
(4,13)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD21	7	0.25
(4,13)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD22	7	0.25
(4,13)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD23	7	0.25
(4,13)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD21	7	0.25
(4,13)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD22	7	0.25
(4,13)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD23	7	0.25
(4,9)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HB2	6	0.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,7)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG21	1	0.25
(4,7)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG22	1	0.25
(4,7)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG23	1	0.25
(4,7)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG21	3	0.25
(4,7)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG22	3	0.25
(4,7)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG23	3	0.25
(4,7)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG21	4	0.25
(4,7)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG22	4	0.25
(4,7)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG23	4	0.25
(4,7)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG21	6	0.25
(4,7)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG22	6	0.25
(4,7)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG23	6	0.25
(4,7)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG21	8	0.25
(4,7)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG22	8	0.25
(4,7)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG23	8	0.25
(4,7)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG21	9	0.25
(4,7)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG22	9	0.25
(4,7)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG23	9	0.25
(3,329)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:H	6	0.25
(3,244)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD3	5	0.25
(3,133)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HB3	6	0.25
(3,133)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HB3	10	0.25
(2,505)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HE3	1	0.25
(2,505)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HE3	1	0.25
(2,447)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HG13	3	0.25
(2,447)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HG13	3	0.25
(2,435)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	1	0.25
(2,418)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG11	10	0.25
(2,418)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG12	10	0.25
(2,418)	1:2:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:HG13	10	0.25
(2,387)	1:21:A:ARG:HB2	1:22:A:PRO:HD2	10	0.25
(2,365)	1:9:A:ILE:HB	1:10:A:GLN:H	3	0.25
(2,333)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HB2	1	0.25
(2,333)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HB2	9	0.25
(2,330)	1:14:A:GLU:H	1:15:A:GLY:H	5	0.25
(2,328)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:H	2	0.25
(2,317)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HG2	2	0.25
(2,317)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HG3	2	0.25
(2,317)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HG2	5	0.25
(2,317)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HG3	5	0.25
(2,317)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HG2	7	0.25
(2,317)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HG3	7	0.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,317)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HG2	9	0.25
(2,317)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HG3	9	0.25
(2,314)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD11	4	0.25
(2,314)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD12	4	0.25
(2,314)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD13	4	0.25
(2,236)	1:13:A:LYS:H	1:14:A:GLU:H	6	0.25
(2,221)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HG2	4	0.25
(2,221)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HG2	10	0.25
(2,211)	1:12:A:LEU:HD21	1:12:A:LEU:HG	1	0.25
(2,211)	1:12:A:LEU:HD22	1:12:A:LEU:HG	1	0.25
(2,211)	1:12:A:LEU:HD23	1:12:A:LEU:HG	1	0.25
(2,211)	1:12:A:LEU:HD21	1:12:A:LEU:HG	2	0.25
(2,211)	1:12:A:LEU:HD22	1:12:A:LEU:HG	2	0.25
(2,211)	1:12:A:LEU:HD23	1:12:A:LEU:HG	2	0.25
(2,211)	1:12:A:LEU:HD21	1:12:A:LEU:HG	4	0.25
(2,211)	1:12:A:LEU:HD22	1:12:A:LEU:HG	4	0.25
(2,211)	1:12:A:LEU:HD23	1:12:A:LEU:HG	4	0.25
(2,211)	1:12:A:LEU:HD21	1:12:A:LEU:HG	5	0.25
(2,211)	1:12:A:LEU:HD22	1:12:A:LEU:HG	5	0.25
(2,211)	1:12:A:LEU:HD23	1:12:A:LEU:HG	5	0.25
(2,211)	1:12:A:LEU:HD21	1:12:A:LEU:HG	8	0.25
(2,211)	1:12:A:LEU:HD22	1:12:A:LEU:HG	8	0.25
(2,211)	1:12:A:LEU:HD23	1:12:A:LEU:HG	8	0.25
(2,211)	1:12:A:LEU:HD21	1:12:A:LEU:HG	9	0.25
(2,211)	1:12:A:LEU:HD22	1:12:A:LEU:HG	9	0.25
(2,211)	1:12:A:LEU:HD23	1:12:A:LEU:HG	9	0.25
(2,184)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD11	3	0.25
(2,184)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD12	3	0.25
(2,184)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD13	3	0.25
(2,171)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HD11	5	0.25
(2,171)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HD12	5	0.25
(2,171)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HD13	5	0.25
(2,171)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HD11	8	0.25
(2,171)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HD12	8	0.25
(2,171)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HD13	8	0.25
(2,170)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	6	0.25
(2,170)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	6	0.25
(2,170)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	6	0.25
(2,170)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	9	0.25
(2,170)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	9	0.25
(2,170)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	9	0.25
(2,170)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	10	0.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,170)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	10	0.25
(2,170)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	10	0.25
(2,133)	1:6:A:ARG:HG2	1:6:A:ARG:HG3	4	0.25
(2,133)	1:6:A:ARG:HG2	1:6:A:ARG:HG3	6	0.25
(2,133)	1:6:A:ARG:HG2	1:6:A:ARG:HG3	8	0.25
(2,133)	1:6:A:ARG:HG2	1:6:A:ARG:HG3	9	0.25
(2,133)	1:6:A:ARG:HG2	1:6:A:ARG:HG3	10	0.25
(2,128)	1:6:A:ARG:HD3	1:6:A:ARG:HG2	4	0.25
(2,108)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG21	8	0.25
(2,108)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG22	8	0.25
(2,108)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG23	8	0.25
(2,99)	1:3:A:GLU:H	1:3:A:GLU:HB3	8	0.25
(2,95)	1:3:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	3	0.25
(2,94)	1:3:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HG2	7	0.25
(2,94)	1:3:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HG3	7	0.25
(2,88)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HB2	6	0.25
(2,88)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HB3	6	0.25
(2,88)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HB2	8	0.25
(2,88)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HB3	8	0.25
(2,83)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HG2	6	0.25
(2,76)	1:24:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	2	0.25
(2,61)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	2	0.25
(2,61)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD3	2	0.25
(2,61)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	4	0.25
(2,61)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD3	4	0.25
(2,34)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HG2	10	0.25
(2,34)	1:21:A:ARG:HD3	1:21:A:ARG:HG2	10	0.25
(2,11)	1:19:A:SER:H	1:19:A:SER:HA	1	0.25
(2,11)	1:19:A:SER:H	1:19:A:SER:HA	7	0.25
(1,506)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG2	5	0.25
(1,506)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG2	6	0.25
(1,404)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HA	5	0.25
(1,404)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HA	5	0.25
(1,404)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HA	5	0.25
(1,358)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:H	9	0.25
(1,358)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:H	9	0.25
(1,358)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:H	9	0.25
(1,348)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:H	6	0.25
(1,281)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD21	7	0.25
(1,281)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD22	7	0.25
(1,281)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD23	7	0.25
(1,281)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD21	7	0.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,281)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD22	7	0.25
(1,281)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD23	7	0.25
(1,255)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD3	5	0.25
(1,188)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HB2	6	0.25
(1,183)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG21	1	0.25
(1,183)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG22	1	0.25
(1,183)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG23	1	0.25
(1,183)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG21	3	0.25
(1,183)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG22	3	0.25
(1,183)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG23	3	0.25
(1,183)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG21	4	0.25
(1,183)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG22	4	0.25
(1,183)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG23	4	0.25
(1,183)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG21	6	0.25
(1,183)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG22	6	0.25
(1,183)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG23	6	0.25
(1,183)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG21	8	0.25
(1,183)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG22	8	0.25
(1,183)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG23	8	0.25
(1,183)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG21	9	0.25
(1,183)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG22	9	0.25
(1,183)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG23	9	0.25
(1,135)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HB3	6	0.25
(1,135)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HB3	10	0.25
(4,20)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:H	1	0.24
(4,20)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:H	1	0.24
(4,20)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:H	1	0.24
(4,20)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:H	7	0.24
(4,20)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:H	7	0.24
(4,20)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:H	7	0.24
(4,12)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HG	1	0.24
(4,12)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HG	1	0.24
(4,7)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG21	2	0.24
(4,7)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG22	2	0.24
(4,7)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG23	2	0.24
(4,7)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG21	10	0.24
(4,7)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG22	10	0.24
(4,7)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG23	10	0.24
(3,417)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HB3	10	0.24
(3,323)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:H	1	0.24
(3,244)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD3	2	0.24
(3,244)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD3	10	0.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,482)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HB2	6	0.24
(2,473)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:HE3	2	0.24
(2,473)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:HE3	2	0.24
(2,447)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HG13	2	0.24
(2,447)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HG13	2	0.24
(2,387)	1:21:A:ARG:HB2	1:22:A:PRO:HD2	9	0.24
(2,384)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HD3	10	0.24
(2,356)	1:7:A:LEU:HB2	1:8:A:TYR:H	9	0.24
(2,355)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:H	1	0.24
(2,333)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HB2	4	0.24
(2,333)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HB2	10	0.24
(2,330)	1:14:A:GLU:H	1:15:A:GLY:H	10	0.24
(2,329)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:H	9	0.24
(2,329)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:H	9	0.24
(2,317)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HG2	1	0.24
(2,317)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HG3	1	0.24
(2,317)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HG2	4	0.24
(2,317)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HG3	4	0.24
(2,315)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD21	3	0.24
(2,315)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD22	3	0.24
(2,315)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD23	3	0.24
(2,238)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HG2	6	0.24
(2,224)	1:13:A:LYS:HE2	1:13:A:LYS:HG2	6	0.24
(2,224)	1:13:A:LYS:HE3	1:13:A:LYS:HG2	6	0.24
(2,213)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD11	1	0.24
(2,213)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD12	1	0.24
(2,213)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD13	1	0.24
(2,211)	1:12:A:LEU:HD21	1:12:A:LEU:HG	3	0.24
(2,211)	1:12:A:LEU:HD22	1:12:A:LEU:HG	3	0.24
(2,211)	1:12:A:LEU:HD23	1:12:A:LEU:HG	3	0.24
(2,211)	1:12:A:LEU:HD21	1:12:A:LEU:HG	7	0.24
(2,211)	1:12:A:LEU:HD22	1:12:A:LEU:HG	7	0.24
(2,211)	1:12:A:LEU:HD23	1:12:A:LEU:HG	7	0.24
(2,211)	1:12:A:LEU:HD21	1:12:A:LEU:HG	10	0.24
(2,211)	1:12:A:LEU:HD22	1:12:A:LEU:HG	10	0.24
(2,211)	1:12:A:LEU:HD23	1:12:A:LEU:HG	10	0.24
(2,176)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HG13	7	0.24
(2,171)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HD11	4	0.24
(2,171)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HD12	4	0.24
(2,171)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HD13	4	0.24
(2,171)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HD11	9	0.24
(2,171)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HD12	9	0.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,171)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HD13	9	0.24
(2,170)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	7	0.24
(2,170)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	7	0.24
(2,170)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	7	0.24
(2,128)	1:6:A:ARG:HD3	1:6:A:ARG:HG2	8	0.24
(2,108)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG21	1	0.24
(2,108)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG22	1	0.24
(2,108)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG23	1	0.24
(2,95)	1:3:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	2	0.24
(2,83)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HG2	7	0.24
(2,71)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HB3	9	0.24
(2,34)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HG2	7	0.24
(2,34)	1:21:A:ARG:HD3	1:21:A:ARG:HG2	7	0.24
(2,11)	1:19:A:SER:H	1:19:A:SER:HA	2	0.24
(1,452)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HB3	10	0.24
(1,358)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:H	1	0.24
(1,358)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:H	1	0.24
(1,358)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:H	1	0.24
(1,358)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:H	7	0.24
(1,358)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:H	7	0.24
(1,358)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:H	7	0.24
(1,342)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:H	1	0.24
(1,277)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HG	1	0.24
(1,277)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HG	1	0.24
(1,255)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD3	2	0.24
(1,255)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD3	10	0.24
(1,183)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG21	2	0.24
(1,183)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG22	2	0.24
(1,183)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG23	2	0.24
(1,183)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG21	10	0.24
(1,183)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG22	10	0.24
(1,183)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG23	10	0.24
(4,43)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG2	10	0.23
(4,28)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HA	2	0.23
(4,28)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HA	2	0.23
(4,28)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HA	2	0.23
(4,27)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HB2	3	0.23
(4,27)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HB2	3	0.23
(4,27)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HB2	3	0.23
(3,323)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:H	4	0.23
(3,244)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD3	3	0.23
(3,244)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD3	7	0.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,244)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD3	9	0.23
(3,134)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HG2	3	0.23
(3,133)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HB3	1	0.23
(3,133)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HB3	8	0.23
(3,42)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HG3	5	0.23
(2,447)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HG13	4	0.23
(2,447)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HG13	4	0.23
(2,425)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD21	3	0.23
(2,425)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD22	3	0.23
(2,425)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD23	3	0.23
(2,417)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HB2	8	0.23
(2,417)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HB2	8	0.23
(2,417)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HB2	8	0.23
(2,385)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HB2	5	0.23
(2,317)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HG2	10	0.23
(2,317)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HG3	10	0.23
(2,221)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HG2	8	0.23
(2,213)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD11	6	0.23
(2,213)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD12	6	0.23
(2,213)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD13	6	0.23
(2,203)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HB3	6	0.23
(2,189)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HB3	2	0.23
(2,108)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG21	3	0.23
(2,108)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG22	3	0.23
(2,108)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG23	3	0.23
(2,108)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG21	5	0.23
(2,108)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG22	5	0.23
(2,108)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG23	5	0.23
(2,108)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG21	10	0.23
(2,108)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG22	10	0.23
(2,108)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG23	10	0.23
(2,95)	1:3:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	9	0.23
(2,83)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HG2	9	0.23
(2,71)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HB3	1	0.23
(2,71)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HB3	7	0.23
(2,69)	1:23:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD2	9	0.23
(2,61)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	3	0.23
(2,61)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD3	3	0.23
(2,11)	1:19:A:SER:H	1:19:A:SER:HA	9	0.23
(2,10)	1:16:A:GLY:H	1:16:A:GLY:HA3	7	0.23
(1,506)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG2	10	0.23
(1,404)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HA	2	0.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,404)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HA	2	0.23
(1,404)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HA	2	0.23
(1,399)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HB2	3	0.23
(1,399)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HB2	3	0.23
(1,399)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HB2	3	0.23
(1,342)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:H	4	0.23
(1,255)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD3	3	0.23
(1,255)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD3	7	0.23
(1,255)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD3	9	0.23
(1,136)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HG2	3	0.23
(1,135)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HB3	1	0.23
(1,135)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HB3	8	0.23
(1,42)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HG3	5	0.23
(4,28)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HA	6	0.22
(4,28)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HA	6	0.22
(4,28)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HA	6	0.22
(4,27)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HB2	6	0.22
(4,27)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HB2	6	0.22
(4,27)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HB2	6	0.22
(3,416)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HA	4	0.22
(3,264)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB3	3	0.22
(3,264)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB3	3	0.22
(3,244)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD3	1	0.22
(3,133)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HB3	5	0.22
(3,133)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HB3	9	0.22
(2,496)	1:3:A:GLU:HA	1:6:A:ARG:HB2	5	0.22
(2,459)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HD2	9	0.22
(2,459)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HD2	9	0.22
(2,459)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HD2	9	0.22
(2,447)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HG13	5	0.22
(2,447)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HG13	5	0.22
(2,447)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HG13	8	0.22
(2,447)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HG13	8	0.22
(2,424)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG13	3	0.22
(2,424)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG13	3	0.22
(2,424)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG13	3	0.22
(2,369)	1:23:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	8	0.22
(2,256)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG2	1	0.22
(2,256)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG3	1	0.22
(2,256)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG2	3	0.22
(2,256)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG3	3	0.22
(2,256)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG2	4	0.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,256)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG3	4	0.22
(2,256)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG2	6	0.22
(2,256)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG3	6	0.22
(2,256)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG2	7	0.22
(2,256)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG3	7	0.22
(2,256)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG2	8	0.22
(2,256)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG3	8	0.22
(2,256)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG2	9	0.22
(2,256)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG3	9	0.22
(2,256)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG2	10	0.22
(2,256)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG3	10	0.22
(2,241)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HB3	6	0.22
(2,193)	1:10:A:GLN:HB3	1:10:A:GLN:HG2	6	0.22
(2,193)	1:10:A:GLN:HB3	1:10:A:GLN:HG3	6	0.22
(2,189)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HB3	9	0.22
(2,184)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD11	6	0.22
(2,184)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD12	6	0.22
(2,184)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD13	6	0.22
(2,170)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	3	0.22
(2,170)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	3	0.22
(2,170)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	3	0.22
(2,147)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HB3	7	0.22
(2,108)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG21	4	0.22
(2,108)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG22	4	0.22
(2,108)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG23	4	0.22
(2,108)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG21	6	0.22
(2,108)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG22	6	0.22
(2,108)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG23	6	0.22
(2,61)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	5	0.22
(2,61)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD3	5	0.22
(2,61)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	10	0.22
(2,61)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD3	10	0.22
(2,43)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD2	10	0.22
(2,34)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HG2	2	0.22
(2,34)	1:21:A:ARG:HD3	1:21:A:ARG:HG2	2	0.22
(2,34)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HG2	8	0.22
(2,34)	1:21:A:ARG:HD3	1:21:A:ARG:HG2	8	0.22
(2,27)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HD3	3	0.22
(2,27)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HD3	6	0.22
(1,451)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HA	4	0.22
(1,404)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HA	6	0.22
(1,404)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HA	6	0.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,404)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HA	6	0.22
(1,399)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HB2	6	0.22
(1,399)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HB2	6	0.22
(1,399)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HB2	6	0.22
(1,275)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB3	3	0.22
(1,275)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB3	3	0.22
(1,255)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD3	1	0.22
(1,135)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HB3	5	0.22
(1,135)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HB3	9	0.22
(4,43)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG2	1	0.21
(4,43)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG2	7	0.21
(4,28)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HA	4	0.21
(4,28)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HA	4	0.21
(4,28)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HA	4	0.21
(4,28)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HA	10	0.21
(4,28)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HA	10	0.21
(4,28)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HA	10	0.21
(3,402)	1:11:A:TRP:HZ3	1:17:A:PRO:HD2	7	0.21
(3,323)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:H	5	0.21
(3,155)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	1	0.21
(3,155)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	1	0.21
(3,155)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	2	0.21
(3,155)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	2	0.21
(3,155)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	5	0.21
(3,155)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	5	0.21
(3,155)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	6	0.21
(3,155)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	6	0.21
(3,155)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	8	0.21
(3,155)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	8	0.21
(3,155)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	10	0.21
(3,155)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	10	0.21
(3,135)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HG3	7	0.21
(2,447)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HG13	10	0.21
(2,447)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HG13	10	0.21
(2,425)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD21	7	0.21
(2,425)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD22	7	0.21
(2,425)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD23	7	0.21
(2,425)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD21	10	0.21
(2,425)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD22	10	0.21
(2,425)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD23	10	0.21
(2,390)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD2	8	0.21
(2,390)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	8	0.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,370)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:H	10	0.21
(2,370)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:H	10	0.21
(2,370)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:H	10	0.21
(2,355)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:H	5	0.21
(2,316)	1:10:A:GLN:HE21	1:14:A:GLU:HG2	8	0.21
(2,295)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HA	8	0.21
(2,265)	1:19:A:SER:H	1:19:A:SER:HB2	7	0.21
(2,260)	1:18:A:SER:HA	1:18:A:SER:HB2	3	0.21
(2,260)	1:18:A:SER:HA	1:18:A:SER:HB3	3	0.21
(2,260)	1:18:A:SER:HA	1:18:A:SER:HB2	5	0.21
(2,260)	1:18:A:SER:HA	1:18:A:SER:HB3	5	0.21
(2,260)	1:18:A:SER:HA	1:18:A:SER:HB2	9	0.21
(2,260)	1:18:A:SER:HA	1:18:A:SER:HB3	9	0.21
(2,256)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG2	2	0.21
(2,256)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG3	2	0.21
(2,256)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG2	5	0.21
(2,256)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG3	5	0.21
(2,245)	1:14:A:GLU:H	1:14:A:GLU:HG2	9	0.21
(2,203)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HB3	1	0.21
(2,203)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HB3	8	0.21
(2,189)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HB3	1	0.21
(2,187)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG2	4	0.21
(2,187)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	4	0.21
(2,187)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG2	10	0.21
(2,187)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	10	0.21
(2,184)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD11	9	0.21
(2,184)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD12	9	0.21
(2,184)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD13	9	0.21
(2,147)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HB3	1	0.21
(2,147)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HB3	2	0.21
(2,147)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HB3	3	0.21
(2,147)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HB3	4	0.21
(2,147)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HB3	5	0.21
(2,147)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HB3	6	0.21
(2,147)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HB3	8	0.21
(2,147)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HB3	9	0.21
(2,147)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HB3	10	0.21
(2,124)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HD3	4	0.21
(2,108)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG21	2	0.21
(2,108)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG22	2	0.21
(2,108)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG23	2	0.21
(2,108)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG21	9	0.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,108)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG22	9	0.21
(2,108)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG23	9	0.21
(2,99)	1:3:A:GLU:H	1:3:A:GLU:HB3	7	0.21
(2,93)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HB3	5	0.21
(2,73)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG3	3	0.21
(2,69)	1:23:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD2	3	0.21
(2,61)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	1	0.21
(2,61)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD3	1	0.21
(2,61)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	8	0.21
(2,61)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD3	8	0.21
(2,45)	1:22:A:PRO:HD2	1:22:A:PRO:HD3	4	0.21
(2,44)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD3	6	0.21
(2,36)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG3	4	0.21
(2,34)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HG2	1	0.21
(2,34)	1:21:A:ARG:HD3	1:21:A:ARG:HG2	1	0.21
(2,34)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HG2	4	0.21
(2,34)	1:21:A:ARG:HD3	1:21:A:ARG:HG2	4	0.21
(2,34)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HG2	6	0.21
(2,34)	1:21:A:ARG:HD3	1:21:A:ARG:HG2	6	0.21
(2,27)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HD3	2	0.21
(2,27)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HD3	4	0.21
(2,27)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HD3	5	0.21
(2,27)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HD3	8	0.21
(1,506)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG2	1	0.21
(1,506)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG2	7	0.21
(1,434)	1:11:A:TRP:HZ3	1:17:A:PRO:HD2	7	0.21
(1,404)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HA	4	0.21
(1,404)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HA	4	0.21
(1,404)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HA	4	0.21
(1,404)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HA	10	0.21
(1,404)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HA	10	0.21
(1,404)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HA	10	0.21
(1,342)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:H	5	0.21
(1,159)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	1	0.21
(1,159)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	1	0.21
(1,159)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	2	0.21
(1,159)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	2	0.21
(1,159)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	5	0.21
(1,159)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	5	0.21
(1,159)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	6	0.21
(1,159)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	6	0.21
(1,159)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	8	0.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,159)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	8	0.21
(1,159)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	10	0.21
(1,159)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	10	0.21
(1,137)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HG3	7	0.21
(4,43)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG2	8	0.2
(4,28)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HA	9	0.2
(4,28)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HA	9	0.2
(4,28)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HA	9	0.2
(4,27)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HB2	2	0.2
(4,27)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HB2	2	0.2
(4,27)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HB2	2	0.2
(4,27)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HB2	4	0.2
(4,27)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HB2	4	0.2
(4,27)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HB2	4	0.2
(4,27)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HB2	9	0.2
(4,27)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HB2	9	0.2
(4,27)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HB2	9	0.2
(4,11)	1:14:A:GLU:H	1:14:A:GLU:HB2	1	0.2
(3,454)	1:19:A:SER:HA	1:20:A:GLY:H	7	0.2
(3,386)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HB2	4	0.2
(3,386)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HB2	4	0.2
(3,386)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HB2	4	0.2
(3,364)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	3	0.2
(3,323)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:H	3	0.2
(3,274)	1:11:A:TRP:HD1	1:24:A:PRO:HD3	9	0.2
(3,155)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	4	0.2
(3,155)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	4	0.2
(3,155)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	9	0.2
(3,155)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	9	0.2
(3,41)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HG2	9	0.2
(2,473)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:HE3	5	0.2
(2,473)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:HE3	5	0.2
(2,437)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG12	7	0.2
(2,437)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG12	7	0.2
(2,424)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG13	4	0.2
(2,424)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG13	4	0.2
(2,424)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG13	4	0.2
(2,392)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HD3	6	0.2
(2,390)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD2	6	0.2
(2,390)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	6	0.2
(2,387)	1:21:A:ARG:HB2	1:22:A:PRO:HD2	5	0.2
(2,356)	1:7:A:LEU:HB2	1:8:A:TYR:H	6	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,355)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:H	10	0.2
(2,338)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:H	3	0.2
(2,333)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HB2	3	0.2
(2,328)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:H	4	0.2
(2,328)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:H	10	0.2
(2,316)	1:10:A:GLN:HE21	1:14:A:GLU:HG2	1	0.2
(2,311)	1:11:A:TRP:HE3	1:24:A:PRO:HD3	1	0.2
(2,262)	1:19:A:SER:HA	1:19:A:SER:HB2	9	0.2
(2,260)	1:18:A:SER:HA	1:18:A:SER:HB2	10	0.2
(2,260)	1:18:A:SER:HA	1:18:A:SER:HB3	10	0.2
(2,236)	1:13:A:LYS:H	1:14:A:GLU:H	3	0.2
(2,213)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD11	5	0.2
(2,213)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD12	5	0.2
(2,213)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD13	5	0.2
(2,213)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD11	8	0.2
(2,213)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD12	8	0.2
(2,213)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD13	8	0.2
(2,213)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD11	9	0.2
(2,213)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD12	9	0.2
(2,213)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD13	9	0.2
(2,203)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HB3	4	0.2
(2,193)	1:10:A:GLN:HB3	1:10:A:GLN:HG2	1	0.2
(2,193)	1:10:A:GLN:HB3	1:10:A:GLN:HG3	1	0.2
(2,193)	1:10:A:GLN:HB3	1:10:A:GLN:HG2	2	0.2
(2,193)	1:10:A:GLN:HB3	1:10:A:GLN:HG3	2	0.2
(2,193)	1:10:A:GLN:HB3	1:10:A:GLN:HG2	4	0.2
(2,193)	1:10:A:GLN:HB3	1:10:A:GLN:HG3	4	0.2
(2,193)	1:10:A:GLN:HB3	1:10:A:GLN:HG2	7	0.2
(2,193)	1:10:A:GLN:HB3	1:10:A:GLN:HG3	7	0.2
(2,193)	1:10:A:GLN:HB3	1:10:A:GLN:HG2	9	0.2
(2,193)	1:10:A:GLN:HB3	1:10:A:GLN:HG3	9	0.2
(2,193)	1:10:A:GLN:HB3	1:10:A:GLN:HG2	10	0.2
(2,193)	1:10:A:GLN:HB3	1:10:A:GLN:HG3	10	0.2
(2,128)	1:6:A:ARG:HD3	1:6:A:ARG:HG2	9	0.2
(2,99)	1:3:A:GLU:H	1:3:A:GLU:HB3	2	0.2
(2,99)	1:3:A:GLU:H	1:3:A:GLU:HB3	6	0.2
(2,95)	1:3:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	6	0.2
(2,95)	1:3:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	8	0.2
(2,93)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HB3	4	0.2
(2,45)	1:22:A:PRO:HD2	1:22:A:PRO:HD3	1	0.2
(2,45)	1:22:A:PRO:HD2	1:22:A:PRO:HD3	3	0.2
(2,45)	1:22:A:PRO:HD2	1:22:A:PRO:HD3	5	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,45)	1:22:A:PRO:HD2	1:22:A:PRO:HD3	7	0.2
(2,43)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD2	6	0.2
(2,31)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HG3	1	0.2
(2,27)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HD3	1	0.2
(2,27)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HD3	10	0.2
(1,506)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG2	8	0.2
(1,495)	1:19:A:SER:HA	1:20:A:GLY:H	7	0.2
(1,415)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HB2	4	0.2
(1,415)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HB2	4	0.2
(1,415)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HB2	4	0.2
(1,404)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HA	9	0.2
(1,404)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HA	9	0.2
(1,404)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HA	9	0.2
(1,399)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HB2	2	0.2
(1,399)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HB2	2	0.2
(1,399)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HB2	2	0.2
(1,399)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HB2	4	0.2
(1,399)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HB2	4	0.2
(1,399)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HB2	4	0.2
(1,399)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HB2	9	0.2
(1,399)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HB2	9	0.2
(1,399)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HB2	9	0.2
(1,390)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	3	0.2
(1,342)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:H	3	0.2
(1,289)	1:11:A:TRP:HD1	1:24:A:PRO:HD3	9	0.2
(1,247)	1:14:A:GLU:H	1:14:A:GLU:HB2	1	0.2
(1,159)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	4	0.2
(1,159)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	4	0.2
(1,159)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	9	0.2
(1,159)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	9	0.2
(1,41)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HG2	9	0.2
(4,43)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG2	2	0.19
(4,27)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HB2	7	0.19
(4,27)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HB2	7	0.19
(4,27)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HB2	7	0.19
(4,27)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HB2	10	0.19
(4,27)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HB2	10	0.19
(4,27)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HB2	10	0.19
(4,25)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HB	7	0.19
(4,20)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:H	5	0.19
(4,20)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:H	5	0.19
(4,20)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:H	5	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,11)	1:14:A:GLU:H	1:14:A:GLU:HB2	7	0.19
(3,323)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:H	2	0.19
(3,323)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:H	8	0.19
(3,318)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:H	3	0.19
(3,134)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HG2	7	0.19
(2,437)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG12	4	0.19
(2,437)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG12	4	0.19
(2,424)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG13	9	0.19
(2,424)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG13	9	0.19
(2,424)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG13	9	0.19
(2,390)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD2	2	0.19
(2,390)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	2	0.19
(2,390)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD2	9	0.19
(2,390)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	9	0.19
(2,384)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HD3	1	0.19
(2,384)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HD3	4	0.19
(2,384)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HD3	9	0.19
(2,355)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:H	8	0.19
(2,320)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB3	10	0.19
(2,295)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HA	6	0.19
(2,260)	1:18:A:SER:HA	1:18:A:SER:HB2	1	0.19
(2,260)	1:18:A:SER:HA	1:18:A:SER:HB3	1	0.19
(2,260)	1:18:A:SER:HA	1:18:A:SER:HB2	2	0.19
(2,260)	1:18:A:SER:HA	1:18:A:SER:HB3	2	0.19
(2,213)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD11	4	0.19
(2,213)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD12	4	0.19
(2,213)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD13	4	0.19
(2,203)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HB3	2	0.19
(2,203)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HB3	5	0.19
(2,203)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HB3	9	0.19
(2,153)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD21	9	0.19
(2,153)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD22	9	0.19
(2,153)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD23	9	0.19
(2,122)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HD2	1	0.19
(2,95)	1:3:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	4	0.19
(2,95)	1:3:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	5	0.19
(2,88)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HB2	5	0.19
(2,88)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HB3	5	0.19
(2,84)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HG3	9	0.19
(2,78)	1:24:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HG2	3	0.19
(2,78)	1:24:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HG2	6	0.19
(2,69)	1:23:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD2	7	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,59)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG3	7	0.19
(2,45)	1:22:A:PRO:HD2	1:22:A:PRO:HD3	2	0.19
(2,45)	1:22:A:PRO:HD2	1:22:A:PRO:HD3	6	0.19
(2,45)	1:22:A:PRO:HD2	1:22:A:PRO:HD3	8	0.19
(2,45)	1:22:A:PRO:HD2	1:22:A:PRO:HD3	9	0.19
(2,45)	1:22:A:PRO:HD2	1:22:A:PRO:HD3	10	0.19
(2,34)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HG2	3	0.19
(2,34)	1:21:A:ARG:HD3	1:21:A:ARG:HG2	3	0.19
(2,27)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HD3	7	0.19
(2,27)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HD3	9	0.19
(1,506)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG2	2	0.19
(1,399)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HB2	7	0.19
(1,399)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HB2	7	0.19
(1,399)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HB2	7	0.19
(1,399)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HB2	10	0.19
(1,399)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HB2	10	0.19
(1,399)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HB2	10	0.19
(1,376)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HB	7	0.19
(1,358)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:H	5	0.19
(1,358)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:H	5	0.19
(1,358)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:H	5	0.19
(1,342)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:H	2	0.19
(1,342)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:H	8	0.19
(1,337)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:H	3	0.19
(1,247)	1:14:A:GLU:H	1:14:A:GLU:HB2	7	0.19
(1,136)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HG2	7	0.19
(4,28)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HA	3	0.18
(4,28)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HA	3	0.18
(4,28)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HA	3	0.18
(4,20)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:H	6	0.18
(4,20)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:H	6	0.18
(4,20)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:H	6	0.18
(4,20)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:H	8	0.18
(4,20)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:H	8	0.18
(4,20)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:H	8	0.18
(4,11)	1:14:A:GLU:H	1:14:A:GLU:HB2	2	0.18
(4,11)	1:14:A:GLU:H	1:14:A:GLU:HB2	3	0.18
(4,11)	1:14:A:GLU:H	1:14:A:GLU:HB2	5	0.18
(4,11)	1:14:A:GLU:H	1:14:A:GLU:HB2	8	0.18
(4,11)	1:14:A:GLU:H	1:14:A:GLU:HB2	9	0.18
(4,11)	1:14:A:GLU:H	1:14:A:GLU:HB2	10	0.18
(3,464)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HG2	4	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,451)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:H	1	0.18
(3,312)	1:19:A:SER:H	1:20:A:GLY:H	3	0.18
(3,155)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	7	0.18
(3,155)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	7	0.18
(3,42)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HG3	6	0.18
(2,501)	1:2:A:GLU:HB2	1:2:A:GLU:HB3	2	0.18
(2,496)	1:3:A:GLU:HA	1:6:A:ARG:HB2	6	0.18
(2,465)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	4	0.18
(2,465)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	4	0.18
(2,465)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	4	0.18
(2,424)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG13	8	0.18
(2,424)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG13	8	0.18
(2,424)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG13	8	0.18
(2,422)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HG2	9	0.18
(2,422)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HG2	9	0.18
(2,422)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HG2	9	0.18
(2,384)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HD3	5	0.18
(2,333)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HB2	5	0.18
(2,333)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HB2	8	0.18
(2,328)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:H	6	0.18
(2,315)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD21	7	0.18
(2,315)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD22	7	0.18
(2,315)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD23	7	0.18
(2,273)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HD2	5	0.18
(2,273)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HD2	5	0.18
(2,265)	1:19:A:SER:H	1:19:A:SER:HB2	4	0.18
(2,263)	1:19:A:SER:HA	1:19:A:SER:HB3	8	0.18
(2,262)	1:19:A:SER:HA	1:19:A:SER:HB2	6	0.18
(2,252)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HD3	1	0.18
(2,252)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HD3	3	0.18
(2,252)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HD3	4	0.18
(2,252)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HD3	5	0.18
(2,252)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HD3	6	0.18
(2,252)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HD3	7	0.18
(2,252)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HD3	9	0.18
(2,213)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD11	2	0.18
(2,213)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD12	2	0.18
(2,213)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD13	2	0.18
(2,203)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HB3	3	0.18
(2,184)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD11	4	0.18
(2,184)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD12	4	0.18
(2,184)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD13	4	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,124)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HD3	10	0.18
(2,84)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HG3	7	0.18
(2,80)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HG3	9	0.18
(2,59)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG3	3	0.18
(2,59)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG3	4	0.18
(2,59)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG3	9	0.18
(2,36)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG3	3	0.18
(2,34)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HG2	9	0.18
(2,34)	1:21:A:ARG:HD3	1:21:A:ARG:HG2	9	0.18
(1,507)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HG2	4	0.18
(1,492)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:H	1	0.18
(1,404)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HA	3	0.18
(1,404)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HA	3	0.18
(1,404)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HA	3	0.18
(1,358)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:H	6	0.18
(1,358)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:H	6	0.18
(1,358)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:H	6	0.18
(1,358)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:H	8	0.18
(1,358)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:H	8	0.18
(1,358)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:H	8	0.18
(1,331)	1:19:A:SER:H	1:20:A:GLY:H	3	0.18
(1,247)	1:14:A:GLU:H	1:14:A:GLU:HB2	2	0.18
(1,247)	1:14:A:GLU:H	1:14:A:GLU:HB2	3	0.18
(1,247)	1:14:A:GLU:H	1:14:A:GLU:HB2	5	0.18
(1,247)	1:14:A:GLU:H	1:14:A:GLU:HB2	8	0.18
(1,247)	1:14:A:GLU:H	1:14:A:GLU:HB2	9	0.18
(1,247)	1:14:A:GLU:H	1:14:A:GLU:HB2	10	0.18
(1,159)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	7	0.18
(1,159)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	7	0.18
(1,42)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HG3	6	0.18
(4,43)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG2	3	0.17
(4,43)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG2	9	0.17
(4,11)	1:14:A:GLU:H	1:14:A:GLU:HB2	4	0.17
(4,10)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD21	2	0.17
(4,10)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD22	2	0.17
(4,10)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD23	2	0.17
(4,4)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:H	4	0.17
(4,4)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:H	5	0.17
(4,4)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:H	6	0.17
(3,454)	1:19:A:SER:HA	1:20:A:GLY:H	1	0.17
(3,373)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HB	7	0.17
(3,373)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HB	7	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,373)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HB	7	0.17
(3,349)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:HB2	10	0.17
(3,274)	1:11:A:TRP:HD1	1:24:A:PRO:HD3	7	0.17
(3,173)	1:9:A:ILE:HG13	1:9:A:ILE:HG21	1	0.17
(3,173)	1:9:A:ILE:HG13	1:9:A:ILE:HG22	1	0.17
(3,173)	1:9:A:ILE:HG13	1:9:A:ILE:HG23	1	0.17
(3,173)	1:9:A:ILE:HG13	1:9:A:ILE:HG21	2	0.17
(3,173)	1:9:A:ILE:HG13	1:9:A:ILE:HG22	2	0.17
(3,173)	1:9:A:ILE:HG13	1:9:A:ILE:HG23	2	0.17
(3,173)	1:9:A:ILE:HG13	1:9:A:ILE:HG21	10	0.17
(3,173)	1:9:A:ILE:HG13	1:9:A:ILE:HG22	10	0.17
(3,173)	1:9:A:ILE:HG13	1:9:A:ILE:HG23	10	0.17
(3,155)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	3	0.17
(3,155)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	3	0.17
(3,42)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HG3	10	0.17
(2,501)	1:2:A:GLU:HB2	1:2:A:GLU:HB3	1	0.17
(2,501)	1:2:A:GLU:HB2	1:2:A:GLU:HB3	3	0.17
(2,501)	1:2:A:GLU:HB2	1:2:A:GLU:HB3	6	0.17
(2,501)	1:2:A:GLU:HB2	1:2:A:GLU:HB3	7	0.17
(2,501)	1:2:A:GLU:HB2	1:2:A:GLU:HB3	8	0.17
(2,501)	1:2:A:GLU:HB2	1:2:A:GLU:HB3	10	0.17
(2,473)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:HE3	4	0.17
(2,473)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:HE3	4	0.17
(2,437)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG12	6	0.17
(2,437)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG12	6	0.17
(2,436)	1:11:A:TRP:HZ3	1:17:A:PRO:HG2	7	0.17
(2,436)	1:11:A:TRP:HZ3	1:17:A:PRO:HG3	7	0.17
(2,424)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG13	5	0.17
(2,424)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG13	5	0.17
(2,424)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG13	5	0.17
(2,424)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG13	10	0.17
(2,424)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG13	10	0.17
(2,424)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG13	10	0.17
(2,406)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	8	0.17
(2,406)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	8	0.17
(2,406)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	8	0.17
(2,385)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HB2	4	0.17
(2,384)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HD3	3	0.17
(2,355)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:H	2	0.17
(2,328)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:H	5	0.17
(2,318)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HG3	8	0.17
(2,265)	1:19:A:SER:H	1:19:A:SER:HB2	3	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,263)	1:19:A:SER:HA	1:19:A:SER:HB3	2	0.17
(2,260)	1:18:A:SER:HA	1:18:A:SER:HB2	8	0.17
(2,260)	1:18:A:SER:HA	1:18:A:SER:HB3	8	0.17
(2,252)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HD3	2	0.17
(2,252)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HD3	8	0.17
(2,252)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HD3	10	0.17
(2,203)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HB3	7	0.17
(2,168)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG13	3	0.17
(2,112)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG11	7	0.17
(2,112)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG12	7	0.17
(2,112)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG13	7	0.17
(2,95)	1:3:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	1	0.17
(2,76)	1:24:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	5	0.17
(2,59)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG3	2	0.17
(2,59)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG3	8	0.17
(1,506)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG2	3	0.17
(1,506)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG2	9	0.17
(1,495)	1:19:A:SER:HA	1:20:A:GLY:H	1	0.17
(1,400)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HB	7	0.17
(1,400)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HB	7	0.17
(1,400)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HB	7	0.17
(1,372)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:HB2	10	0.17
(1,289)	1:11:A:TRP:HD1	1:24:A:PRO:HD3	7	0.17
(1,247)	1:14:A:GLU:H	1:14:A:GLU:HB2	4	0.17
(1,206)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD21	2	0.17
(1,206)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD22	2	0.17
(1,206)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD23	2	0.17
(1,179)	1:9:A:ILE:HG13	1:9:A:ILE:HG21	1	0.17
(1,179)	1:9:A:ILE:HG13	1:9:A:ILE:HG22	1	0.17
(1,179)	1:9:A:ILE:HG13	1:9:A:ILE:HG23	1	0.17
(1,179)	1:9:A:ILE:HG13	1:9:A:ILE:HG21	2	0.17
(1,179)	1:9:A:ILE:HG13	1:9:A:ILE:HG22	2	0.17
(1,179)	1:9:A:ILE:HG13	1:9:A:ILE:HG23	2	0.17
(1,179)	1:9:A:ILE:HG13	1:9:A:ILE:HG21	10	0.17
(1,179)	1:9:A:ILE:HG13	1:9:A:ILE:HG22	10	0.17
(1,179)	1:9:A:ILE:HG13	1:9:A:ILE:HG23	10	0.17
(1,159)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	3	0.17
(1,159)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	3	0.17
(1,154)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:H	4	0.17
(1,154)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:H	5	0.17
(1,154)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:H	6	0.17
(1,42)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HG3	10	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,43)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG2	4	0.16
(4,27)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HB2	1	0.16
(4,27)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HB2	1	0.16
(4,27)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HB2	1	0.16
(4,27)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HB2	8	0.16
(4,27)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HB2	8	0.16
(4,27)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HB2	8	0.16
(4,26)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HG3	1	0.16
(4,10)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD21	8	0.16
(4,10)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD22	8	0.16
(4,10)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD23	8	0.16
(4,4)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:H	1	0.16
(4,4)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:H	2	0.16
(4,4)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:H	8	0.16
(4,4)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:H	10	0.16
(3,451)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:H	5	0.16
(3,402)	1:11:A:TRP:HZ3	1:17:A:PRO:HD2	2	0.16
(3,297)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HB2	7	0.16
(3,173)	1:9:A:ILE:HG13	1:9:A:ILE:HG21	3	0.16
(3,173)	1:9:A:ILE:HG13	1:9:A:ILE:HG22	3	0.16
(3,173)	1:9:A:ILE:HG13	1:9:A:ILE:HG23	3	0.16
(3,173)	1:9:A:ILE:HG13	1:9:A:ILE:HG21	4	0.16
(3,173)	1:9:A:ILE:HG13	1:9:A:ILE:HG22	4	0.16
(3,173)	1:9:A:ILE:HG13	1:9:A:ILE:HG23	4	0.16
(3,173)	1:9:A:ILE:HG13	1:9:A:ILE:HG21	5	0.16
(3,173)	1:9:A:ILE:HG13	1:9:A:ILE:HG22	5	0.16
(3,173)	1:9:A:ILE:HG13	1:9:A:ILE:HG23	5	0.16
(3,173)	1:9:A:ILE:HG13	1:9:A:ILE:HG21	6	0.16
(3,173)	1:9:A:ILE:HG13	1:9:A:ILE:HG22	6	0.16
(3,173)	1:9:A:ILE:HG13	1:9:A:ILE:HG23	6	0.16
(3,173)	1:9:A:ILE:HG13	1:9:A:ILE:HG21	8	0.16
(3,173)	1:9:A:ILE:HG13	1:9:A:ILE:HG22	8	0.16
(3,173)	1:9:A:ILE:HG13	1:9:A:ILE:HG23	8	0.16
(3,173)	1:9:A:ILE:HG13	1:9:A:ILE:HG21	9	0.16
(3,173)	1:9:A:ILE:HG13	1:9:A:ILE:HG22	9	0.16
(3,173)	1:9:A:ILE:HG13	1:9:A:ILE:HG23	9	0.16
(2,501)	1:2:A:GLU:HB2	1:2:A:GLU:HB3	4	0.16
(2,501)	1:2:A:GLU:HB2	1:2:A:GLU:HB3	5	0.16
(2,501)	1:2:A:GLU:HB2	1:2:A:GLU:HB3	9	0.16
(2,496)	1:3:A:GLU:HA	1:6:A:ARG:HB2	9	0.16
(2,482)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HB2	4	0.16
(2,437)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG12	8	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,437)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG12	8	0.16
(2,435)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	4	0.16
(2,335)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HG2	9	0.16
(2,335)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HG3	9	0.16
(2,329)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:H	1	0.16
(2,329)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:H	1	0.16
(2,320)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB3	5	0.16
(2,276)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG3	1	0.16
(2,276)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG3	1	0.16
(2,263)	1:19:A:SER:HA	1:19:A:SER:HB3	1	0.16
(2,262)	1:19:A:SER:HA	1:19:A:SER:HB2	3	0.16
(2,262)	1:19:A:SER:HA	1:19:A:SER:HB2	8	0.16
(2,258)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HG2	3	0.16
(2,258)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HG3	3	0.16
(2,258)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HG2	7	0.16
(2,258)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HG3	7	0.16
(2,248)	1:14:A:GLU:H	1:14:A:GLU:HB3	6	0.16
(2,203)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HB3	10	0.16
(2,189)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HB3	4	0.16
(2,187)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG2	1	0.16
(2,187)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	1	0.16
(2,184)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD11	1	0.16
(2,184)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD12	1	0.16
(2,184)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD13	1	0.16
(2,184)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD11	10	0.16
(2,184)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD12	10	0.16
(2,184)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD13	10	0.16
(2,169)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG21	7	0.16
(2,169)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG22	7	0.16
(2,169)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG23	7	0.16
(2,126)	1:6:A:ARG:HD2	1:6:A:ARG:HG3	7	0.16
(2,108)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG21	7	0.16
(2,108)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG22	7	0.16
(2,108)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG23	7	0.16
(2,98)	1:3:A:GLU:H	1:3:A:GLU:HB2	8	0.16
(2,80)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HG3	7	0.16
(2,68)	1:23:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD3	4	0.16
(2,61)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	6	0.16
(2,61)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD3	6	0.16
(2,59)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG3	1	0.16
(2,59)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG3	5	0.16
(2,59)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG3	6	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,59)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG3	10	0.16
(2,43)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD2	7	0.16
(2,24)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HB2	4	0.16
(1,506)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG2	4	0.16
(1,492)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:H	5	0.16
(1,434)	1:11:A:TRP:HZ3	1:17:A:PRO:HD2	2	0.16
(1,399)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HB2	1	0.16
(1,399)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HB2	1	0.16
(1,399)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HB2	1	0.16
(1,399)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HB2	8	0.16
(1,399)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HB2	8	0.16
(1,399)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HB2	8	0.16
(1,380)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HG3	1	0.16
(1,312)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HB2	7	0.16
(1,206)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD21	8	0.16
(1,206)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD22	8	0.16
(1,206)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD23	8	0.16
(1,179)	1:9:A:ILE:HG13	1:9:A:ILE:HG21	3	0.16
(1,179)	1:9:A:ILE:HG13	1:9:A:ILE:HG22	3	0.16
(1,179)	1:9:A:ILE:HG13	1:9:A:ILE:HG23	3	0.16
(1,179)	1:9:A:ILE:HG13	1:9:A:ILE:HG21	4	0.16
(1,179)	1:9:A:ILE:HG13	1:9:A:ILE:HG22	4	0.16
(1,179)	1:9:A:ILE:HG13	1:9:A:ILE:HG23	4	0.16
(1,179)	1:9:A:ILE:HG13	1:9:A:ILE:HG21	5	0.16
(1,179)	1:9:A:ILE:HG13	1:9:A:ILE:HG22	5	0.16
(1,179)	1:9:A:ILE:HG13	1:9:A:ILE:HG23	5	0.16
(1,179)	1:9:A:ILE:HG13	1:9:A:ILE:HG21	6	0.16
(1,179)	1:9:A:ILE:HG13	1:9:A:ILE:HG22	6	0.16
(1,179)	1:9:A:ILE:HG13	1:9:A:ILE:HG23	6	0.16
(1,179)	1:9:A:ILE:HG13	1:9:A:ILE:HG21	8	0.16
(1,179)	1:9:A:ILE:HG13	1:9:A:ILE:HG22	8	0.16
(1,179)	1:9:A:ILE:HG13	1:9:A:ILE:HG23	8	0.16
(1,179)	1:9:A:ILE:HG13	1:9:A:ILE:HG21	9	0.16
(1,179)	1:9:A:ILE:HG13	1:9:A:ILE:HG22	9	0.16
(1,179)	1:9:A:ILE:HG13	1:9:A:ILE:HG23	9	0.16
(1,154)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:H	1	0.16
(1,154)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:H	2	0.16
(1,154)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:H	8	0.16
(1,154)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:H	10	0.16
(4,12)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HG	4	0.15
(4,12)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HG	4	0.15
(4,10)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD21	9	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,10)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD22	9	0.15
(4,10)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD23	9	0.15
(4,9)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HB2	2	0.15
(4,4)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:H	3	0.15
(4,4)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:H	9	0.15
(3,451)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:H	4	0.15
(3,451)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:H	6	0.15
(3,451)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:H	8	0.15
(3,373)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HB	6	0.15
(3,373)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HB	6	0.15
(3,373)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HB	6	0.15
(3,278)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB3	9	0.15
(3,229)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HG3	3	0.15
(3,229)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HG3	4	0.15
(2,473)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:HE3	7	0.15
(2,473)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:HE3	7	0.15
(2,473)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:HE3	8	0.15
(2,473)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:HE3	8	0.15
(2,473)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:HE3	10	0.15
(2,473)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:HE3	10	0.15
(2,471)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:H	7	0.15
(2,471)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:H	7	0.15
(2,463)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HB3	6	0.15
(2,463)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HB3	6	0.15
(2,463)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HB3	6	0.15
(2,437)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG12	2	0.15
(2,437)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG12	2	0.15
(2,437)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG12	5	0.15
(2,437)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG12	5	0.15
(2,424)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG13	2	0.15
(2,424)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG13	2	0.15
(2,424)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG13	2	0.15
(2,424)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG13	6	0.15
(2,424)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG13	6	0.15
(2,424)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG13	6	0.15
(2,416)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD21	3	0.15
(2,416)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD22	3	0.15
(2,416)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD23	3	0.15
(2,416)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD21	3	0.15
(2,416)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD22	3	0.15
(2,416)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD23	3	0.15
(2,384)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HD3	8	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,338)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:H	7	0.15
(2,329)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:H	2	0.15
(2,329)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:H	2	0.15
(2,329)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:H	8	0.15
(2,329)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:H	8	0.15
(2,328)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:H	7	0.15
(2,315)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD21	10	0.15
(2,315)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD22	10	0.15
(2,315)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD23	10	0.15
(2,263)	1:19:A:SER:HA	1:19:A:SER:HB3	6	0.15
(2,258)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HG2	1	0.15
(2,258)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HG3	1	0.15
(2,258)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HG2	2	0.15
(2,258)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HG3	2	0.15
(2,258)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HG2	5	0.15
(2,258)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HG3	5	0.15
(2,258)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HG2	9	0.15
(2,258)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HG3	9	0.15
(2,258)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HG2	10	0.15
(2,258)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HG3	10	0.15
(2,245)	1:14:A:GLU:H	1:14:A:GLU:HG2	2	0.15
(2,189)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HB3	10	0.15
(2,187)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG2	9	0.15
(2,187)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	9	0.15
(2,155)	1:8:A:TYR:H	1:8:A:TYR:HB2	3	0.15
(2,142)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HB3	5	0.15
(2,128)	1:6:A:ARG:HD3	1:6:A:ARG:HG2	7	0.15
(2,68)	1:23:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD3	2	0.15
(2,54)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD3	6	0.15
(2,24)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HB2	7	0.15
(1,492)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:H	4	0.15
(1,492)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:H	6	0.15
(1,492)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:H	8	0.15
(1,400)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HB	6	0.15
(1,400)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HB	6	0.15
(1,400)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HB	6	0.15
(1,293)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB3	9	0.15
(1,277)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HG	4	0.15
(1,277)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HG	4	0.15
(1,239)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HG3	3	0.15
(1,239)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HG3	4	0.15
(1,206)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD21	9	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,206)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD22	9	0.15
(1,206)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD23	9	0.15
(1,188)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HB2	2	0.15
(1,154)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:H	3	0.15
(1,154)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:H	9	0.15
(4,44)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:H	6	0.14
(4,26)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HG3	10	0.14
(4,12)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HG	5	0.14
(4,12)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HG	5	0.14
(4,10)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD21	5	0.14
(4,10)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD22	5	0.14
(4,10)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD23	5	0.14
(4,9)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HB2	1	0.14
(4,9)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HB2	9	0.14
(3,464)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HG2	3	0.14
(3,451)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:H	10	0.14
(3,367)	1:23:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD2	6	0.14
(3,364)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	1	0.14
(3,325)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:H	6	0.14
(3,318)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:H	1	0.14
(3,312)	1:19:A:SER:H	1:20:A:GLY:H	5	0.14
(3,303)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HG3	3	0.14
(3,303)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HG3	4	0.14
(3,297)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HB2	9	0.14
(3,271)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE1	2	0.14
(3,271)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE2	2	0.14
(3,271)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE1	2	0.14
(3,271)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE2	2	0.14
(3,271)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE1	2	0.14
(3,271)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE2	2	0.14
(3,271)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE1	4	0.14
(3,271)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE2	4	0.14
(3,271)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE1	4	0.14
(3,271)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE2	4	0.14
(3,271)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE1	4	0.14
(3,271)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE2	4	0.14
(3,229)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HG3	8	0.14
(3,196)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD11	7	0.14
(3,196)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD12	7	0.14
(3,196)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD13	7	0.14
(2,496)	1:3:A:GLU:HA	1:6:A:ARG:HB2	1	0.14
(2,465)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	8	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,465)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	8	0.14
(2,465)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	8	0.14
(2,437)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG12	1	0.14
(2,437)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG12	1	0.14
(2,437)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG12	10	0.14
(2,437)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG12	10	0.14
(2,424)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG13	1	0.14
(2,424)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG13	1	0.14
(2,424)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG13	1	0.14
(2,330)	1:14:A:GLU:H	1:15:A:GLY:H	6	0.14
(2,329)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:H	4	0.14
(2,329)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:H	4	0.14
(2,329)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:H	6	0.14
(2,329)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:H	6	0.14
(2,263)	1:19:A:SER:HA	1:19:A:SER:HB3	4	0.14
(2,263)	1:19:A:SER:HA	1:19:A:SER:HB3	10	0.14
(2,258)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HG2	4	0.14
(2,258)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HG3	4	0.14
(2,241)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HB3	7	0.14
(2,241)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HB3	10	0.14
(2,236)	1:13:A:LYS:H	1:14:A:GLU:H	4	0.14
(2,213)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD11	3	0.14
(2,213)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD12	3	0.14
(2,213)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD13	3	0.14
(2,207)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HG	7	0.14
(2,187)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG2	2	0.14
(2,187)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	2	0.14
(2,184)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD11	5	0.14
(2,184)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD12	5	0.14
(2,184)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD13	5	0.14
(2,142)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HB3	8	0.14
(2,139)	1:6:A:ARG:H	1:7:A:LEU:H	7	0.14
(2,130)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HG2	1	0.14
(2,98)	1:3:A:GLU:H	1:3:A:GLU:HB2	6	0.14
(2,93)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HB3	3	0.14
(2,85)	1:24:A:PRO:HG2	1:24:A:PRO:HG3	3	0.14
(2,54)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD3	1	0.14
(2,24)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HB2	1	0.14
(2,24)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HB2	3	0.14
(2,24)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HB2	9	0.14
(1,513)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:H	6	0.14
(1,507)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HG2	3	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,492)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:H	10	0.14
(1,393)	1:23:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD2	6	0.14
(1,390)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	1	0.14
(1,380)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HG3	10	0.14
(1,344)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:H	6	0.14
(1,337)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:H	1	0.14
(1,331)	1:19:A:SER:H	1:20:A:GLY:H	5	0.14
(1,318)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HG3	3	0.14
(1,318)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HG3	4	0.14
(1,312)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HB2	9	0.14
(1,284)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE1	2	0.14
(1,284)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE2	2	0.14
(1,284)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE1	2	0.14
(1,284)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE2	2	0.14
(1,284)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE1	2	0.14
(1,284)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE2	2	0.14
(1,284)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE1	4	0.14
(1,284)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE2	4	0.14
(1,284)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE1	4	0.14
(1,284)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE2	4	0.14
(1,284)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE1	4	0.14
(1,284)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE2	4	0.14
(1,277)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HG	5	0.14
(1,277)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HG	5	0.14
(1,239)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HG3	8	0.14
(1,206)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD21	5	0.14
(1,206)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD22	5	0.14
(1,206)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD23	5	0.14
(1,205)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD11	7	0.14
(1,205)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD12	7	0.14
(1,205)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD13	7	0.14
(1,188)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HB2	1	0.14
(1,188)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HB2	9	0.14
(4,28)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HA	7	0.13
(4,28)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HA	7	0.13
(4,28)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HA	7	0.13
(4,27)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HB2	5	0.13
(4,27)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HB2	5	0.13
(4,27)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HB2	5	0.13
(4,12)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HG	2	0.13
(4,12)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HG	2	0.13
(4,9)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HB2	4	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,9)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HB2	10	0.13
(3,461)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD21	7	0.13
(3,461)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD22	7	0.13
(3,461)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD23	7	0.13
(3,373)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HB	9	0.13
(3,373)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HB	9	0.13
(3,373)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HB	9	0.13
(3,327)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:H	7	0.13
(3,327)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:H	7	0.13
(3,327)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:H	7	0.13
(3,312)	1:19:A:SER:H	1:20:A:GLY:H	4	0.13
(3,229)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HG3	1	0.13
(3,229)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HG3	7	0.13
(3,229)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HG3	10	0.13
(3,196)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD11	3	0.13
(3,196)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD12	3	0.13
(3,196)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD13	3	0.13
(2,435)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	6	0.13
(2,390)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD2	5	0.13
(2,390)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	5	0.13
(2,338)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:H	9	0.13
(2,276)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG3	10	0.13
(2,276)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG3	10	0.13
(2,274)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG2	3	0.13
(2,274)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG2	3	0.13
(2,263)	1:19:A:SER:HA	1:19:A:SER:HB3	9	0.13
(2,262)	1:19:A:SER:HA	1:19:A:SER:HB2	7	0.13
(2,258)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HG2	6	0.13
(2,258)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HG3	6	0.13
(2,258)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HG2	8	0.13
(2,258)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HG3	8	0.13
(2,237)	1:15:A:GLY:H	1:16:A:GLY:H	4	0.13
(2,236)	1:13:A:LYS:H	1:14:A:GLU:H	1	0.13
(2,236)	1:13:A:LYS:H	1:14:A:GLU:H	5	0.13
(2,236)	1:13:A:LYS:H	1:14:A:GLU:H	10	0.13
(2,213)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD11	7	0.13
(2,213)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD12	7	0.13
(2,213)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD13	7	0.13
(2,184)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD11	2	0.13
(2,184)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD12	2	0.13
(2,184)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD13	2	0.13
(2,169)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG21	5	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,169)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG22	5	0.13
(2,169)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG23	5	0.13
(2,150)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HG	5	0.13
(2,126)	1:6:A:ARG:HD2	1:6:A:ARG:HG3	1	0.13
(2,126)	1:6:A:ARG:HD2	1:6:A:ARG:HG3	2	0.13
(2,126)	1:6:A:ARG:HD2	1:6:A:ARG:HG3	5	0.13
(2,95)	1:3:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	10	0.13
(2,85)	1:24:A:PRO:HG2	1:24:A:PRO:HG3	6	0.13
(2,54)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD3	7	0.13
(2,24)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HB2	5	0.13
(1,503)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD21	7	0.13
(1,503)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD22	7	0.13
(1,503)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD23	7	0.13
(1,404)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HA	7	0.13
(1,404)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HA	7	0.13
(1,404)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HA	7	0.13
(1,400)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HB	9	0.13
(1,400)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HB	9	0.13
(1,400)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HB	9	0.13
(1,399)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HB2	5	0.13
(1,399)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HB2	5	0.13
(1,399)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HB2	5	0.13
(1,346)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:H	7	0.13
(1,346)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:H	7	0.13
(1,346)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:H	7	0.13
(1,331)	1:19:A:SER:H	1:20:A:GLY:H	4	0.13
(1,277)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HG	2	0.13
(1,277)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HG	2	0.13
(1,239)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HG3	1	0.13
(1,239)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HG3	7	0.13
(1,239)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HG3	10	0.13
(1,205)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD11	3	0.13
(1,205)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD12	3	0.13
(1,205)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD13	3	0.13
(1,188)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HB2	4	0.13
(1,188)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HB2	10	0.13
(4,10)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD21	4	0.12
(4,10)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD22	4	0.12
(4,10)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD23	4	0.12
(4,4)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:H	7	0.12
(3,451)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:H	2	0.12
(3,423)	1:23:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	4	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,423)	1:23:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	5	0.12
(3,422)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HG2	6	0.12
(3,422)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HG3	6	0.12
(3,389)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG12	1	0.12
(3,389)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG12	1	0.12
(3,389)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG12	1	0.12
(3,389)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG12	6	0.12
(3,389)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG12	6	0.12
(3,389)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG12	6	0.12
(3,386)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HB2	8	0.12
(3,386)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HB2	8	0.12
(3,386)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HB2	8	0.12
(3,373)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HB	3	0.12
(3,373)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HB	3	0.12
(3,373)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HB	3	0.12
(3,364)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	4	0.12
(3,275)	1:11:A:TRP:HD1	1:23:A:PRO:HA	6	0.12
(3,271)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE1	5	0.12
(3,271)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE2	5	0.12
(3,271)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE1	5	0.12
(3,271)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE2	5	0.12
(3,271)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE1	5	0.12
(3,271)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE2	5	0.12
(3,271)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE1	8	0.12
(3,271)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE2	8	0.12
(3,271)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE1	8	0.12
(3,271)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE2	8	0.12
(3,271)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE1	8	0.12
(3,271)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE2	8	0.12
(3,229)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HG3	5	0.12
(3,229)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HG3	9	0.12
(3,206)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HB3	8	0.12
(3,173)	1:9:A:ILE:HG13	1:9:A:ILE:HG21	7	0.12
(3,173)	1:9:A:ILE:HG13	1:9:A:ILE:HG22	7	0.12
(3,173)	1:9:A:ILE:HG13	1:9:A:ILE:HG23	7	0.12
(3,42)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HG3	8	0.12
(3,41)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HG2	8	0.12
(3,39)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HB2	4	0.12
(2,496)	1:3:A:GLU:HA	1:6:A:ARG:HB2	8	0.12
(2,486)	1:23:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HD2	3	0.12
(2,483)	1:7:A:LEU:HD21	1:10:A:GLN:HG2	6	0.12
(2,483)	1:7:A:LEU:HD22	1:10:A:GLN:HG2	6	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,483)	1:7:A:LEU:HD23	1:10:A:GLN:HG2	6	0.12
(2,483)	1:7:A:LEU:HD21	1:10:A:GLN:HG3	6	0.12
(2,483)	1:7:A:LEU:HD22	1:10:A:GLN:HG3	6	0.12
(2,483)	1:7:A:LEU:HD23	1:10:A:GLN:HG3	6	0.12
(2,482)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HB2	8	0.12
(2,437)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG12	9	0.12
(2,437)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG12	9	0.12
(2,435)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	8	0.12
(2,406)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	5	0.12
(2,406)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	5	0.12
(2,406)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	5	0.12
(2,396)	1:3:A:GLU:HB3	1:3:A:GLU:HG2	4	0.12
(2,396)	1:3:A:GLU:HB3	1:3:A:GLU:HG3	4	0.12
(2,396)	1:3:A:GLU:HB3	1:3:A:GLU:HG2	9	0.12
(2,396)	1:3:A:GLU:HB3	1:3:A:GLU:HG3	9	0.12
(2,370)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:H	3	0.12
(2,370)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:H	3	0.12
(2,370)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:H	3	0.12
(2,369)	1:23:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	4	0.12
(2,344)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:H	7	0.12
(2,329)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:H	3	0.12
(2,329)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:H	3	0.12
(2,329)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:H	5	0.12
(2,329)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:H	5	0.12
(2,328)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:H	1	0.12
(2,285)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB3	3	0.12
(2,285)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB3	3	0.12
(2,241)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HB3	1	0.12
(2,241)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HB3	3	0.12
(2,241)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HB3	4	0.12
(2,241)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HB3	5	0.12
(2,241)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HB3	9	0.12
(2,236)	1:13:A:LYS:H	1:14:A:GLU:H	7	0.12
(2,215)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HG	4	0.12
(2,215)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HG	5	0.12
(2,213)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD11	10	0.12
(2,213)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD12	10	0.12
(2,213)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD13	10	0.12
(2,184)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD11	8	0.12
(2,184)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD12	8	0.12
(2,184)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD13	8	0.12
(2,169)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG21	2	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,169)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG22	2	0.12
(2,169)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG23	2	0.12
(2,169)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG21	4	0.12
(2,169)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG22	4	0.12
(2,169)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG23	4	0.12
(2,169)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG21	6	0.12
(2,169)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG22	6	0.12
(2,169)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG23	6	0.12
(2,169)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG21	9	0.12
(2,169)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG22	9	0.12
(2,169)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG23	9	0.12
(2,169)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG21	10	0.12
(2,169)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG22	10	0.12
(2,169)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG23	10	0.12
(2,168)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG13	6	0.12
(2,168)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG13	9	0.12
(2,142)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HB3	2	0.12
(2,142)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HB3	4	0.12
(2,120)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG3	3	0.12
(2,112)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG11	9	0.12
(2,112)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG12	9	0.12
(2,112)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG13	9	0.12
(2,99)	1:3:A:GLU:H	1:3:A:GLU:HB3	1	0.12
(2,99)	1:3:A:GLU:H	1:3:A:GLU:HB3	5	0.12
(2,86)	1:24:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HG3	1	0.12
(2,80)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HG3	8	0.12
(2,56)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HG2	4	0.12
(2,56)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HG3	4	0.12
(2,24)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HB2	6	0.12
(1,492)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:H	2	0.12
(1,458)	1:23:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	4	0.12
(1,458)	1:23:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	5	0.12
(1,457)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HG2	6	0.12
(1,457)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HG3	6	0.12
(1,419)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG12	1	0.12
(1,419)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG12	1	0.12
(1,419)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG12	1	0.12
(1,419)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG12	6	0.12
(1,419)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG12	6	0.12
(1,419)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG12	6	0.12
(1,415)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HB2	8	0.12
(1,415)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HB2	8	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,415)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HB2	8	0.12
(1,400)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HB	3	0.12
(1,400)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HB	3	0.12
(1,400)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HB	3	0.12
(1,390)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	4	0.12
(1,290)	1:11:A:TRP:HD1	1:23:A:PRO:HA	6	0.12
(1,284)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE1	5	0.12
(1,284)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE2	5	0.12
(1,284)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE1	5	0.12
(1,284)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE2	5	0.12
(1,284)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE1	5	0.12
(1,284)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE2	5	0.12
(1,284)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE1	8	0.12
(1,284)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE2	8	0.12
(1,284)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE1	8	0.12
(1,284)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE2	8	0.12
(1,284)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE1	8	0.12
(1,284)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE2	8	0.12
(1,239)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HG3	5	0.12
(1,239)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HG3	9	0.12
(1,216)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HB3	8	0.12
(1,206)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD21	4	0.12
(1,206)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD22	4	0.12
(1,206)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD23	4	0.12
(1,179)	1:9:A:ILE:HG13	1:9:A:ILE:HG21	7	0.12
(1,179)	1:9:A:ILE:HG13	1:9:A:ILE:HG22	7	0.12
(1,179)	1:9:A:ILE:HG13	1:9:A:ILE:HG23	7	0.12
(1,154)	1:7:A:LEU:HA	1:8:A:TYR:H	7	0.12
(1,42)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HG3	8	0.12
(1,41)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HG2	8	0.12
(1,39)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HB2	4	0.12
(4,26)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HG3	9	0.11
(4,12)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HG	8	0.11
(4,12)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HG	8	0.11
(3,459)	1:3:A:GLU:HA	1:6:A:ARG:HB2	3	0.11
(3,451)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:H	3	0.11
(3,414)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB2	9	0.11
(3,414)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB2	9	0.11
(3,389)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG12	7	0.11
(3,389)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG12	7	0.11
(3,389)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG12	7	0.11
(3,389)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG12	9	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,389)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG12	9	0.11
(3,389)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG12	9	0.11
(3,352)	1:11:A:TRP:HA	1:14:A:GLU:HB3	8	0.11
(3,327)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:H	2	0.11
(3,327)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:H	2	0.11
(3,327)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:H	2	0.11
(3,325)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:H	9	0.11
(3,320)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:H	10	0.11
(3,312)	1:19:A:SER:H	1:20:A:GLY:H	10	0.11
(3,297)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HB2	3	0.11
(3,297)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HB2	5	0.11
(3,274)	1:11:A:TRP:HD1	1:24:A:PRO:HD3	1	0.11
(3,263)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG2	5	0.11
(3,263)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG2	5	0.11
(3,229)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HG3	2	0.11
(3,206)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HB3	2	0.11
(3,206)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HB3	4	0.11
(3,206)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HB3	5	0.11
(3,196)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD11	10	0.11
(3,196)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD12	10	0.11
(3,196)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD13	10	0.11
(3,148)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB3	3	0.11
(3,148)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB3	6	0.11
(3,135)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HG3	3	0.11
(3,42)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HG3	7	0.11
(3,41)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HG2	10	0.11
(3,39)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HB2	3	0.11
(2,438)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB2	4	0.11
(2,438)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB2	4	0.11
(2,424)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG13	7	0.11
(2,424)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG13	7	0.11
(2,424)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG13	7	0.11
(2,396)	1:3:A:GLU:HB3	1:3:A:GLU:HG2	3	0.11
(2,396)	1:3:A:GLU:HB3	1:3:A:GLU:HG3	3	0.11
(2,396)	1:3:A:GLU:HB3	1:3:A:GLU:HG2	6	0.11
(2,396)	1:3:A:GLU:HB3	1:3:A:GLU:HG3	6	0.11
(2,396)	1:3:A:GLU:HB3	1:3:A:GLU:HG2	10	0.11
(2,396)	1:3:A:GLU:HB3	1:3:A:GLU:HG3	10	0.11
(2,351)	1:12:A:LEU:HA	1:16:A:GLY:H	8	0.11
(2,320)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB3	6	0.11
(2,295)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HA	4	0.11
(2,266)	1:19:A:SER:H	1:19:A:SER:HB3	9	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,263)	1:19:A:SER:HA	1:19:A:SER:HB3	5	0.11
(2,241)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HB3	8	0.11
(2,215)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HG	8	0.11
(2,207)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HG	10	0.11
(2,169)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG21	3	0.11
(2,169)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG22	3	0.11
(2,169)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG23	3	0.11
(2,169)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG21	8	0.11
(2,169)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG22	8	0.11
(2,169)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG23	8	0.11
(2,168)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG13	4	0.11
(2,149)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB2	1	0.11
(2,145)	1:7:A:LEU:HD11	1:7:A:LEU:HG	1	0.11
(2,145)	1:7:A:LEU:HD12	1:7:A:LEU:HG	1	0.11
(2,145)	1:7:A:LEU:HD13	1:7:A:LEU:HG	1	0.11
(2,145)	1:7:A:LEU:HD11	1:7:A:LEU:HG	2	0.11
(2,145)	1:7:A:LEU:HD12	1:7:A:LEU:HG	2	0.11
(2,145)	1:7:A:LEU:HD13	1:7:A:LEU:HG	2	0.11
(2,145)	1:7:A:LEU:HD11	1:7:A:LEU:HG	7	0.11
(2,145)	1:7:A:LEU:HD12	1:7:A:LEU:HG	7	0.11
(2,145)	1:7:A:LEU:HD13	1:7:A:LEU:HG	7	0.11
(2,145)	1:7:A:LEU:HD11	1:7:A:LEU:HG	9	0.11
(2,145)	1:7:A:LEU:HD12	1:7:A:LEU:HG	9	0.11
(2,145)	1:7:A:LEU:HD13	1:7:A:LEU:HG	9	0.11
(2,145)	1:7:A:LEU:HD11	1:7:A:LEU:HG	10	0.11
(2,145)	1:7:A:LEU:HD12	1:7:A:LEU:HG	10	0.11
(2,145)	1:7:A:LEU:HD13	1:7:A:LEU:HG	10	0.11
(2,142)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HB3	1	0.11
(2,142)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HB3	10	0.11
(2,130)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HG2	7	0.11
(2,99)	1:3:A:GLU:H	1:3:A:GLU:HB3	10	0.11
(2,88)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HB2	4	0.11
(2,88)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HB3	4	0.11
(2,85)	1:24:A:PRO:HG2	1:24:A:PRO:HG3	7	0.11
(2,85)	1:24:A:PRO:HG2	1:24:A:PRO:HG3	9	0.11
(2,54)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD3	5	0.11
(2,54)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD3	8	0.11
(2,54)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD3	10	0.11
(2,24)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HB2	8	0.11
(2,24)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HB2	10	0.11
(2,3)	1:3:A:GLU:H	1:3:A:GLU:HA	1	0.11
(2,3)	1:3:A:GLU:H	1:3:A:GLU:HA	10	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,500)	1:3:A:GLU:HA	1:6:A:ARG:HB2	3	0.11
(1,492)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:H	3	0.11
(1,449)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB2	9	0.11
(1,449)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB2	9	0.11
(1,419)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG12	7	0.11
(1,419)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG12	7	0.11
(1,419)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG12	7	0.11
(1,419)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG12	9	0.11
(1,419)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG12	9	0.11
(1,419)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG12	9	0.11
(1,380)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HG3	9	0.11
(1,377)	1:11:A:TRP:HA	1:14:A:GLU:HB3	8	0.11
(1,346)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:H	2	0.11
(1,346)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:H	2	0.11
(1,346)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:H	2	0.11
(1,344)	1:6:A:ARG:HB2	1:7:A:LEU:H	9	0.11
(1,339)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:H	10	0.11
(1,331)	1:19:A:SER:H	1:20:A:GLY:H	10	0.11
(1,312)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HB2	3	0.11
(1,312)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HB2	5	0.11
(1,289)	1:11:A:TRP:HD1	1:24:A:PRO:HD3	1	0.11
(1,277)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HG	8	0.11
(1,277)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HG	8	0.11
(1,274)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG2	5	0.11
(1,274)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG2	5	0.11
(1,239)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HG3	2	0.11
(1,216)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HB3	2	0.11
(1,216)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HB3	4	0.11
(1,216)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HB3	5	0.11
(1,205)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD11	10	0.11
(1,205)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD12	10	0.11
(1,205)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD13	10	0.11
(1,151)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB3	3	0.11
(1,151)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB3	6	0.11
(1,137)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HG3	3	0.11
(1,42)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HG3	7	0.11
(1,41)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HG2	10	0.11
(1,39)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HB2	3	0.11
(3,297)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HB2	10	0.1
(3,278)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB3	8	0.1
(3,206)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HB3	1	0.1
(3,206)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HB3	6	0.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,135)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HG3	4	0.1
(3,37)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HG3	6	0.1
(2,356)	1:7:A:LEU:HB2	1:8:A:TYR:H	7	0.1
(2,329)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:H	10	0.1
(2,329)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:H	10	0.1
(2,215)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HG	2	0.1
(2,207)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HG	3	0.1
(2,168)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG13	10	0.1
(2,149)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB2	2	0.1
(2,145)	1:7:A:LEU:HD11	1:7:A:LEU:HG	4	0.1
(2,145)	1:7:A:LEU:HD12	1:7:A:LEU:HG	4	0.1
(2,145)	1:7:A:LEU:HD13	1:7:A:LEU:HG	4	0.1
(2,145)	1:7:A:LEU:HD11	1:7:A:LEU:HG	6	0.1
(2,145)	1:7:A:LEU:HD12	1:7:A:LEU:HG	6	0.1
(2,145)	1:7:A:LEU:HD13	1:7:A:LEU:HG	6	0.1
(2,113)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	4	0.1
(2,113)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	4	0.1
(2,113)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	4	0.1
(2,99)	1:3:A:GLU:H	1:3:A:GLU:HB3	3	0.1
(2,98)	1:3:A:GLU:H	1:3:A:GLU:HB2	9	0.1
(2,84)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HG3	4	0.1
(2,80)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HG3	2	0.1
(2,80)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HG3	4	0.1
(2,68)	1:23:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD3	8	0.1
(2,40)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HB3	4	0.1
(2,24)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HB2	2	0.1
(1,312)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HB2	10	0.1
(1,293)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB3	8	0.1
(1,216)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HB3	1	0.1
(1,216)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HB3	6	0.1
(1,137)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HG3	4	0.1
(1,37)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HG3	6	0.1

10 Dihedral-angle violation analysis ⓘ

No dihedral-angle restraints found