



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 4, 2026 – 11:43 PM UTC

PDB ID : 9G21 / pdb_00009g21
BMRB ID : 34931
Title : Trp-cage fortified Tc5b-Exenatide chimera (Ex4-Tc5bER) at 321K
Authors : Horvath, D.
Deposited on : 2024-07-10

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

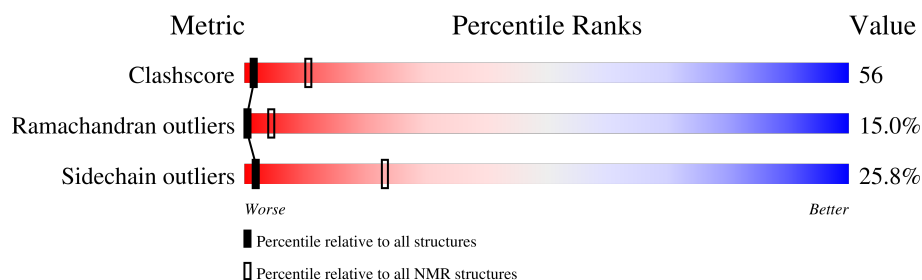
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment is 43%.

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	48% 32% 20%

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 10 models. Model 2 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:1-A:25 (25)	1.97	2

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

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

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

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

3 Entry composition

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

- Molecule 1 is a protein called Exendin-4.

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

There are 4 discrepancies between the modelled and reference sequences:

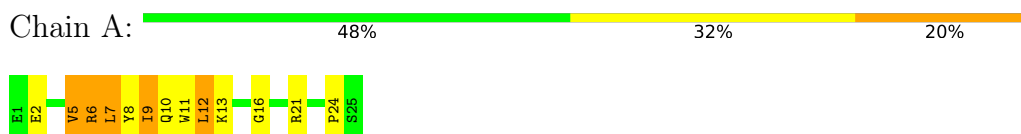
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	8	TYR	PHE	engineered mutation	UNP P26349
A	10	GLN	GLU	engineered mutation	UNP P26349
A	14	GLU	ASN	engineered mutation	UNP P26349
A	21	ARG	ALA	engineered mutation	UNP P26349

4 Residue-property plots [i](#)

4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

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

- Molecule 1: Exendin-4

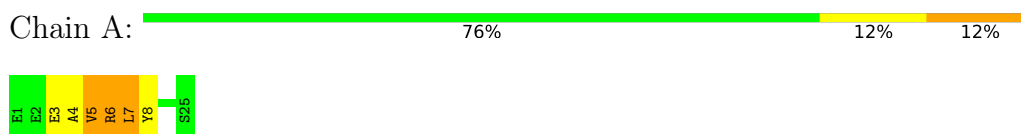


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

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

4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: Exendin-4



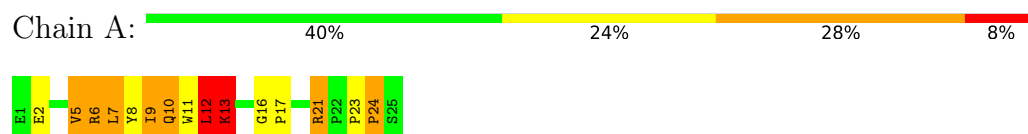
4.2.2 Score per residue for model 2 (medoid)

- Molecule 1: Exendin-4



4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Exendin-4



4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Exendin-4



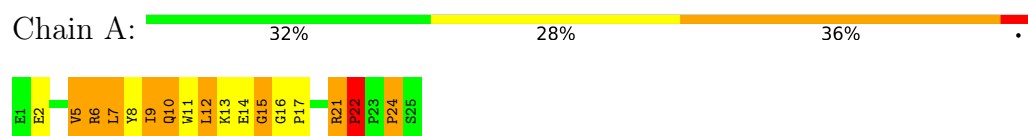
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Exendin-4



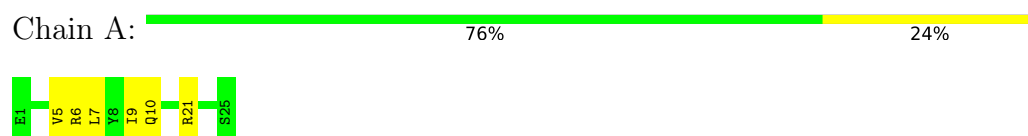
4.2.6 Score per residue for model 6

- 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

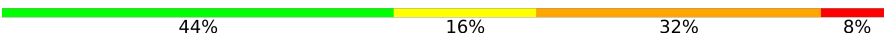
- Molecule 1: Exendin-4

Chain A:  64% 28% 8%



4.2.9 Score per residue for model 9

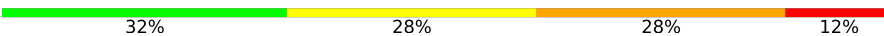
- Molecule 1: Exendin-4

Chain A:  44% 16% 32% 8%



4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Exendin-4

Chain A:  32% 28% 28% 12%



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	142
Number of shifts mapped to atoms	142
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Assignment completeness (well-defined parts)	43%

6 Model quality

6.1 Standard geometry

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	#Z>5	RMSZ	#Z>5
1	A	0.92±0.26	0±1/96 (0.3± 0.7%)	1.19±0.13	1±2/127 (0.9± 1.6%)
All	All	0.96	3/1905 (0.2%)	1.19	11/2569 (0.4%)

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

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	8	TYR	CE1-CZ	15.22	1.74	1.38	10	2
1	A	8	TYR	CE2-CZ	-13.98	1.04	1.38	10	1

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

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	8	TYR	OH-CZ-CE2	8.22	144.56	119.90	10	1
1	A	8	TYR	CE1-CZ-OH	-8.04	95.78	119.90	10	1
1	A	21	ARG	CA-C-N	6.46	124.38	119.66	3	2
1	A	21	ARG	C-N-CA	6.46	124.38	119.66	3	2
1	A	8	TYR	CZ-CE2-CD2	5.28	129.10	119.60	10	1
1	A	10	GLN	N-CA-C	-5.18	106.81	113.02	4	1
1	A	6	ARG	N-CA-C	-5.10	107.71	114.04	2	1
1	A	23	PRO	CA-C-N	5.08	124.53	119.24	10	1
1	A	23	PRO	C-N-CA	5.08	124.53	119.24	10	1

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

6.2 Too-close contacts ⓘ

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	197	191	191	19±11
All	All	1970	1910	1400	190

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 56.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:8:TYR:CE1	1:A:8:TYR:CZ	1.73	1.74	10	1
1:A:9:ILE:HG22	1:A:12:LEU:HD21	0.88	1.44	2	4
1:A:9:ILE:HA	1:A:12:LEU:CD2	0.81	2.05	2	3
1:A:12:LEU:N	1:A:16:GLY:HA3	0.75	1.96	5	2
1:A:8:TYR:CE1	1:A:8:TYR:OH	0.73	2.40	10	1
1:A:8:TYR:CE2	1:A:9:ILE:HG23	0.73	2.18	5	3
1:A:12:LEU:O	1:A:13:LYS:HG3	0.72	1.83	3	1
1:A:2:GLU:HB3	1:A:5:VAL:HG23	0.72	1.58	6	4
1:A:8:TYR:CD2	1:A:9:ILE:HG23	0.72	2.20	5	4
1:A:11:TRP:CE3	1:A:12:LEU:HD22	0.72	2.19	10	2
1:A:8:TYR:HA	1:A:24:PRO:HG2	0.71	1.63	2	4
1:A:9:ILE:HA	1:A:12:LEU:HD21	0.71	1.62	4	4
1:A:11:TRP:CZ2	1:A:23:PRO:HB3	0.70	2.21	5	2
1:A:8:TYR:CE2	1:A:9:ILE:HD12	0.69	2.22	3	1
1:A:9:ILE:CG2	1:A:13:LYS:HA	0.69	2.17	9	1
1:A:8:TYR:HA	1:A:24:PRO:CG	0.69	2.17	4	5
1:A:8:TYR:CD2	1:A:9:ILE:HD13	0.69	2.22	6	1
1:A:11:TRP:CE3	1:A:12:LEU:HB3	0.69	2.23	6	1
1:A:6:ARG:O	1:A:10:GLN:HB2	0.68	1.88	4	4
1:A:9:ILE:O	1:A:13:LYS:HD2	0.67	1.90	9	1
1:A:8:TYR:CD2	1:A:9:ILE:HD12	0.67	2.24	3	1
1:A:9:ILE:HG22	1:A:13:LYS:HA	0.66	1.67	9	1
1:A:8:TYR:HD2	1:A:9:ILE:HG23	0.66	1.50	10	1
1:A:6:ARG:HD3	1:A:6:ARG:C	0.64	2.18	1	2
1:A:9:ILE:CG2	1:A:12:LEU:HD21	0.64	2.23	4	4
1:A:8:TYR:HD2	1:A:9:ILE:HD13	0.63	1.54	6	1
1:A:7:LEU:O	1:A:10:GLN:HB3	0.62	1.94	2	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:6:ARG:C	1:A:6:ARG:HD3	0.61	2.19	6	5
1:A:12:LEU:HD23	1:A:12:LEU:H	0.61	1.55	6	2
1:A:12:LEU:H	1:A:12:LEU:HD22	0.61	1.56	9	1
1:A:8:TYR:CD2	1:A:9:ILE:CD1	0.60	2.85	6	2
1:A:7:LEU:O	1:A:7:LEU:HD22	0.59	1.97	2	1
1:A:7:LEU:HD13	1:A:24:PRO:HG3	0.58	1.74	10	1
1:A:7:LEU:HD22	1:A:7:LEU:O	0.58	1.98	10	4
1:A:6:ARG:O	1:A:10:GLN:HB3	0.58	1.98	10	1
1:A:8:TYR:CB	1:A:24:PRO:HG2	0.58	2.29	2	3
1:A:11:TRP:CZ3	1:A:24:PRO:HD3	0.58	2.34	3	2
1:A:5:VAL:HG12	1:A:9:ILE:CG1	0.57	2.30	2	4
1:A:9:ILE:CB	1:A:12:LEU:HD21	0.57	2.30	10	3
1:A:5:VAL:H	1:A:8:TYR:HB3	0.56	1.61	1	1
1:A:8:TYR:CA	1:A:24:PRO:HG2	0.56	2.28	2	3
1:A:9:ILE:CA	1:A:12:LEU:HD21	0.56	2.30	10	3
1:A:8:TYR:CE2	1:A:9:ILE:CD1	0.55	2.89	3	2
1:A:21:ARG:N	1:A:22:PRO:CD	0.55	2.69	6	1
1:A:4:ALA:C	1:A:5:VAL:HG23	0.54	2.27	1	1
1:A:9:ILE:HG22	1:A:12:LEU:HD11	0.54	1.79	10	2
1:A:5:VAL:HG12	1:A:9:ILE:HG12	0.53	1.80	9	3
1:A:12:LEU:HD23	1:A:12:LEU:N	0.53	2.19	4	3
1:A:3:GLU:O	1:A:6:ARG:HG3	0.52	2.03	1	1
1:A:5:VAL:HG12	1:A:9:ILE:HG13	0.52	1.79	10	1
1:A:11:TRP:C	1:A:12:LEU:HD23	0.52	2.30	10	2
1:A:6:ARG:HG3	1:A:7:LEU:N	0.52	2.20	5	3
1:A:4:ALA:O	1:A:8:TYR:HB3	0.52	2.05	4	2
1:A:5:VAL:N	1:A:8:TYR:H	0.52	2.03	1	1
1:A:6:ARG:O	1:A:6:ARG:HD3	0.52	2.05	10	2
1:A:12:LEU:H	1:A:12:LEU:CD2	0.51	2.18	6	1
1:A:8:TYR:CD1	1:A:24:PRO:HG2	0.51	2.40	10	3
1:A:12:LEU:HD22	1:A:12:LEU:N	0.51	2.18	9	2
1:A:2:GLU:HB2	1:A:5:VAL:HG23	0.50	1.83	4	1
1:A:9:ILE:HG13	1:A:13:LYS:CB	0.50	2.36	3	1
1:A:9:ILE:HD12	1:A:12:LEU:HD21	0.49	1.84	6	1
1:A:3:GLU:O	1:A:7:LEU:HB3	0.49	2.08	9	1
1:A:9:ILE:CB	1:A:13:LYS:HA	0.49	2.37	9	1
1:A:7:LEU:HD22	1:A:7:LEU:C	0.48	2.32	2	4
1:A:11:TRP:O	1:A:16:GLY:HA2	0.48	2.07	6	1
1:A:11:TRP:CD1	1:A:21:ARG:HG2	0.48	2.44	3	2
1:A:21:ARG:N	1:A:22:PRO:HD3	0.48	2.23	6	1
1:A:11:TRP:CD1	1:A:21:ARG:HG3	0.47	2.44	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:5:VAL:HA	1:A:8:TYR:HB3	0.47	1.84	10	1
1:A:8:TYR:CE1	1:A:8:TYR:CE2	0.47	2.40	10	1
1:A:2:GLU:C	1:A:4:ALA:H	0.46	2.18	10	1
1:A:12:LEU:CD2	1:A:12:LEU:N	0.46	2.79	4	3
1:A:8:TYR:HD1	1:A:24:PRO:HG2	0.46	1.69	10	1
1:A:8:TYR:HB2	1:A:24:PRO:HG2	0.45	1.87	6	2
1:A:12:LEU:C	1:A:16:GLY:HA2	0.45	2.37	3	1
1:A:4:ALA:HA	1:A:7:LEU:HB3	0.45	1.87	1	1
1:A:6:ARG:HD2	1:A:6:ARG:C	0.45	2.37	5	1
1:A:8:TYR:CD2	1:A:9:ILE:N	0.45	2.85	5	1
1:A:6:ARG:C	1:A:6:ARG:CD	0.44	2.88	6	2
1:A:12:LEU:C	1:A:16:GLY:HA3	0.44	2.37	9	1
1:A:8:TYR:CD2	1:A:8:TYR:C	0.44	2.95	2	3
1:A:9:ILE:O	1:A:9:ILE:HG22	0.44	2.12	3	2
1:A:11:TRP:C	1:A:16:GLY:HA3	0.44	2.37	10	1
1:A:12:LEU:HG	1:A:13:LYS:N	0.43	2.27	5	2
1:A:7:LEU:O	1:A:11:TRP:CZ3	0.43	2.72	3	2
1:A:9:ILE:HG13	1:A:13:LYS:HB3	0.43	1.91	3	1
1:A:5:VAL:H	1:A:8:TYR:CB	0.43	2.25	1	1
1:A:6:ARG:HD3	1:A:6:ARG:O	0.43	2.13	1	1
1:A:5:VAL:O	1:A:9:ILE:HD11	0.42	2.13	5	2
1:A:12:LEU:O	1:A:13:LYS:C	0.42	2.63	9	1
1:A:4:ALA:O	1:A:5:VAL:HG13	0.42	2.15	10	1
1:A:8:TYR:CE2	1:A:9:ILE:CG2	0.42	3.01	2	2
1:A:22:PRO:HA	1:A:23:PRO:HD3	0.42	1.77	9	1
1:A:23:PRO:HB2	1:A:24:PRO:CD	0.41	2.45	3	1
1:A:8:TYR:CE2	1:A:9:ILE:HD13	0.41	2.50	6	1
1:A:15:GLY:O	1:A:17:PRO:HD3	0.41	2.16	6	1
1:A:6:ARG:CG	1:A:7:LEU:N	0.41	2.82	5	1
1:A:9:ILE:HG13	1:A:13:LYS:HB2	0.41	1.93	6	1
1:A:12:LEU:CA	1:A:16:GLY:HA2	0.41	2.46	3	1
1:A:12:LEU:CG	1:A:13:LYS:N	0.41	2.84	5	1
1:A:21:ARG:HG3	1:A:22:PRO:CD	0.41	2.46	10	1
1:A:12:LEU:CD2	1:A:12:LEU:C	0.40	2.94	9	1
1:A:13:LYS:N	1:A:16:GLY:HA2	0.40	2.31	3	1
1:A:5:VAL:N	1:A:8:TYR:HB3	0.40	2.31	1	1
1:A:9:ILE:HG13	1:A:13:LYS:CG	0.40	2.46	3	1

6.3 Torsion angles

6.3.1 Protein backbone

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	23/25 (92%)	11±3 (47±13%)	7±2 (32±9%)	3±2 (14±8%)	0	5
All	All	213/250 (85%)	108 (51%)	73 (34%)	32 (15%)	0	4

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

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	24	PRO	6
1	A	5	VAL	4
1	A	9	ILE	4
1	A	12	LEU	3
1	A	21	ARG	3
1	A	14	GLU	2
1	A	10	GLN	2
1	A	13	LYS	2
1	A	17	PRO	2
1	A	8	TYR	1
1	A	15	GLY	1
1	A	22	PRO	1
1	A	16	GLY	1

6.3.2 Protein sidechains

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	21/21 (100%)	15±3 (70±12%)	5±2 (24±8%)	2	26
All	All	198/210 (94%)	147 (74%)	51 (26%)	2	23

All 10 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	5	VAL	10
1	A	7	LEU	10
1	A	6	ARG	9
1	A	9	ILE	6
1	A	12	LEU	5
1	A	11	TRP	4
1	A	10	GLN	3
1	A	13	LYS	2
1	A	1	GLU	1
1	A	22	PRO	1

6.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no oligosaccharides in this entry.

6.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation [i](#)

The completeness of assignment taking into account all chemical shift lists is 43% for the well-defined parts and 43% for the entire structure.

7.1 Chemical shift list 1

File name: working_cs.cif

Chemical shift list name: *nef_chemical_shift_list_ShiftList_1*

7.1.1 Bookkeeping [i](#)

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

Total number of shifts	142
Number of shifts mapped to atoms	142
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Number of shift outliers (ShiftChecker)	1

7.1.2 Chemical shift referencing [i](#)

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

7.1.3 Completeness of resonance assignments [i](#)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the well-defined regions of the structure. The overall completeness is 43%, i.e. 142 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	31/120 (26%)	31/49 (63%)	0/50 (0%)	0/21 (0%)
Sidechain	102/191 (53%)	102/123 (83%)	0/60 (0%)	0/8 (0%)
Aromatic	9/21 (43%)	9/10 (90%)	0/10 (0%)	0/1 (0%)
Overall	142/332 (43%)	142/182 (78%)	0/120 (0%)	0/30 (0%)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 43%, i.e. 142 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	31/120 (26%)	31/49 (63%)	0/50 (0%)	0/21 (0%)
Sidechain	102/191 (53%)	102/123 (83%)	0/60 (0%)	0/8 (0%)
Aromatic	9/21 (43%)	9/10 (90%)	0/10 (0%)	0/1 (0%)
Overall	142/332 (43%)	142/182 (78%)	0/120 (0%)	0/30 (0%)

7.1.4 Statistically unusual chemical shifts [i](#)

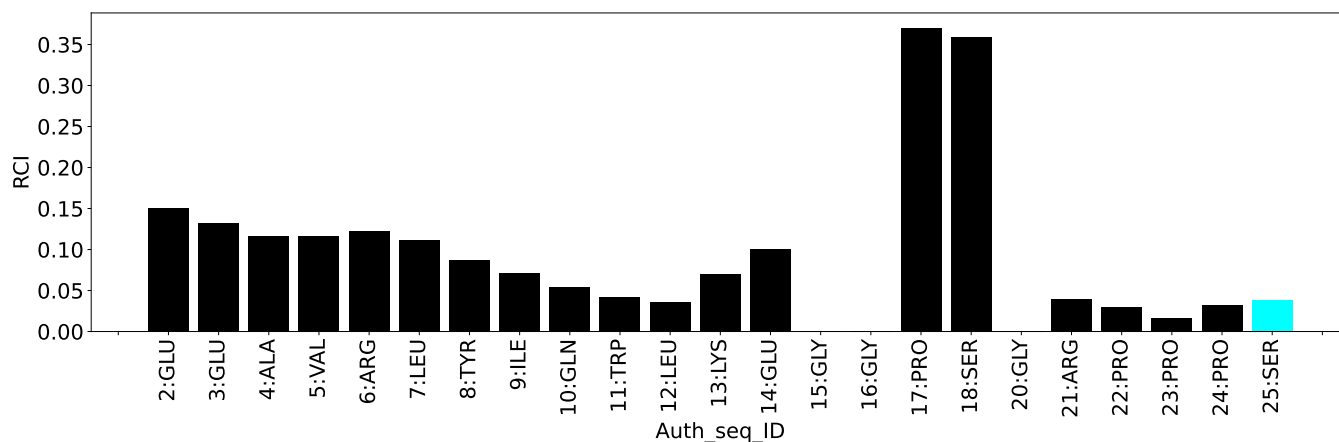
The following table lists the statistically unusual chemical shifts. These are statistical measures, and large deviations from the mean do not necessarily imply incorrect assignments. Molecules containing paramagnetic centres or hemes are expected to give rise to anomalous chemical shifts.

List Id	Chain	Res	Type	Atom	Shift, ppm	Expected range, ppm	Z-score
1	A	16	GLY	HA2	2.07	2.15 – 5.77	-5.2

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	663
Intra-residue ($ i-j =0$)	399
Sequential ($ i-j =1$)	111
Medium range ($ i-j >1$ and $ i-j <5$)	105
Long range ($ i-j \geq 5$)	48
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	26.5
Number of long range restraints per residue ¹	1.9

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)	37.3	0.2
0.2-0.5 (Medium)	78.5	0.5
>0.5 (Large)	123.5	4.02

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 ⓘ

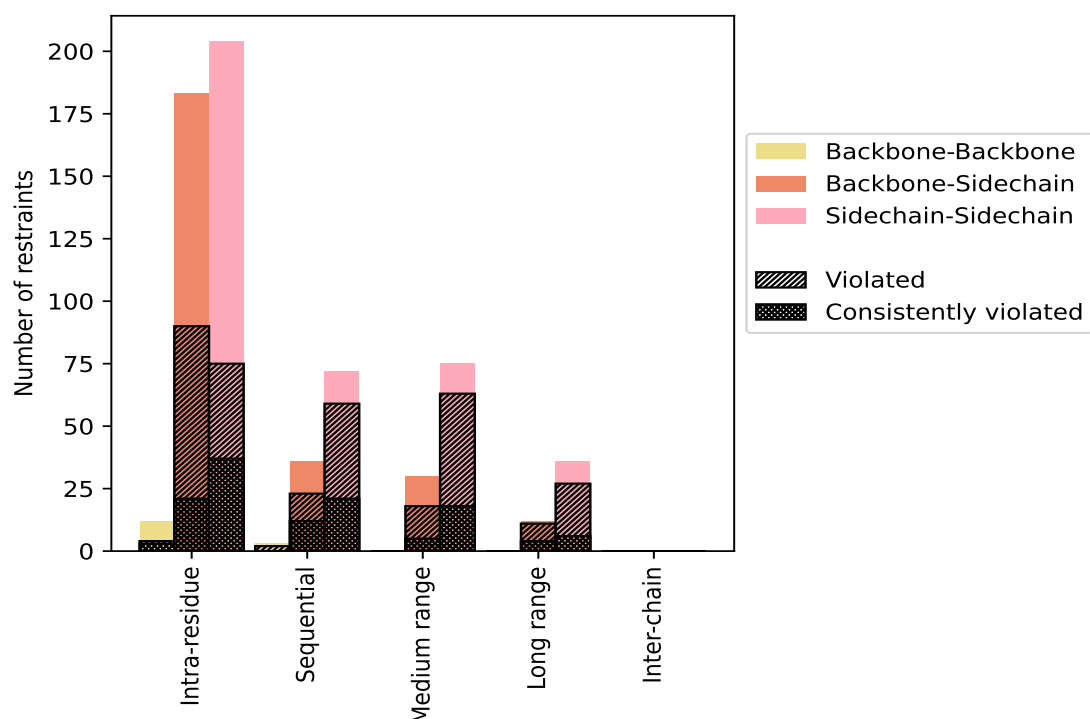
9.1 Summary of distance violations ⓘ

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 ($i-j =0$)	399	60.2	169	42.4	25.5	61	15.3	9.2
Backbone-Backbone	12	1.8	4	33.3	0.6	3	25.0	0.5
Backbone-Sidechain	183	27.6	90	49.2	13.6	21	11.5	3.2
Sidechain-Sidechain	204	30.8	75	36.8	11.3	37	18.1	5.6
Sequential ($i-j =1$)	111	16.7	84	75.7	12.7	33	29.7	5.0
Backbone-Backbone	3	0.5	2	66.7	0.3	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	36	5.4	23	63.9	3.5	12	33.3	1.8
Sidechain-Sidechain	72	10.9	59	81.9	8.9	21	29.2	3.2
Medium range ($i-j >1$ & $i-j <5$)	105	15.8	81	77.1	12.2	23	21.9	3.5
Backbone-Backbone	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	30	4.5	18	60.0	2.7	5	16.7	0.8
Sidechain-Sidechain	75	11.3	63	84.0	9.5	18	24.0	2.7
Long range ($i-j \geq 5$)	48	7.2	38	79.2	5.7	10	20.8	1.5
Backbone-Backbone	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	12	1.8	11	91.7	1.7	4	33.3	0.6
Sidechain-Sidechain	36	5.4	27	75.0	4.1	6	16.7	0.9
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	663	100.0	372	56.1	56.1	127	19.2	19.2
Backbone-Backbone	15	2.3	6	40.0	0.9	3	20.0	0.5
Backbone-Sidechain	261	39.4	142	54.4	21.4	42	16.1	6.3
Sidechain-Sidechain	387	58.4	224	57.9	33.8	82	21.2	12.4

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

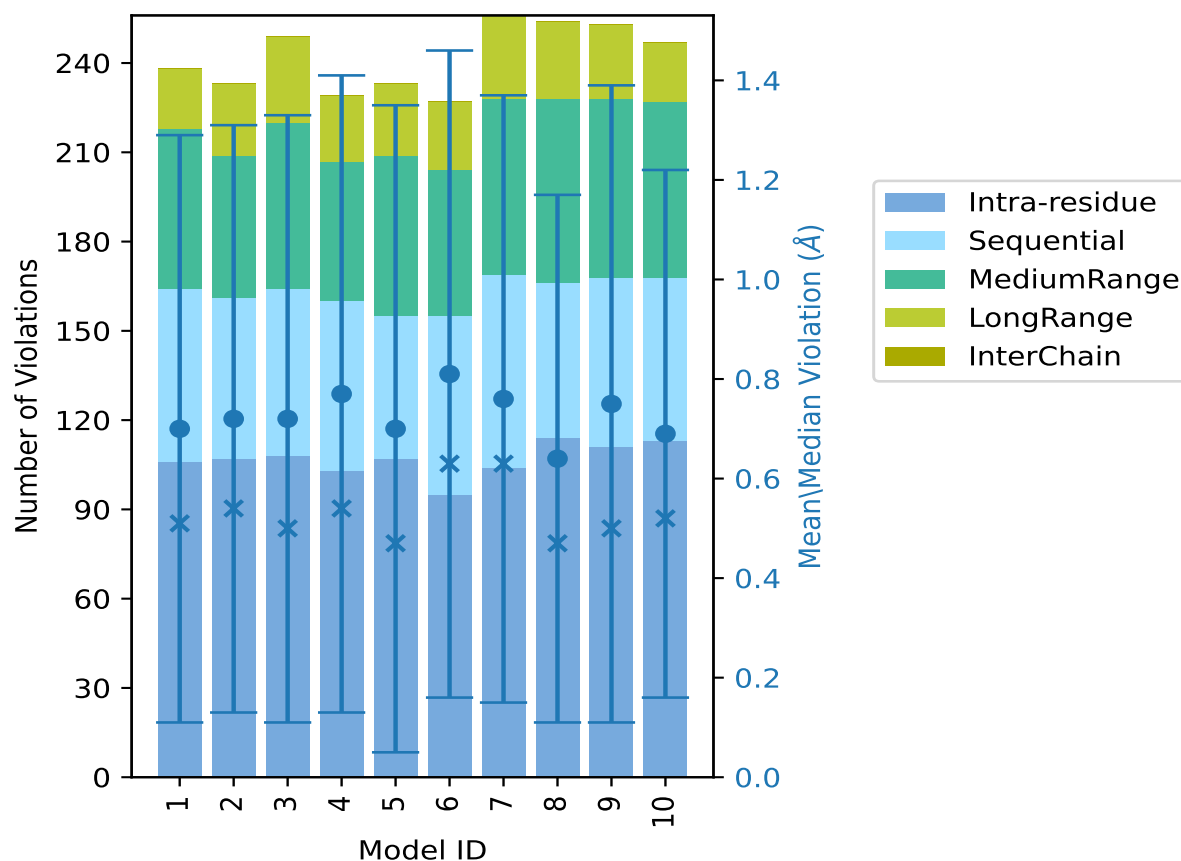
9.2 Distance violation statistics for each model [i](#)

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	106	58	54	20	0	238	0.7	3.27	0.59	0.51
2	107	54	48	24	0	233	0.72	3.05	0.59	0.54
3	108	56	56	29	0	249	0.72	3.09	0.61	0.5
4	103	57	47	22	0	229	0.77	2.95	0.64	0.54
5	107	48	54	24	0	233	0.7	4.02	0.65	0.47
6	95	60	49	23	0	227	0.81	3.35	0.65	0.63
7	104	65	59	28	0	256	0.76	3.55	0.61	0.63
8	114	52	62	26	0	254	0.64	3.24	0.53	0.47
9	111	57	60	25	0	253	0.75	3.24	0.64	0.5
10	113	55	59	20	0	247	0.69	3.11	0.53	0.52

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, 291(IR:230, SQ:27, MR:24, LR:10, 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	%
31	8	2	4	0	45	1	10.0
10	11	7	6	0	34	2	20.0
12	7	11	0	0	30	3	30.0

Continued on next page...

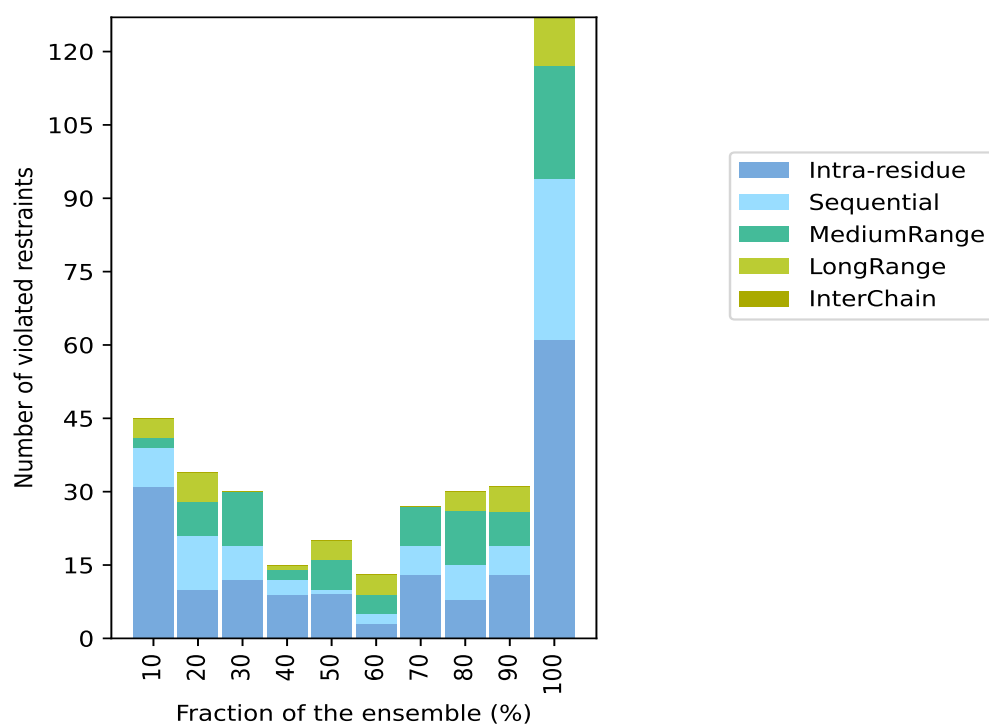
Continued from previous page...

Number of violated restraints						Fraction of the ensemble	
IR ¹	SQ ²	MR ³	LR ⁴	IC ⁵	Total	Count ⁶	%
9	3	2	1	0	15	4	40.0
9	1	6	4	0	20	5	50.0
3	2	4	4	0	13	6	60.0
13	6	8	0	0	27	7	70.0
8	7	11	4	0	30	8	80.0
13	6	7	5	0	31	9	90.0
61	33	23	10	0	127	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 ⓘ

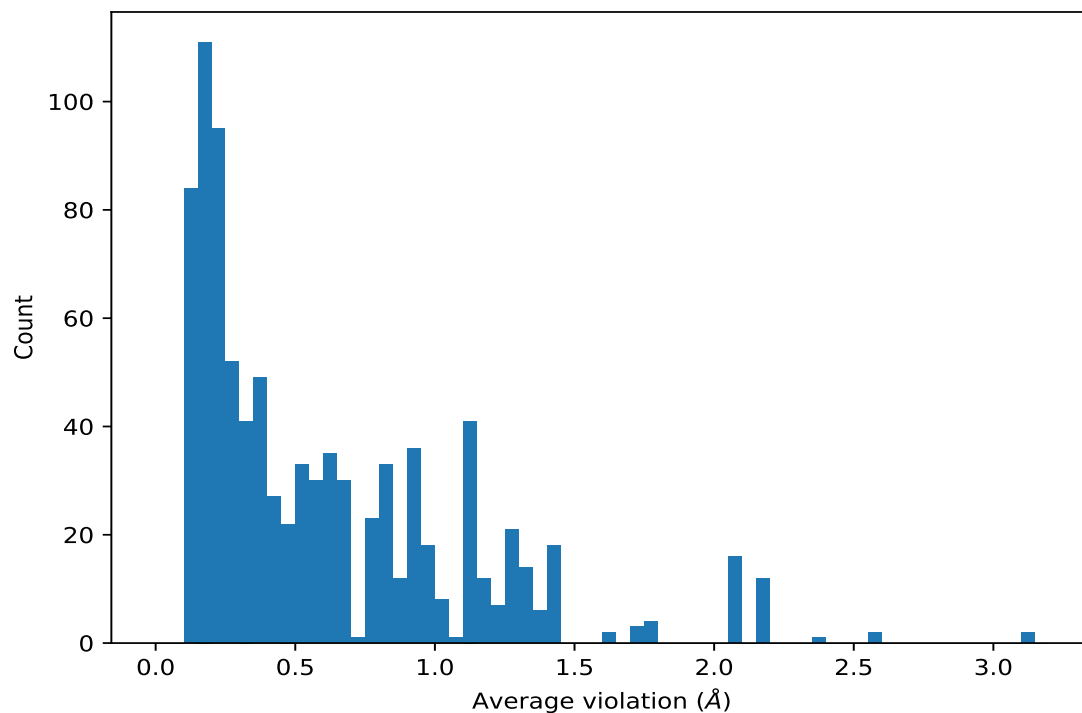


9.4 Most violated distance restraints in the ensemble ⓘ

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)
(2,220)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG3	10	3.15	0.25	3.2
(4,40)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG3	10	3.15	0.25	3.2
(1,220)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG3	10	2.38	0.25	2.42
(2,186)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:HB3	10	2.19	0.52	2.22
(2,186)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:HB3	10	2.19	0.52	2.22
(2,186)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:HB3	10	2.19	0.52	2.22
(2,186)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HB3	10	2.19	0.52	2.22
(2,186)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HB3	10	2.19	0.52	2.22
(2,186)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HB3	10	2.19	0.52	2.22
(4,30)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:HB3	10	2.19	0.52	2.22
(4,30)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:HB3	10	2.19	0.52	2.22
(4,30)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:HB3	10	2.19	0.52	2.22
(4,30)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HB3	10	2.19	0.52	2.22
(4,30)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HB3	10	2.19	0.52	2.22
(4,30)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HB3	10	2.19	0.52	2.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(2,158)	1:6:A:ARG:HB2	1:9:A:ILE:H	10	2.07	0.26	2.2
(2,158)	1:6:A:ARG:HB3	1:9:A:ILE:H	10	2.07	0.26	2.2
(4,25)	1:6:A:ARG:HB2	1:9:A:ILE:H	10	2.07	0.26	2.2
(4,25)	1:6:A:ARG:HB3	1:9:A:ILE:H	10	2.07	0.26	2.2
(2,201)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	10	2.07	0.47	2.29
(2,201)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	10	2.07	0.47	2.29
(2,201)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	10	2.07	0.47	2.29
(2,201)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG3	10	2.07	0.47	2.29
(2,201)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG3	10	2.07	0.47	2.29
(2,201)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG3	10	2.07	0.47	2.29
(4,36)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	10	2.07	0.47	2.29
(4,36)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	10	2.07	0.47	2.29
(4,36)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	10	2.07	0.47	2.29
(4,36)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG3	10	2.07	0.47	2.29
(4,36)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG3	10	2.07	0.47	2.29
(4,36)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG3	10	2.07	0.47	2.29
(2,141)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	10	1.75	0.09	1.79
(2,141)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	10	1.75	0.09	1.79
(4,18)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	10	1.75	0.09	1.79
(4,18)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	10	1.75	0.09	1.79
(2,148)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HZ2	10	1.62	0.01	1.62
(4,22)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HZ2	10	1.62	0.01	1.62
(2,172)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD3	10	1.44	0.87	1.14
(2,172)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD3	10	1.44	0.87	1.14
(3,146)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD3	10	1.44	0.87	1.14
(3,146)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD3	10	1.44	0.87	1.14
(2,193)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HA	10	1.42	0.64	1.66
(2,193)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HA	10	1.42	0.64	1.66
(2,193)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HA	10	1.42	0.64	1.66
(4,33)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HA	10	1.42	0.64	1.66
(4,33)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HA	10	1.42	0.64	1.66
(4,33)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HA	10	1.42	0.64	1.66
(1,186)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:HB3	10	1.41	0.52	1.44
(1,186)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:HB3	10	1.41	0.52	1.44
(1,186)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:HB3	10	1.41	0.52	1.44
(1,186)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HB3	10	1.41	0.52	1.44
(1,186)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HB3	10	1.41	0.52	1.44
(1,186)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HB3	10	1.41	0.52	1.44
(2,182)	1:6:A:ARG:HG2	1:7:A:LEU:HB2	10	1.31	0.13	1.3
(3,153)	1:6:A:ARG:HG2	1:7:A:LEU:HB2	10	1.31	0.13	1.3
(1,201)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	10	1.3	0.47	1.52
(1,201)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	10	1.3	0.47	1.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,201)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	10	1.3	0.47	1.52
(1,201)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG3	10	1.3	0.47	1.52
(1,201)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG3	10	1.3	0.47	1.52
(1,201)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG3	10	1.3	0.47	1.52
(1,158)	1:6:A:ARG:HB2	1:9:A:ILE:H	10	1.29	0.26	1.42
(1,158)	1:6:A:ARG:HB3	1:9:A:ILE:H	10	1.29	0.26	1.42
(2,173)	1:6:A:ARG:HD2	1:10:A:GLN:HG2	10	1.29	0.4	1.4
(2,173)	1:6:A:ARG:HD2	1:10:A:GLN:HG3	10	1.29	0.4	1.4
(3,147)	1:6:A:ARG:HD2	1:10:A:GLN:HG2	10	1.29	0.4	1.4
(3,147)	1:6:A:ARG:HD2	1:10:A:GLN:HG3	10	1.29	0.4	1.4
(1,143)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG2	10	1.28	0.09	1.27
(1,143)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG2	10	1.28	0.09	1.27
(2,127)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	10	1.26	0.46	1.44
(2,127)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	10	1.26	0.46	1.44
(2,127)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	10	1.26	0.46	1.44
(2,127)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	10	1.26	0.46	1.44
(2,127)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	10	1.26	0.46	1.44
(2,127)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	10	1.26	0.46	1.44
(4,16)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	10	1.26	0.46	1.44
(4,16)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	10	1.26	0.46	1.44
(4,16)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	10	1.26	0.46	1.44
(4,16)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	10	1.26	0.46	1.44
(4,16)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	10	1.26	0.46	1.44
(4,16)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	10	1.26	0.46	1.44
(1,53)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HB3	10	1.22	0.01	1.22
(2,178)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	10	1.18	0.74	1.22
(2,178)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	10	1.18	0.74	1.22
(2,178)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	10	1.18	0.74	1.22
(2,178)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB1	10	1.18	0.74	1.22
(2,178)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB2	10	1.18	0.74	1.22
(2,178)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB3	10	1.18	0.74	1.22
(4,28)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	10	1.18	0.74	1.22
(4,28)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	10	1.18	0.74	1.22
(4,28)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	10	1.18	0.74	1.22
(4,28)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB1	10	1.18	0.74	1.22
(4,28)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB2	10	1.18	0.74	1.22
(4,28)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB3	10	1.18	0.74	1.22
(2,110)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	10	1.15	0.16	1.08
(2,110)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	10	1.15	0.16	1.08
(2,110)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	10	1.15	0.16	1.08
(4,12)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	10	1.15	0.16	1.08
(4,12)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	10	1.15	0.16	1.08

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(4,12)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	10	1.15	0.16	1.08
(2,200)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD21	10	1.14	0.41	1.22
(2,200)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD22	10	1.14	0.41	1.22
(2,200)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD23	10	1.14	0.41	1.22
(2,200)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD21	10	1.14	0.41	1.22
(2,200)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD22	10	1.14	0.41	1.22
(2,200)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD23	10	1.14	0.41	1.22
(4,35)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD21	10	1.14	0.41	1.22
(4,35)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD22	10	1.14	0.41	1.22
(4,35)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD23	10	1.14	0.41	1.22
(4,35)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD21	10	1.14	0.41	1.22
(4,35)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD22	10	1.14	0.41	1.22
(4,35)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD23	10	1.14	0.41	1.22
(1,75)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HE22	10	1.13	0.0	1.13
(1,46)	1:20:A:GLY:HA2	1:20:A:GLY:HA3	10	1.12	0.0	1.12
(2,207)	1:12:A:LEU:HD11	1:13:A:LYS:HG2	10	1.11	0.78	0.85
(2,207)	1:12:A:LEU:HD12	1:13:A:LYS:HG2	10	1.11	0.78	0.85
(2,207)	1:12:A:LEU:HD13	1:13:A:LYS:HG2	10	1.11	0.78	0.85
(4,38)	1:12:A:LEU:HD11	1:13:A:LYS:HG2	10	1.11	0.78	0.85
(4,38)	1:12:A:LEU:HD12	1:13:A:LYS:HG2	10	1.11	0.78	0.85
(4,38)	1:12:A:LEU:HD13	1:13:A:LYS:HG2	10	1.11	0.78	0.85
(2,92)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	10	1.1	0.31	1.18
(2,92)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	10	1.1	0.31	1.18
(4,10)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	10	1.1	0.31	1.18
(4,10)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	10	1.1	0.31	1.18
(2,209)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD21	10	1.1	0.17	1.08
(2,209)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD22	10	1.1	0.17	1.08
(2,209)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD23	10	1.1	0.17	1.08
(3,171)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD21	10	1.1	0.17	1.08
(3,171)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD22	10	1.1	0.17	1.08
(3,171)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD23	10	1.1	0.17	1.08
(1,30)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HD3	10	1.1	0.0	1.1
(1,122)	1:15:A:GLY:HA2	1:15:A:GLY:HA3	10	1.08	0.0	1.08
(1,152)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:H	10	1.02	0.15	1.0
(1,10)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD3	10	1.0	0.04	1.0
(2,149)	1:11:A:TRP:HD1	1:23:A:PRO:HA	10	1.0	0.96	0.37
(4,23)	1:11:A:TRP:HD1	1:23:A:PRO:HA	10	1.0	0.96	0.37
(2,136)	1:8:A:TYR:HD1	1:23:A:PRO:HB3	10	0.99	0.14	0.98
(2,136)	1:8:A:TYR:HD2	1:23:A:PRO:HB3	10	0.99	0.14	0.98
(3,120)	1:8:A:TYR:HD1	1:23:A:PRO:HB3	10	0.99	0.14	0.98
(3,120)	1:8:A:TYR:HD2	1:23:A:PRO:HB3	10	0.99	0.14	0.98
(1,141)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	10	0.97	0.09	1.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,141)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	10	0.97	0.09	1.0
(1,18)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HB3	10	0.94	0.0	0.94
(1,71)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HD3	10	0.92	0.01	0.92
(2,189)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	10	0.92	0.42	1.04
(2,189)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	10	0.92	0.42	1.04
(2,189)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	10	0.92	0.42	1.04
(2,189)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HB2	10	0.92	0.42	1.04
(2,189)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HB2	10	0.92	0.42	1.04
(2,189)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HB2	10	0.92	0.42	1.04
(3,159)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	10	0.92	0.42	1.04
(3,159)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	10	0.92	0.42	1.04
(3,159)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	10	0.92	0.42	1.04
(3,159)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HB2	10	0.92	0.42	1.04
(3,159)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HB2	10	0.92	0.42	1.04
(3,159)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HB2	10	0.92	0.42	1.04
(1,132)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD21	10	0.88	0.3	1.0
(1,132)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD22	10	0.88	0.3	1.0
(1,132)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD23	10	0.88	0.3	1.0
(1,3)	1:22:A:PRO:HD2	1:22:A:PRO:HD3	10	0.86	0.01	0.86
(1,19)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG2	10	0.85	0.01	0.86
(1,148)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HZ2	10	0.84	0.01	0.84
(2,117)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG2	10	0.84	0.09	0.86
(3,104)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG2	10	0.84	0.09	0.86
(1,157)	1:4:A:ALA:H	1:4:A:ALA:HB1	10	0.81	0.13	0.88
(1,157)	1:4:A:ALA:H	1:4:A:ALA:HB2	10	0.81	0.13	0.88
(1,157)	1:4:A:ALA:H	1:4:A:ALA:HB3	10	0.81	0.13	0.88
(2,146)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HA	10	0.81	0.3	0.9
(2,146)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HA	10	0.81	0.3	0.9
(4,21)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HA	10	0.81	0.3	0.9
(4,21)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HA	10	0.81	0.3	0.9
(1,131)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD11	10	0.8	0.12	0.78
(1,131)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD12	10	0.8	0.12	0.78
(1,131)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD13	10	0.8	0.12	0.78
(1,108)	1:14:A:GLU:HG2	1:14:A:GLU:HG3	10	0.8	0.0	0.8
(2,58)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	10	0.79	0.05	0.78
(2,58)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	10	0.79	0.05	0.78
(4,7)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	10	0.79	0.05	0.78
(4,7)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	10	0.79	0.05	0.78
(1,86)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HB3	10	0.78	0.01	0.78
(2,166)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	10	0.78	0.04	0.78
(3,140)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	10	0.78	0.04	0.78
(2,61)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD11	10	0.77	0.23	0.88

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(2,61)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD12	10	0.77	0.23	0.88
(2,61)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD13	10	0.77	0.23	0.88
(4,9)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD11	10	0.77	0.23	0.88
(4,9)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD12	10	0.77	0.23	0.88
(4,9)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD13	10	0.77	0.23	0.88
(2,14)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG2	10	0.77	0.66	0.46
(2,14)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG3	10	0.77	0.66	0.46
(4,3)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG2	10	0.77	0.66	0.46
(4,3)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG3	10	0.77	0.66	0.46
(1,60)	1:16:A:GLY:HA2	1:16:A:GLY:HA3	10	0.76	0.0	0.76
(1,159)	1:23:A:PRO:HD2	1:23:A:PRO:HD3	10	0.73	0.0	0.73
(1,54)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HB2	10	0.68	0.06	0.68
(1,183)	1:13:A:LYS:HG2	1:13:A:LYS:HG3	10	0.68	0.01	0.68
(2,180)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	10	0.68	0.38	0.43
(2,180)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	10	0.68	0.38	0.43
(2,180)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	10	0.68	0.38	0.43
(2,180)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB1	10	0.68	0.38	0.43
(2,180)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB2	10	0.68	0.38	0.43
(2,180)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB3	10	0.68	0.38	0.43
(4,29)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	10	0.68	0.38	0.43
(4,29)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	10	0.68	0.38	0.43
(4,29)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	10	0.68	0.38	0.43
(4,29)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB1	10	0.68	0.38	0.43
(4,29)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB2	10	0.68	0.38	0.43
(4,29)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB3	10	0.68	0.38	0.43
(1,22)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HB3	10	0.66	0.02	0.64
(1,34)	1:24:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HG3	10	0.65	0.03	0.64
(2,59)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	10	0.62	0.04	0.63
(2,59)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	10	0.62	0.04	0.63
(4,8)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	10	0.62	0.04	0.63
(4,8)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	10	0.62	0.04	0.63
(2,151)	1:24:A:PRO:HG3	1:25:A:SER:H	10	0.57	0.16	0.57
(4,24)	1:24:A:PRO:HG3	1:25:A:SER:H	10	0.57	0.16	0.57
(2,162)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	10	0.56	0.25	0.45
(2,162)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB3	10	0.56	0.25	0.45
(4,26)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	10	0.56	0.25	0.45
(4,26)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB3	10	0.56	0.25	0.45
(1,168)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG2	10	0.55	0.03	0.53
(1,168)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG3	10	0.55	0.03	0.53
(1,47)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	10	0.53	0.02	0.53
(1,47)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	10	0.53	0.02	0.53
(1,47)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	10	0.53	0.02	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,47)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG21	10	0.53	0.02	0.53
(1,47)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG22	10	0.53	0.02	0.53
(1,47)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG23	10	0.53	0.02	0.53
(1,182)	1:6:A:ARG:HG2	1:7:A:LEU:HB2	10	0.53	0.13	0.52
(2,138)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG12	10	0.5	0.15	0.48
(2,138)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG12	10	0.5	0.15	0.48
(4,17)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG12	10	0.5	0.15	0.48
(4,17)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG12	10	0.5	0.15	0.48
(1,170)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HD2	10	0.5	0.2	0.48
(1,26)	1:23:A:PRO:HD2	1:23:A:PRO:HG2	10	0.49	0.01	0.49
(1,48)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG11	10	0.48	0.01	0.48
(1,48)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG12	10	0.48	0.01	0.48
(1,48)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG13	10	0.48	0.01	0.48
(1,48)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG21	10	0.48	0.01	0.48
(1,48)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG22	10	0.48	0.01	0.48
(1,48)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG23	10	0.48	0.01	0.48
(1,116)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HB2	10	0.47	0.02	0.48
(1,116)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HB3	10	0.47	0.02	0.48
(1,87)	1:18:A:SER:HA	1:18:A:SER:HB2	10	0.46	0.08	0.44
(1,87)	1:18:A:SER:HA	1:18:A:SER:HB3	10	0.46	0.08	0.44
(1,147)	1:11:A:TRP:HE3	1:11:A:TRP:HZ3	10	0.45	0.02	0.45
(1,57)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HD1	10	0.44	0.06	0.43
(1,57)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HD2	10	0.44	0.06	0.43
(2,190)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG11	10	0.44	0.06	0.44
(2,190)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG12	10	0.44	0.06	0.44
(2,190)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG13	10	0.44	0.06	0.44
(2,190)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG21	10	0.44	0.06	0.44
(2,190)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG22	10	0.44	0.06	0.44
(2,190)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG23	10	0.44	0.06	0.44
(4,31)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG11	10	0.44	0.06	0.44
(4,31)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG12	10	0.44	0.06	0.44
(4,31)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG13	10	0.44	0.06	0.44
(4,31)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG21	10	0.44	0.06	0.44
(4,31)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG22	10	0.44	0.06	0.44
(4,31)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG23	10	0.44	0.06	0.44
(1,21)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HB2	10	0.41	0.04	0.44
(1,37)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HG2	10	0.41	0.05	0.41
(1,165)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HB3	10	0.41	0.06	0.42
(1,110)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	10	0.4	0.16	0.32
(1,110)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	10	0.4	0.16	0.32
(1,110)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	10	0.4	0.16	0.32
(2,32)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG2	10	0.4	0.04	0.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(4,6)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG2	10	0.4	0.04	0.4
(2,84)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD2	10	0.39	0.1	0.34
(3,75)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD2	10	0.39	0.1	0.34
(1,91)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG11	10	0.39	0.1	0.38
(1,91)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG12	10	0.39	0.1	0.38
(1,91)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG13	10	0.39	0.1	0.38
(1,91)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	10	0.39	0.1	0.38
(1,91)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	10	0.39	0.1	0.38
(1,91)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	10	0.39	0.1	0.38
(1,56)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HD1	10	0.38	0.08	0.39
(1,56)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HD2	10	0.38	0.08	0.39
(1,39)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HE1	10	0.36	0.01	0.36
(1,27)	1:23:A:PRO:HD3	1:23:A:PRO:HG3	10	0.34	0.01	0.34
(2,140)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG13	10	0.34	0.22	0.21
(2,140)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG13	10	0.34	0.22	0.21
(3,123)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG13	10	0.34	0.22	0.21
(3,123)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG13	10	0.34	0.22	0.21
(1,100)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HG2	10	0.32	0.04	0.33
(1,100)	1:21:A:ARG:HD3	1:21:A:ARG:HG2	10	0.32	0.04	0.33
(2,7)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD2	10	0.32	0.06	0.3
(4,2)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD2	10	0.32	0.06	0.3
(1,15)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HB2	10	0.3	0.1	0.29
(1,13)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HB3	10	0.3	0.03	0.31
(1,20)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG3	10	0.29	0.04	0.3
(1,83)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG2	10	0.28	0.04	0.26
(2,24)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	10	0.27	0.02	0.26
(3,20)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	10	0.27	0.02	0.26
(1,74)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HB3	10	0.13	0.01	0.13
(2,174)	1:6:A:ARG:HD2	1:10:A:GLN:HB3	9	2.59	0.37	2.58
(4,27)	1:6:A:ARG:HD2	1:10:A:GLN:HB3	9	2.59	0.37	2.58
(2,115)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HD2	9	1.41	0.03	1.42
(3,102)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HD2	9	1.41	0.03	1.42
(2,179)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	9	1.4	0.46	1.58
(2,179)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	9	1.4	0.46	1.58
(2,179)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	9	1.4	0.46	1.58
(3,151)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	9	1.4	0.46	1.58
(3,151)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	9	1.4	0.46	1.58
(3,151)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	9	1.4	0.46	1.58
(2,8)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD3	9	0.82	0.02	0.83
(3,6)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD3	9	0.82	0.02	0.83
(2,137)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB3	9	0.7	0.22	0.8
(2,137)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB3	9	0.7	0.22	0.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(3,121)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB3	9	0.7	0.22	0.8
(3,121)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB3	9	0.7	0.22	0.8
(1,65)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HG2	9	0.59	0.12	0.58
(2,17)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	9	0.52	0.17	0.53
(3,14)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	9	0.52	0.17	0.53
(2,16)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD2	9	0.51	0.24	0.53
(3,13)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD2	9	0.51	0.24	0.53
(2,119)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HD2	9	0.49	0.02	0.48
(3,105)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HD2	9	0.49	0.02	0.48
(2,29)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	9	0.45	0.11	0.47
(4,5)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	9	0.45	0.11	0.47
(1,209)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD21	9	0.35	0.16	0.33
(1,209)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD22	9	0.35	0.16	0.33
(1,209)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD23	9	0.35	0.16	0.33
(2,144)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG2	9	0.32	0.08	0.33
(2,144)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG2	9	0.32	0.08	0.33
(4,20)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG2	9	0.32	0.08	0.33
(4,20)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG2	9	0.32	0.08	0.33
(1,4)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD2	9	0.31	0.07	0.32
(1,109)	1:14:A:GLU:HB3	1:14:A:GLU:HG2	9	0.3	0.02	0.29
(1,136)	1:8:A:TYR:HD1	1:23:A:PRO:HB3	9	0.24	0.12	0.25
(1,136)	1:8:A:TYR:HD2	1:23:A:PRO:HB3	9	0.24	0.12	0.25
(2,210)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG21	9	0.24	0.07	0.25
(2,210)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG22	9	0.24	0.07	0.25
(2,210)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG23	9	0.24	0.07	0.25
(2,210)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG21	9	0.24	0.07	0.25
(2,210)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG22	9	0.24	0.07	0.25
(2,210)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG23	9	0.24	0.07	0.25
(2,210)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG21	9	0.24	0.07	0.25
(2,210)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG22	9	0.24	0.07	0.25
(2,210)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG23	9	0.24	0.07	0.25
(2,210)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG21	9	0.24	0.07	0.25
(2,210)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG22	9	0.24	0.07	0.25
(2,210)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG23	9	0.24	0.07	0.25
(2,210)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG21	9	0.24	0.07	0.25
(2,210)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG22	9	0.24	0.07	0.25
(2,210)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG23	9	0.24	0.07	0.25
(2,210)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG21	9	0.24	0.07	0.25
(2,210)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG22	9	0.24	0.07	0.25
(2,210)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG23	9	0.24	0.07	0.25
(4,39)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG21	9	0.24	0.07	0.25
(4,39)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG22	9	0.24	0.07	0.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(4,39)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG23	9	0.24	0.07	0.25
(4,39)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG21	9	0.24	0.07	0.25
(4,39)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG22	9	0.24	0.07	0.25
(4,39)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG23	9	0.24	0.07	0.25
(4,39)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG21	9	0.24	0.07	0.25
(4,39)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG22	9	0.24	0.07	0.25
(4,39)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG23	9	0.24	0.07	0.25
(4,39)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG21	9	0.24	0.07	0.25
(4,39)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG22	9	0.24	0.07	0.25
(4,39)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG23	9	0.24	0.07	0.25
(4,39)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG21	9	0.24	0.07	0.25
(4,39)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG22	9	0.24	0.07	0.25
(4,39)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG23	9	0.24	0.07	0.25
(4,39)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG21	9	0.24	0.07	0.25
(4,39)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG22	9	0.24	0.07	0.25
(4,39)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG23	9	0.24	0.07	0.25
(1,63)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HB2	9	0.23	0.11	0.2
(1,63)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HB3	9	0.23	0.11	0.2
(1,181)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HG3	9	0.22	0.03	0.22
(1,181)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HG3	9	0.22	0.03	0.22
(1,36)	1:24:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HG2	9	0.2	0.04	0.22
(1,38)	1:25:A:SER:HA	1:25:A:SER:HB2	9	0.15	0.07	0.13
(1,38)	1:25:A:SER:HA	1:25:A:SER:HB3	9	0.15	0.07	0.13
(2,196)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:HB2	8	0.99	0.89	0.5
(2,196)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:HB2	8	0.99	0.89	0.5
(2,196)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:HB2	8	0.99	0.89	0.5
(4,34)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:HB2	8	0.99	0.89	0.5
(4,34)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:HB2	8	0.99	0.89	0.5
(4,34)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:HB2	8	0.99	0.89	0.5
(1,2)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD3	8	0.94	0.25	1.03
(1,193)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HA	8	0.91	0.38	0.92
(1,193)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HA	8	0.91	0.38	0.92
(1,193)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HA	8	0.91	0.38	0.92
(1,44)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HG2	8	0.84	0.05	0.83
(2,208)	1:12:A:LEU:HD21	1:13:A:LYS:HG2	8	0.82	0.32	0.86
(2,208)	1:12:A:LEU:HD22	1:13:A:LYS:HG2	8	0.82	0.32	0.86
(2,208)	1:12:A:LEU:HD23	1:13:A:LYS:HG2	8	0.82	0.32	0.86
(3,170)	1:12:A:LEU:HD21	1:13:A:LYS:HG2	8	0.82	0.32	0.86
(3,170)	1:12:A:LEU:HD22	1:13:A:LYS:HG2	8	0.82	0.32	0.86
(3,170)	1:12:A:LEU:HD23	1:13:A:LYS:HG2	8	0.82	0.32	0.86
(2,192)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HA	8	0.8	0.99	0.3
(2,192)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HA	8	0.8	0.99	0.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(2,192)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HA	8	0.8	0.99	0.3
(4,32)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HA	8	0.8	0.99	0.3
(4,32)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HA	8	0.8	0.99	0.3
(4,32)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HA	8	0.8	0.99	0.3
(1,179)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	8	0.78	0.05	0.8
(1,179)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	8	0.78	0.05	0.8
(1,179)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	8	0.78	0.05	0.8
(1,127)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	8	0.7	0.15	0.7
(1,127)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	8	0.7	0.15	0.7
(1,127)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	8	0.7	0.15	0.7
(1,127)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	8	0.7	0.15	0.7
(1,127)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	8	0.7	0.15	0.7
(1,127)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	8	0.7	0.15	0.7
(1,42)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB3	8	0.65	0.13	0.58
(2,187)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG11	8	0.64	0.26	0.7
(2,187)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG12	8	0.64	0.26	0.7
(2,187)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG13	8	0.64	0.26	0.7
(2,187)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	8	0.64	0.26	0.7
(2,187)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	8	0.64	0.26	0.7
(2,187)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	8	0.64	0.26	0.7
(2,187)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG11	8	0.64	0.26	0.7
(2,187)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG12	8	0.64	0.26	0.7
(2,187)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG13	8	0.64	0.26	0.7
(3,157)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG11	8	0.64	0.26	0.7
(3,157)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG12	8	0.64	0.26	0.7
(3,157)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG13	8	0.64	0.26	0.7
(3,157)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	8	0.64	0.26	0.7
(3,157)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	8	0.64	0.26	0.7
(3,157)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	8	0.64	0.26	0.7
(3,157)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG11	8	0.64	0.26	0.7
(3,157)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG12	8	0.64	0.26	0.7
(3,157)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG13	8	0.64	0.26	0.7
(1,41)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HG3	8	0.59	0.07	0.56
(1,200)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD21	8	0.54	0.21	0.5
(1,200)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD22	8	0.54	0.21	0.5
(1,200)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD23	8	0.54	0.21	0.5
(1,200)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD21	8	0.54	0.21	0.5
(1,200)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD22	8	0.54	0.21	0.5
(1,200)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD23	8	0.54	0.21	0.5
(1,129)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD11	8	0.53	0.18	0.56
(1,129)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD12	8	0.53	0.18	0.56
(1,129)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD13	8	0.53	0.18	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,92)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	8	0.44	0.1	0.47
(1,92)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	8	0.44	0.1	0.47
(1,81)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HA	8	0.43	0.01	0.44
(2,123)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	8	0.37	0.15	0.37
(2,123)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	8	0.37	0.15	0.37
(2,123)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	8	0.37	0.15	0.37
(2,123)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	8	0.37	0.15	0.37
(2,123)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	8	0.37	0.15	0.37
(2,123)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	8	0.37	0.15	0.37
(2,123)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE1	8	0.37	0.15	0.37
(2,123)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE2	8	0.37	0.15	0.37
(2,123)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE1	8	0.37	0.15	0.37
(2,123)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE2	8	0.37	0.15	0.37
(2,123)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE1	8	0.37	0.15	0.37
(2,123)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE2	8	0.37	0.15	0.37
(4,15)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	8	0.37	0.15	0.37
(4,15)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	8	0.37	0.15	0.37
(4,15)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	8	0.37	0.15	0.37
(4,15)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	8	0.37	0.15	0.37
(4,15)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	8	0.37	0.15	0.37
(4,15)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	8	0.37	0.15	0.37
(4,15)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE1	8	0.37	0.15	0.37
(4,15)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE2	8	0.37	0.15	0.37
(4,15)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE1	8	0.37	0.15	0.37
(4,15)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE2	8	0.37	0.15	0.37
(4,15)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE1	8	0.37	0.15	0.37
(4,15)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE2	8	0.37	0.15	0.37
(1,161)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	8	0.37	0.17	0.34
(1,70)	1:13:A:LYS:HE2	1:13:A:LYS:HG3	8	0.34	0.17	0.31
(2,205)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD21	8	0.33	0.08	0.36
(2,205)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD22	8	0.33	0.08	0.36
(2,205)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD23	8	0.33	0.08	0.36
(4,37)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD21	8	0.33	0.08	0.36
(4,37)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD22	8	0.33	0.08	0.36
(4,37)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD23	8	0.33	0.08	0.36
(2,155)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG13	8	0.24	0.14	0.16
(3,131)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG13	8	0.24	0.14	0.16
(2,191)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG11	8	0.14	0.02	0.13
(2,191)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG12	8	0.14	0.02	0.13
(2,191)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG13	8	0.14	0.02	0.13
(2,191)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	8	0.14	0.02	0.13
(2,191)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	8	0.14	0.02	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(2,191)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	8	0.14	0.02	0.13
(3,160)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG11	8	0.14	0.02	0.13
(3,160)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG12	8	0.14	0.02	0.13
(3,160)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG13	8	0.14	0.02	0.13
(3,160)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	8	0.14	0.02	0.13
(3,160)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	8	0.14	0.02	0.13
(3,160)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	8	0.14	0.02	0.13
(1,6)	1:22:A:PRO:HD3	1:22:A:PRO:HG2	8	0.12	0.01	0.12
(1,6)	1:22:A:PRO:HD3	1:22:A:PRO:HG3	8	0.12	0.01	0.12
(1,155)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG13	7	1.25	0.06	1.28
(2,195)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	7	1.23	0.65	1.64
(2,195)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	7	1.23	0.65	1.64
(2,195)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	7	1.23	0.65	1.64
(3,162)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	7	1.23	0.65	1.64
(3,162)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	7	1.23	0.65	1.64
(3,162)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	7	1.23	0.65	1.64
(2,93)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	7	0.89	0.04	0.9
(2,93)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	7	0.89	0.04	0.9
(2,93)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	7	0.89	0.04	0.9
(4,11)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	7	0.89	0.04	0.9
(4,11)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	7	0.89	0.04	0.9
(4,11)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	7	0.89	0.04	0.9
(1,195)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	7	0.84	0.05	0.86
(1,195)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	7	0.84	0.05	0.86
(1,195)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	7	0.84	0.05	0.86
(1,197)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD21	7	0.69	0.15	0.67
(1,197)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD22	7	0.69	0.15	0.67
(1,197)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD23	7	0.69	0.15	0.67
(1,185)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG13	7	0.64	0.23	0.66
(1,185)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG13	7	0.64	0.23	0.66
(1,185)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG13	7	0.64	0.23	0.66
(1,185)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG13	7	0.64	0.23	0.66
(1,185)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG13	7	0.64	0.23	0.66
(1,185)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG13	7	0.64	0.23	0.66
(2,198)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA3	7	0.59	0.5	0.26
(2,198)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA3	7	0.59	0.5	0.26
(2,198)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA3	7	0.59	0.5	0.26
(3,164)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA3	7	0.59	0.5	0.26
(3,164)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA3	7	0.59	0.5	0.26
(3,164)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA3	7	0.59	0.5	0.26
(1,160)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG2	7	0.51	0.26	0.66
(1,160)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG3	7	0.51	0.26	0.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,174)	1:6:A:ARG:HD2	1:10:A:GLN:HB3	7	0.5	0.24	0.35
(1,174)	1:6:A:ARG:HD3	1:10:A:GLN:HB3	7	0.5	0.24	0.35
(2,94)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG12	7	0.49	0.02	0.5
(3,83)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG12	7	0.49	0.02	0.5
(2,112)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HG	7	0.48	0.16	0.45
(4,13)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HG	7	0.48	0.16	0.45
(1,156)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HB2	7	0.41	0.14	0.35
(1,189)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	7	0.37	0.16	0.44
(1,189)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	7	0.37	0.16	0.44
(1,189)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	7	0.37	0.16	0.44
(1,189)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HB2	7	0.37	0.16	0.44
(1,189)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HB2	7	0.37	0.16	0.44
(1,189)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HB2	7	0.37	0.16	0.44
(1,111)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	7	0.27	0.07	0.31
(1,111)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	7	0.27	0.07	0.31
(1,111)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	7	0.27	0.07	0.31
(1,212)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG21	7	0.25	0.04	0.25
(1,212)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG22	7	0.25	0.04	0.25
(1,212)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG23	7	0.25	0.04	0.25
(2,76)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG2	7	0.25	0.12	0.3
(2,76)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG3	7	0.25	0.12	0.3
(3,67)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG2	7	0.25	0.12	0.3
(3,67)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG3	7	0.25	0.12	0.3
(1,99)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD2	7	0.2	0.06	0.19
(1,99)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD3	7	0.2	0.06	0.19
(2,125)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD11	7	0.19	0.08	0.17
(2,125)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD12	7	0.19	0.08	0.17
(2,125)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD13	7	0.19	0.08	0.17
(2,125)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD11	7	0.19	0.08	0.17
(2,125)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD12	7	0.19	0.08	0.17
(2,125)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD13	7	0.19	0.08	0.17
(3,110)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD11	7	0.19	0.08	0.17
(3,110)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD12	7	0.19	0.08	0.17
(3,110)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD13	7	0.19	0.08	0.17
(3,110)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD11	7	0.19	0.08	0.17
(3,110)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD12	7	0.19	0.08	0.17
(3,110)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD13	7	0.19	0.08	0.17
(2,130)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD21	7	0.15	0.03	0.14
(2,130)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD22	7	0.15	0.03	0.14
(2,130)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD23	7	0.15	0.03	0.14
(3,114)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD21	7	0.15	0.03	0.14
(3,114)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD22	7	0.15	0.03	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(3,114)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD23	7	0.15	0.03	0.14
(1,178)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	6	0.97	0.38	1.17
(1,178)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	6	0.97	0.38	1.17
(1,178)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	6	0.97	0.38	1.17
(1,178)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB1	6	0.97	0.38	1.17
(1,178)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB2	6	0.97	0.38	1.17
(1,178)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB3	6	0.97	0.38	1.17
(1,215)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HE2	6	0.6	0.13	0.66
(1,215)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HE2	6	0.6	0.13	0.66
(1,215)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HE2	6	0.6	0.13	0.66
(1,139)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HG13	6	0.58	0.1	0.58
(1,139)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HG13	6	0.58	0.1	0.58
(1,107)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HB3	6	0.54	0.07	0.52
(1,93)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	6	0.25	0.14	0.16
(1,93)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	6	0.25	0.14	0.16
(1,93)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	6	0.25	0.14	0.16
(2,43)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB2	6	0.19	0.03	0.19
(3,37)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB2	6	0.19	0.03	0.19
(1,124)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	6	0.16	0.05	0.16
(1,124)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	6	0.16	0.05	0.16
(1,124)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	6	0.16	0.05	0.16
(1,124)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	6	0.16	0.05	0.16
(1,124)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	6	0.16	0.05	0.16
(1,124)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	6	0.16	0.05	0.16
(1,124)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HD1	6	0.16	0.05	0.16
(1,124)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HD2	6	0.16	0.05	0.16
(1,124)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HD1	6	0.16	0.05	0.16
(1,124)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HD2	6	0.16	0.05	0.16
(1,124)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HD1	6	0.16	0.05	0.16
(1,124)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HD2	6	0.16	0.05	0.16
(2,214)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HG21	6	0.14	0.04	0.12
(2,214)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HG22	6	0.14	0.04	0.12
(2,214)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HG23	6	0.14	0.04	0.12
(3,175)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HG21	6	0.14	0.04	0.12
(3,175)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HG22	6	0.14	0.04	0.12
(3,175)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HG23	6	0.14	0.04	0.12
(2,206)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HG3	6	0.14	0.02	0.14
(2,206)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HG3	6	0.14	0.02	0.14
(2,206)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HG3	6	0.14	0.02	0.14
(3,169)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HG3	6	0.14	0.02	0.14
(3,169)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HG3	6	0.14	0.02	0.14
(3,169)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HG3	6	0.14	0.02	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,204)	1:7:A:LEU:HD21	1:7:A:LEU:HG	6	0.12	0.02	0.12
(1,204)	1:7:A:LEU:HD22	1:7:A:LEU:HG	6	0.12	0.02	0.12
(1,204)	1:7:A:LEU:HD23	1:7:A:LEU:HG	6	0.12	0.02	0.12
(1,52)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HB3	5	0.62	0.04	0.64
(2,215)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HE2	5	0.59	0.51	0.5
(2,215)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HE2	5	0.59	0.51	0.5
(2,215)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HE2	5	0.59	0.51	0.5
(3,176)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HE2	5	0.59	0.51	0.5
(3,176)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HE2	5	0.59	0.51	0.5
(3,176)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HE2	5	0.59	0.51	0.5
(1,150)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HD2	5	0.54	0.19	0.61
(1,150)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HD3	5	0.54	0.19	0.61
(2,51)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	5	0.49	0.01	0.49
(3,45)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	5	0.49	0.01	0.49
(1,106)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HB2	5	0.33	0.06	0.32
(1,146)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HA	5	0.3	0.04	0.31
(1,146)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HA	5	0.3	0.04	0.31
(1,184)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG11	5	0.21	0.08	0.16
(1,184)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG12	5	0.21	0.08	0.16
(1,184)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG13	5	0.21	0.08	0.16
(1,184)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG11	5	0.21	0.08	0.16
(1,184)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG12	5	0.21	0.08	0.16
(1,184)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG13	5	0.21	0.08	0.16
(1,184)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG11	5	0.21	0.08	0.16
(1,184)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG12	5	0.21	0.08	0.16
(1,184)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG13	5	0.21	0.08	0.16
(1,184)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	5	0.21	0.08	0.16
(1,184)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	5	0.21	0.08	0.16
(1,184)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	5	0.21	0.08	0.16
(1,184)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	5	0.21	0.08	0.16
(1,184)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	5	0.21	0.08	0.16
(1,184)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	5	0.21	0.08	0.16
(1,184)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	5	0.21	0.08	0.16
(1,184)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	5	0.21	0.08	0.16
(1,184)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	5	0.21	0.08	0.16
(2,98)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD2	5	0.18	0.08	0.15
(2,98)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD3	5	0.18	0.08	0.15
(3,87)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD2	5	0.18	0.08	0.15
(3,87)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD3	5	0.18	0.08	0.15
(2,211)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD11	5	0.18	0.03	0.19
(2,211)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD12	5	0.18	0.03	0.19
(2,211)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD13	5	0.18	0.03	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(2,211)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD11	5	0.18	0.03	0.19
(2,211)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD12	5	0.18	0.03	0.19
(2,211)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD13	5	0.18	0.03	0.19
(2,211)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD11	5	0.18	0.03	0.19
(2,211)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD12	5	0.18	0.03	0.19
(2,211)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD13	5	0.18	0.03	0.19
(2,211)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HD11	5	0.18	0.03	0.19
(2,211)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HD12	5	0.18	0.03	0.19
(2,211)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HD13	5	0.18	0.03	0.19
(2,211)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HD11	5	0.18	0.03	0.19
(2,211)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HD12	5	0.18	0.03	0.19
(2,211)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HD13	5	0.18	0.03	0.19
(2,211)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HD11	5	0.18	0.03	0.19
(2,211)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HD12	5	0.18	0.03	0.19
(2,211)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HD13	5	0.18	0.03	0.19
(3,172)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD11	5	0.18	0.03	0.19
(3,172)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD12	5	0.18	0.03	0.19
(3,172)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD13	5	0.18	0.03	0.19
(3,172)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD11	5	0.18	0.03	0.19
(3,172)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD12	5	0.18	0.03	0.19
(3,172)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD13	5	0.18	0.03	0.19
(3,172)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD11	5	0.18	0.03	0.19
(3,172)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD12	5	0.18	0.03	0.19
(3,172)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD13	5	0.18	0.03	0.19
(3,172)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HD11	5	0.18	0.03	0.19
(3,172)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HD12	5	0.18	0.03	0.19
(3,172)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HD13	5	0.18	0.03	0.19
(3,172)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HD11	5	0.18	0.03	0.19
(3,172)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HD12	5	0.18	0.03	0.19
(3,172)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HD13	5	0.18	0.03	0.19
(3,172)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HD11	5	0.18	0.03	0.19
(3,172)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HD12	5	0.18	0.03	0.19
(3,172)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HD13	5	0.18	0.03	0.19
(2,128)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD21	5	0.17	0.02	0.18
(2,128)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD22	5	0.17	0.02	0.18
(2,128)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD23	5	0.17	0.02	0.18
(2,128)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD21	5	0.17	0.02	0.18
(2,128)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD22	5	0.17	0.02	0.18
(2,128)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD23	5	0.17	0.02	0.18
(3,112)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD21	5	0.17	0.02	0.18
(3,112)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD22	5	0.17	0.02	0.18
(3,112)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD23	5	0.17	0.02	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(3,112)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD21	5	0.17	0.02	0.18
(3,112)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD22	5	0.17	0.02	0.18
(3,112)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD23	5	0.17	0.02	0.18
(2,143)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG2	5	0.17	0.07	0.12
(2,143)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG2	5	0.17	0.07	0.12
(4,19)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG2	5	0.17	0.07	0.12
(4,19)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG2	5	0.17	0.07	0.12
(1,61)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD11	5	0.13	0.01	0.13
(1,61)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD12	5	0.13	0.01	0.13
(1,61)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD13	5	0.13	0.01	0.13
(2,73)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG2	5	0.12	0.01	0.12
(2,73)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG3	5	0.12	0.01	0.12
(3,64)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG2	5	0.12	0.01	0.12
(3,64)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG3	5	0.12	0.01	0.12
(1,149)	1:11:A:TRP:HD1	1:23:A:PRO:HA	4	1.32	0.49	1.27
(2,161)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	4	1.1	0.08	1.1
(3,136)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	4	1.1	0.08	1.1
(1,207)	1:12:A:LEU:HD11	1:13:A:LYS:HG2	4	1.03	0.82	1.0
(1,207)	1:12:A:LEU:HD12	1:13:A:LYS:HG2	4	1.03	0.82	1.0
(1,207)	1:12:A:LEU:HD13	1:13:A:LYS:HG2	4	1.03	0.82	1.0
(1,104)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HG2	4	0.43	0.05	0.44
(1,180)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	4	0.36	0.1	0.36
(1,180)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	4	0.36	0.1	0.36
(1,180)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	4	0.36	0.1	0.36
(1,180)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB1	4	0.36	0.1	0.36
(1,180)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB2	4	0.36	0.1	0.36
(1,180)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB3	4	0.36	0.1	0.36
(1,78)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HB3	4	0.34	0.05	0.36
(1,208)	1:12:A:LEU:HD21	1:13:A:LYS:HG2	4	0.33	0.1	0.32
(1,208)	1:12:A:LEU:HD22	1:13:A:LYS:HG2	4	0.33	0.1	0.32
(1,208)	1:12:A:LEU:HD23	1:13:A:LYS:HG2	4	0.33	0.1	0.32
(2,219)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG21	4	0.23	0.09	0.24
(2,219)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG22	4	0.23	0.09	0.24
(2,219)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG23	4	0.23	0.09	0.24
(3,180)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG21	4	0.23	0.09	0.24
(3,180)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG22	4	0.23	0.09	0.24
(3,180)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG23	4	0.23	0.09	0.24
(1,216)	1:9:A:ILE:HG12	1:9:A:ILE:HG21	4	0.17	0.03	0.16
(1,216)	1:9:A:ILE:HG12	1:9:A:ILE:HG22	4	0.17	0.03	0.16
(1,216)	1:9:A:ILE:HG12	1:9:A:ILE:HG23	4	0.17	0.03	0.16
(2,33)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG3	4	0.14	0.02	0.14
(3,27)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG3	4	0.14	0.02	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(2,62)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD21	4	0.12	0.01	0.11
(2,62)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD22	4	0.12	0.01	0.11
(2,62)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD23	4	0.12	0.01	0.11
(3,53)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD21	4	0.12	0.01	0.11
(3,53)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD22	4	0.12	0.01	0.11
(3,53)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD23	4	0.12	0.01	0.11
(1,196)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:HB2	3	1.3	0.4	1.46
(1,196)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:HB2	3	1.3	0.4	1.46
(1,196)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:HB2	3	1.3	0.4	1.46
(2,197)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD21	3	0.93	0.51	1.29
(2,197)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD22	3	0.93	0.51	1.29
(2,197)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD23	3	0.93	0.51	1.29
(3,163)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD21	3	0.93	0.51	1.29
(3,163)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD22	3	0.93	0.51	1.29
(3,163)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD23	3	0.93	0.51	1.29
(1,67)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HE2	3	0.87	0.11	0.79
(1,67)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HE2	3	0.87	0.11	0.79
(2,188)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HE2	3	0.63	0.15	0.63
(2,188)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HE2	3	0.63	0.15	0.63
(2,188)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HE2	3	0.63	0.15	0.63
(3,158)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HE2	3	0.63	0.15	0.63
(3,158)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HE2	3	0.63	0.15	0.63
(3,158)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HE2	3	0.63	0.15	0.63
(1,105)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HG3	3	0.36	0.06	0.32
(1,213)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB2	3	0.3	0.08	0.25
(1,213)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB2	3	0.3	0.08	0.25
(1,213)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB2	3	0.3	0.08	0.25
(1,213)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB3	3	0.3	0.08	0.25
(1,213)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB3	3	0.3	0.08	0.25
(1,213)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB3	3	0.3	0.08	0.25
(1,154)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HG3	3	0.3	0.15	0.26
(1,203)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB2	3	0.29	0.08	0.25
(1,203)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB2	3	0.29	0.08	0.25
(1,203)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB2	3	0.29	0.08	0.25
(1,203)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB3	3	0.29	0.08	0.25
(1,203)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB3	3	0.29	0.08	0.25
(1,203)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB3	3	0.29	0.08	0.25
(2,185)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG13	3	0.29	0.06	0.27
(2,185)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG13	3	0.29	0.06	0.27
(2,185)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG13	3	0.29	0.06	0.27
(2,185)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG13	3	0.29	0.06	0.27
(2,185)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG13	3	0.29	0.06	0.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(2,185)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG13	3	0.29	0.06	0.27
(3,156)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG13	3	0.29	0.06	0.27
(3,156)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG13	3	0.29	0.06	0.27
(3,156)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG13	3	0.29	0.06	0.27
(3,156)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG13	3	0.29	0.06	0.27
(3,156)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG13	3	0.29	0.06	0.27
(3,156)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG13	3	0.29	0.06	0.27
(2,50)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HD1	3	0.26	0.0	0.26
(3,44)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HD1	3	0.26	0.0	0.26
(2,126)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD21	3	0.24	0.06	0.22
(2,126)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD22	3	0.24	0.06	0.22
(2,126)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD23	3	0.24	0.06	0.22
(2,126)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD21	3	0.24	0.06	0.22
(2,126)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD22	3	0.24	0.06	0.22
(2,126)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD23	3	0.24	0.06	0.22
(3,111)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD21	3	0.24	0.06	0.22
(3,111)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD22	3	0.24	0.06	0.22
(3,111)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD23	3	0.24	0.06	0.22
(3,111)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD21	3	0.24	0.06	0.22
(3,111)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD22	3	0.24	0.06	0.22
(3,111)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD23	3	0.24	0.06	0.22
(1,55)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HD1	3	0.21	0.14	0.11
(1,55)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HD2	3	0.21	0.14	0.11
(2,82)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HB2	3	0.2	0.02	0.19
(2,82)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HB3	3	0.2	0.02	0.19
(3,73)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HB2	3	0.2	0.02	0.19
(3,73)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HB3	3	0.2	0.02	0.19
(1,134)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:H	3	0.18	0.05	0.19
(1,134)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:H	3	0.18	0.05	0.19
(1,134)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:H	3	0.18	0.05	0.19
(1,134)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:H	3	0.18	0.05	0.19
(1,134)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:H	3	0.18	0.05	0.19
(1,134)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:H	3	0.18	0.05	0.19
(2,66)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HG3	3	0.16	0.03	0.15
(3,57)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HG3	3	0.16	0.03	0.15
(2,152)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:H	3	0.16	0.04	0.14
(2,202)	1:7:A:LEU:HD21	1:10:A:GLN:HG2	3	0.16	0.02	0.15
(2,202)	1:7:A:LEU:HD22	1:10:A:GLN:HG2	3	0.16	0.02	0.15
(2,202)	1:7:A:LEU:HD23	1:10:A:GLN:HG2	3	0.16	0.02	0.15
(2,202)	1:7:A:LEU:HD21	1:10:A:GLN:HG3	3	0.16	0.02	0.15
(2,202)	1:7:A:LEU:HD22	1:10:A:GLN:HG3	3	0.16	0.02	0.15
(2,202)	1:7:A:LEU:HD23	1:10:A:GLN:HG3	3	0.16	0.02	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(3,128)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:H	3	0.16	0.04	0.14
(3,166)	1:7:A:LEU:HD21	1:10:A:GLN:HG2	3	0.16	0.02	0.15
(3,166)	1:7:A:LEU:HD22	1:10:A:GLN:HG2	3	0.16	0.02	0.15
(3,166)	1:7:A:LEU:HD23	1:10:A:GLN:HG2	3	0.16	0.02	0.15
(3,166)	1:7:A:LEU:HD21	1:10:A:GLN:HG3	3	0.16	0.02	0.15
(3,166)	1:7:A:LEU:HD22	1:10:A:GLN:HG3	3	0.16	0.02	0.15
(3,166)	1:7:A:LEU:HD23	1:10:A:GLN:HG3	3	0.16	0.02	0.15
(2,64)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD2	3	0.15	0.06	0.13
(2,64)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD3	3	0.15	0.06	0.13
(3,55)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD2	3	0.15	0.06	0.13
(3,55)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD3	3	0.15	0.06	0.13
(2,139)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HG13	3	0.14	0.02	0.14
(2,139)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HG13	3	0.14	0.02	0.14
(3,122)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HG13	3	0.14	0.02	0.14
(3,122)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HG13	3	0.14	0.02	0.14
(1,192)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HA	2	1.72	0.1	1.72
(1,192)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HA	2	1.72	0.1	1.72
(1,192)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HA	2	1.72	0.1	1.72
(1,14)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG2	2	1.3	0.09	1.3
(1,14)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG3	2	1.3	0.09	1.3
(2,170)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HD2	2	1.1	0.18	1.1
(3,144)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HD2	2	1.1	0.18	1.1
(1,45)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HG3	2	1.0	0.02	1.0
(2,203)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB2	2	0.9	0.78	0.9
(2,203)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB2	2	0.9	0.78	0.9
(2,203)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB2	2	0.9	0.78	0.9
(3,167)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB2	2	0.9	0.78	0.9
(3,167)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB2	2	0.9	0.78	0.9
(3,167)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB2	2	0.9	0.78	0.9
(2,213)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB2	2	0.9	0.78	0.9
(2,213)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB2	2	0.9	0.78	0.9
(2,213)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB2	2	0.9	0.78	0.9
(3,174)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB2	2	0.9	0.78	0.9
(3,174)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB2	2	0.9	0.78	0.9
(3,174)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB2	2	0.9	0.78	0.9
(2,169)	1:21:A:ARG:HG2	1:22:A:PRO:HD2	2	0.78	0.57	0.78
(3,143)	1:21:A:ARG:HG2	1:22:A:PRO:HD2	2	0.78	0.57	0.78
(1,198)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA3	2	0.59	0.05	0.59
(1,198)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA3	2	0.59	0.05	0.59
(1,198)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA3	2	0.59	0.05	0.59
(1,43)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB2	2	0.51	0.19	0.51
(1,187)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG11	2	0.32	0.14	0.32

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,187)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG12	2	0.32	0.14	0.32
(1,187)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG13	2	0.32	0.14	0.32
(1,187)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	2	0.32	0.14	0.32
(1,187)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	2	0.32	0.14	0.32
(1,187)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	2	0.32	0.14	0.32
(1,187)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG11	2	0.32	0.14	0.32
(1,187)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG12	2	0.32	0.14	0.32
(1,187)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG13	2	0.32	0.14	0.32
(1,187)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG21	2	0.32	0.14	0.32
(1,187)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG22	2	0.32	0.14	0.32
(1,187)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG23	2	0.32	0.14	0.32
(2,2)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD3	2	0.3	0.04	0.3
(3,2)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD3	2	0.3	0.04	0.3
(1,51)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	2	0.25	0.02	0.25
(2,135)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HG12	2	0.24	0.1	0.24
(2,135)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HG12	2	0.24	0.1	0.24
(3,119)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HG12	2	0.24	0.1	0.24
(3,119)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HG12	2	0.24	0.1	0.24
(2,105)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HG3	2	0.22	0.04	0.22
(3,94)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HG3	2	0.22	0.04	0.22
(1,101)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HG3	2	0.18	0.0	0.18
(1,101)	1:21:A:ARG:HD3	1:21:A:ARG:HG3	2	0.18	0.0	0.18
(1,163)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG2	2	0.18	0.0	0.18
(1,163)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG3	2	0.18	0.0	0.18
(1,137)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB3	2	0.15	0.0	0.15
(1,137)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB3	2	0.15	0.0	0.15
(2,42)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB3	2	0.15	0.03	0.15
(3,36)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB3	2	0.15	0.03	0.15
(2,171)	1:23:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD2	2	0.15	0.02	0.15
(3,145)	1:23:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD2	2	0.15	0.02	0.15
(1,126)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD21	2	0.13	0.01	0.13
(1,126)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD22	2	0.13	0.01	0.13
(1,126)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD23	2	0.13	0.01	0.13
(1,126)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD21	2	0.13	0.01	0.13
(1,126)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD22	2	0.13	0.01	0.13
(1,126)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD23	2	0.13	0.01	0.13
(1,164)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HB2	2	0.12	0.01	0.12
(2,163)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG2	2	0.12	0.0	0.12
(2,163)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG3	2	0.12	0.0	0.12
(3,137)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG2	2	0.12	0.0	0.12
(3,137)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG3	2	0.12	0.0	0.12
(1,80)	1:10:A:GLN:HB3	1:10:A:GLN:HG2	2	0.11	0.0	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

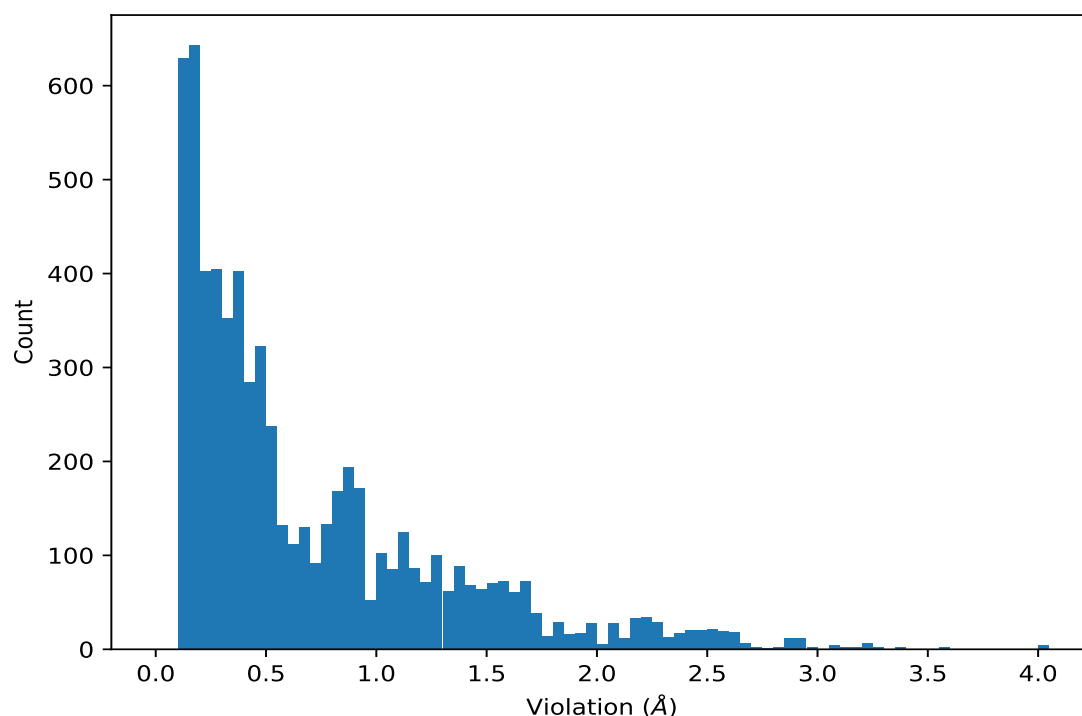
Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,80)	1:10:A:GLN:HB3	1:10:A:GLN:HG3	2	0.11	0.0	0.11
(1,88)	1:8:A:TYR:HD1	1:8:A:TYR:HE1	2	0.1	0.0	0.1
(1,88)	1:8:A:TYR:HD1	1:8:A:TYR:HE2	2	0.1	0.0	0.1
(1,88)	1:8:A:TYR:HD2	1:8:A:TYR:HE1	2	0.1	0.0	0.1
(1,88)	1:8:A:TYR:HD2	1:8:A:TYR:HE2	2	0.1	0.0	0.1

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)
(3,146)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD3	5	4.02
(3,146)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD3	5	4.02
(2,172)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD3	5	4.02
(2,172)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD3	5	4.02
(4,40)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG3	7	3.55
(2,220)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG3	7	3.55
(4,40)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG3	6	3.35
(2,220)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG3	6	3.35
(4,40)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG3	1	3.27
(2,220)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG3	1	3.27
(4,40)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG3	8	3.24
(4,40)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG3	9	3.24
(2,220)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG3	8	3.24
(2,220)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG3	9	3.24
(4,27)	1:6:A:ARG:HD2	1:10:A:GLN:HB3	9	3.21
(2,174)	1:6:A:ARG:HD2	1:10:A:GLN:HB3	9	3.21
(4,40)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG3	5	3.15
(2,220)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG3	5	3.15
(4,40)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG3	10	3.11
(2,220)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG3	10	3.11
(4,27)	1:6:A:ARG:HD2	1:10:A:GLN:HB3	3	3.09
(2,174)	1:6:A:ARG:HD2	1:10:A:GLN:HB3	3	3.09
(4,40)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG3	2	3.05
(2,220)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG3	2	3.05
(4,40)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG3	4	2.95
(2,220)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG3	4	2.95
(4,30)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:HB3	4	2.92
(4,30)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:HB3	4	2.92
(4,30)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:HB3	4	2.92
(4,30)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HB3	4	2.92
(4,30)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HB3	4	2.92
(4,30)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HB3	4	2.92
(2,186)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:HB3	4	2.92
(2,186)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:HB3	4	2.92
(2,186)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:HB3	4	2.92
(2,186)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HB3	4	2.92
(2,186)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HB3	4	2.92
(2,186)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HB3	4	2.92
(4,30)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:HB3	5	2.89
(4,30)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:HB3	5	2.89
(4,30)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:HB3	5	2.89
(4,30)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HB3	5	2.89
(4,30)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HB3	5	2.89

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,30)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HB3	5	2.89
(2,186)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:HB3	5	2.89
(2,186)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:HB3	5	2.89
(2,186)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:HB3	5	2.89
(2,186)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HB3	5	2.89
(2,186)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HB3	5	2.89
(2,186)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HB3	5	2.89
(4,23)	1:11:A:TRP:HD1	1:23:A:PRO:HA	7	2.81
(2,149)	1:11:A:TRP:HD1	1:23:A:PRO:HA	7	2.81
(1,220)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG3	7	2.78
(4,27)	1:6:A:ARG:HD2	1:10:A:GLN:HB3	6	2.71
(2,174)	1:6:A:ARG:HD2	1:10:A:GLN:HB3	6	2.71
(4,38)	1:12:A:LEU:HD11	1:13:A:LYS:HG2	3	2.69
(4,38)	1:12:A:LEU:HD12	1:13:A:LYS:HG2	3	2.69
(4,38)	1:12:A:LEU:HD13	1:13:A:LYS:HG2	3	2.69
(2,207)	1:12:A:LEU:HD11	1:13:A:LYS:HG2	3	2.69
(2,207)	1:12:A:LEU:HD12	1:13:A:LYS:HG2	3	2.69
(2,207)	1:12:A:LEU:HD13	1:13:A:LYS:HG2	3	2.69
(4,30)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:HB3	6	2.62
(4,30)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:HB3	6	2.62
(4,30)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:HB3	6	2.62
(4,30)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HB3	6	2.62
(4,30)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HB3	6	2.62
(4,30)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HB3	6	2.62
(2,186)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:HB3	6	2.62
(2,186)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:HB3	6	2.62
(2,186)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:HB3	6	2.62
(2,186)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HB3	6	2.62
(2,186)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HB3	6	2.62
(2,186)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HB3	6	2.62
(4,32)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HA	6	2.61
(4,32)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HA	6	2.61
(4,32)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HA	6	2.61
(2,192)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HA	6	2.61
(2,192)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HA	6	2.61
(2,192)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HA	6	2.61
(4,27)	1:6:A:ARG:HD2	1:10:A:GLN:HB3	1	2.59
(2,174)	1:6:A:ARG:HD2	1:10:A:GLN:HB3	1	2.59
(4,27)	1:6:A:ARG:HD2	1:10:A:GLN:HB3	4	2.58
(2,174)	1:6:A:ARG:HD2	1:10:A:GLN:HB3	4	2.58
(1,220)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG3	6	2.58
(4,40)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG3	3	2.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,220)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG3	3	2.56
(4,36)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	9	2.55
(4,36)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	9	2.55
(4,36)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	9	2.55
(4,36)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG3	9	2.55
(4,36)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG3	9	2.55
(4,36)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG3	9	2.55
(2,201)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	9	2.55
(2,201)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	9	2.55
(2,201)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	9	2.55
(2,201)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG3	9	2.55
(2,201)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG3	9	2.55
(2,201)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG3	9	2.55
(4,38)	1:12:A:LEU:HD11	1:13:A:LYS:HG2	9	2.52
(4,38)	1:12:A:LEU:HD12	1:13:A:LYS:HG2	9	2.52
(4,38)	1:12:A:LEU:HD13	1:13:A:LYS:HG2	9	2.52
(2,207)	1:12:A:LEU:HD11	1:13:A:LYS:HG2	9	2.52
(2,207)	1:12:A:LEU:HD12	1:13:A:LYS:HG2	9	2.52
(2,207)	1:12:A:LEU:HD13	1:13:A:LYS:HG2	9	2.52
(4,30)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:HB3	3	2.5
(4,30)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:HB3	3	2.5
(4,30)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:HB3	3	2.5
(4,30)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HB3	3	2.5
(4,30)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HB3	3	2.5
(4,30)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HB3	3	2.5
(4,27)	1:6:A:ARG:HD2	1:10:A:GLN:HB3	8	2.5
(2,186)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:HB3	3	2.5
(2,186)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:HB3	3	2.5
(2,186)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:HB3	3	2.5
(2,186)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HB3	3	2.5
(2,186)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HB3	3	2.5
(2,186)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HB3	3	2.5
(2,174)	1:6:A:ARG:HD2	1:10:A:GLN:HB3	8	2.5
(1,220)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG3	1	2.5
(4,34)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:HB2	4	2.47
(4,34)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:HB2	4	2.47
(4,34)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:HB2	4	2.47
(2,196)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:HB2	4	2.47
(2,196)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:HB2	4	2.47
(2,196)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:HB2	4	2.47
(1,220)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG3	8	2.47
(1,220)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG3	9	2.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,36)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	3	2.45
(4,36)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	3	2.45
(4,36)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	3	2.45
(4,36)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG3	3	2.45
(4,36)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG3	3	2.45
(4,36)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG3	3	2.45
(2,201)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	3	2.45
(2,201)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	3	2.45
(2,201)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	3	2.45
(2,201)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG3	3	2.45
(2,201)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG3	3	2.45
(2,201)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG3	3	2.45
(4,27)	1:6:A:ARG:HD2	1:10:A:GLN:HB3	2	2.44
(2,174)	1:6:A:ARG:HD2	1:10:A:GLN:HB3	2	2.44
(4,36)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	2	2.42
(4,36)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	2	2.42
(4,36)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	2	2.42
(4,36)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG3	2	2.42
(4,36)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG3	2	2.42
(4,36)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG3	2	2.42
(2,201)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	2	2.42
(2,201)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	2	2.42
(2,201)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	2	2.42
(2,201)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG3	2	2.42
(2,201)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG3	2	2.42
(2,201)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG3	2	2.42
(4,32)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HA	4	2.4
(4,32)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HA	4	2.4
(4,32)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HA	4	2.4
(2,192)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HA	4	2.4
(2,192)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HA	4	2.4
(2,192)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HA	4	2.4
(4,25)	1:6:A:ARG:HB2	1:9:A:ILE:H	1	2.39
(4,25)	1:6:A:ARG:HB3	1:9:A:ILE:H	1	2.39
(2,158)	1:6:A:ARG:HB2	1:9:A:ILE:H	1	2.39
(2,158)	1:6:A:ARG:HB3	1:9:A:ILE:H	1	2.39
(1,220)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG3	5	2.38
(4,36)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	1	2.36
(4,36)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	1	2.36
(4,36)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	1	2.36
(4,36)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG3	1	2.36
(4,36)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG3	1	2.36

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,36)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG3	1	2.36
(2,201)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	1	2.36
(2,201)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	1	2.36
(2,201)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	1	2.36
(2,201)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG3	1	2.36
(2,201)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG3	1	2.36
(2,201)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG3	1	2.36
(1,220)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG3	10	2.34
(4,36)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	5	2.32
(4,36)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	5	2.32
(4,36)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	5	2.32
(4,36)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG3	5	2.32
(4,36)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG3	5	2.32
(4,36)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG3	5	2.32
(2,201)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	5	2.32
(2,201)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	5	2.32
(2,201)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	5	2.32
(2,201)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG3	5	2.32
(2,201)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG3	5	2.32
(2,201)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG3	5	2.32
(4,30)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:HB3	2	2.28
(4,30)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:HB3	2	2.28
(4,30)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:HB3	2	2.28
(4,30)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HB3	2	2.28
(4,30)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HB3	2	2.28
(4,30)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HB3	2	2.28
(2,186)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:HB3	2	2.28
(2,186)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:HB3	2	2.28
(2,186)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:HB3	2	2.28
(2,186)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HB3	2	2.28
(2,186)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HB3	2	2.28
(2,186)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HB3	2	2.28
(1,220)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG3	2	2.28
(4,36)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	4	2.26
(4,36)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	4	2.26
(4,36)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	4	2.26
(4,36)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG3	4	2.26
(4,36)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG3	4	2.26
(4,36)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG3	4	2.26
(2,201)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	4	2.26
(2,201)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	4	2.26
(2,201)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	4	2.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,201)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG3	4	2.26
(2,201)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG3	4	2.26
(2,201)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG3	4	2.26
(4,25)	1:6:A:ARG:HB2	1:9:A:ILE:H	8	2.25
(4,25)	1:6:A:ARG:HB3	1:9:A:ILE:H	8	2.25
(2,158)	1:6:A:ARG:HB2	1:9:A:ILE:H	8	2.25
(2,158)	1:6:A:ARG:HB3	1:9:A:ILE:H	8	2.25
(4,34)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:HB2	6	2.24
(4,34)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:HB2	6	2.24
(4,34)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:HB2	6	2.24
(4,25)	1:6:A:ARG:HB2	1:9:A:ILE:H	10	2.24
(4,25)	1:6:A:ARG:HB3	1:9:A:ILE:H	10	2.24
(4,23)	1:11:A:TRP:HD1	1:23:A:PRO:HA	9	2.24
(2,196)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:HB2	6	2.24
(2,196)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:HB2	6	2.24
(2,196)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:HB2	6	2.24
(2,158)	1:6:A:ARG:HB2	1:9:A:ILE:H	10	2.24
(2,158)	1:6:A:ARG:HB3	1:9:A:ILE:H	10	2.24
(2,149)	1:11:A:TRP:HD1	1:23:A:PRO:HA	9	2.24
(4,27)	1:6:A:ARG:HD2	1:10:A:GLN:HB3	7	2.23
(2,174)	1:6:A:ARG:HD2	1:10:A:GLN:HB3	7	2.23
(4,25)	1:6:A:ARG:HB2	1:9:A:ILE:H	7	2.22
(4,25)	1:6:A:ARG:HB3	1:9:A:ILE:H	7	2.22
(2,158)	1:6:A:ARG:HB2	1:9:A:ILE:H	7	2.22
(2,158)	1:6:A:ARG:HB3	1:9:A:ILE:H	7	2.22
(4,36)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	6	2.21
(4,36)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	6	2.21
(4,36)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	6	2.21
(4,36)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG3	6	2.21
(4,36)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG3	6	2.21
(4,36)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG3	6	2.21
(2,201)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	6	2.21
(2,201)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	6	2.21
(2,201)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	6	2.21
(2,201)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG3	6	2.21
(2,201)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG3	6	2.21
(2,201)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG3	6	2.21
(4,25)	1:6:A:ARG:HB2	1:9:A:ILE:H	9	2.2
(4,25)	1:6:A:ARG:HB3	1:9:A:ILE:H	9	2.2
(2,158)	1:6:A:ARG:HB2	1:9:A:ILE:H	9	2.2
(2,158)	1:6:A:ARG:HB3	1:9:A:ILE:H	9	2.2
(4,33)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HA	2	2.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,33)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HA	2	2.19
(4,33)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HA	2	2.19
(4,25)	1:6:A:ARG:HB2	1:9:A:ILE:H	2	2.19
(4,25)	1:6:A:ARG:HB3	1:9:A:ILE:H	2	2.19
(2,193)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HA	2	2.19
(2,193)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HA	2	2.19
(2,193)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HA	2	2.19
(2,158)	1:6:A:ARG:HB2	1:9:A:ILE:H	2	2.19
(2,158)	1:6:A:ARG:HB3	1:9:A:ILE:H	2	2.19
(4,33)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HA	4	2.18
(4,33)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HA	4	2.18
(4,33)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HA	4	2.18
(2,193)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HA	4	2.18
(2,193)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HA	4	2.18
(2,193)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HA	4	2.18
(1,220)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG3	4	2.18
(4,3)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG2	7	2.17
(4,3)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG3	7	2.17
(2,14)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG2	7	2.17
(2,14)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG3	7	2.17
(4,30)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:HB3	9	2.15
(4,30)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:HB3	9	2.15
(4,30)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:HB3	9	2.15
(4,30)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HB3	9	2.15
(4,30)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HB3	9	2.15
(4,30)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HB3	9	2.15
(2,186)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:HB3	9	2.15
(2,186)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:HB3	9	2.15
(2,186)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:HB3	9	2.15
(2,186)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HB3	9	2.15
(2,186)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HB3	9	2.15
(2,186)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HB3	9	2.15
(1,186)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:HB3	4	2.13
(1,186)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:HB3	4	2.13
(1,186)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:HB3	4	2.13
(1,186)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HB3	4	2.13
(1,186)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HB3	4	2.13
(1,186)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HB3	4	2.13
(1,186)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:HB3	5	2.1
(1,186)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:HB3	5	2.1
(1,186)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:HB3	5	2.1
(1,186)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HB3	5	2.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,186)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HB3	5	2.1
(1,186)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HB3	5	2.1
(4,25)	1:6:A:ARG:HB2	1:9:A:ILE:H	3	2.08
(4,25)	1:6:A:ARG:HB3	1:9:A:ILE:H	3	2.08
(2,158)	1:6:A:ARG:HB2	1:9:A:ILE:H	3	2.08
(2,158)	1:6:A:ARG:HB3	1:9:A:ILE:H	3	2.08
(4,28)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	7	2.07
(4,28)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	7	2.07
(4,28)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	7	2.07
(4,28)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB1	7	2.07
(4,28)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB2	7	2.07
(4,28)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB3	7	2.07
(2,178)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	7	2.07
(2,178)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	7	2.07
(2,178)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	7	2.07
(2,178)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB1	7	2.07
(2,178)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB2	7	2.07
(2,178)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB3	7	2.07
(4,28)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	3	2.06
(4,28)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	3	2.06
(4,28)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	3	2.06
(4,28)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB1	3	2.06
(4,28)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB2	3	2.06
(4,28)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB3	3	2.06
(2,178)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	3	2.06
(2,178)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	3	2.06
(2,178)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	3	2.06
(2,178)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB1	3	2.06
(2,178)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB2	3	2.06
(2,178)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB3	3	2.06
(1,172)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD2	5	2.04
(1,172)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD3	5	2.04
(1,172)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD2	5	2.04
(1,172)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD3	5	2.04
(1,149)	1:11:A:TRP:HD1	1:23:A:PRO:HA	7	2.02
(4,3)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG2	6	1.99
(4,3)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG3	6	1.99
(2,14)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG2	6	1.99
(2,14)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG3	6	1.99
(4,28)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	9	1.95
(4,28)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	9	1.95
(4,28)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	9	1.95

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,28)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB1	9	1.95
(4,28)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB2	9	1.95
(4,28)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB3	9	1.95
(4,28)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	10	1.95
(4,28)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	10	1.95
(4,28)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	10	1.95
(4,28)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB1	10	1.95
(4,28)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB2	10	1.95
(4,28)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB3	10	1.95
(2,178)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	9	1.95
(2,178)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	9	1.95
(2,178)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	9	1.95
(2,178)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB1	9	1.95
(2,178)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB2	9	1.95
(2,178)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB3	9	1.95
(2,178)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	10	1.95
(2,178)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	10	1.95
(2,178)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	10	1.95
(2,178)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB1	10	1.95
(2,178)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB2	10	1.95
(2,178)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB3	10	1.95
(4,30)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:HB3	7	1.93
(4,30)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:HB3	7	1.93
(4,30)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:HB3	7	1.93
(4,30)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HB3	7	1.93
(4,30)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HB3	7	1.93
(4,30)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HB3	7	1.93
(4,27)	1:6:A:ARG:HD2	1:10:A:GLN:HB3	10	1.93
(2,186)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:HB3	7	1.93
(2,186)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:HB3	7	1.93
(2,186)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:HB3	7	1.93
(2,186)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HB3	7	1.93
(2,186)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HB3	7	1.93
(2,186)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HB3	7	1.93
(2,174)	1:6:A:ARG:HD2	1:10:A:GLN:HB3	10	1.93
(1,207)	1:12:A:LEU:HD11	1:13:A:LYS:HG2	3	1.93
(1,207)	1:12:A:LEU:HD12	1:13:A:LYS:HG2	3	1.93
(1,207)	1:12:A:LEU:HD13	1:13:A:LYS:HG2	3	1.93
(4,33)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HA	1	1.88
(4,33)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HA	1	1.88
(4,33)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HA	1	1.88
(4,25)	1:6:A:ARG:HB2	1:9:A:ILE:H	6	1.88

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,25)	1:6:A:ARG:HB3	1:9:A:ILE:H	6	1.88
(4,23)	1:11:A:TRP:HD1	1:23:A:PRO:HA	3	1.88
(2,193)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HA	1	1.88
(2,193)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HA	1	1.88
(2,193)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HA	1	1.88
(2,158)	1:6:A:ARG:HB2	1:9:A:ILE:H	6	1.88
(2,158)	1:6:A:ARG:HB3	1:9:A:ILE:H	6	1.88
(2,149)	1:11:A:TRP:HD1	1:23:A:PRO:HA	3	1.88
(4,18)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	1	1.86
(4,18)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	1	1.86
(2,141)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	1	1.86
(2,141)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	1	1.86
(1,186)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:HB3	6	1.84
(1,186)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:HB3	6	1.84
(1,186)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:HB3	6	1.84
(1,186)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HB3	6	1.84
(1,186)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HB3	6	1.84
(1,186)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HB3	6	1.84
(4,18)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	5	1.83
(4,18)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	5	1.83
(2,141)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	5	1.83
(2,141)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	5	1.83
(1,192)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HA	6	1.83
(1,192)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HA	6	1.83
(1,192)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HA	6	1.83
(4,18)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	2	1.82
(4,18)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	2	1.82
(2,141)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	2	1.82
(2,141)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	2	1.82
(4,25)	1:6:A:ARG:HB2	1:9:A:ILE:H	4	1.81
(4,25)	1:6:A:ARG:HB3	1:9:A:ILE:H	4	1.81
(4,18)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	7	1.81
(4,18)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	7	1.81
(4,18)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	8	1.81
(4,18)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	8	1.81
(2,158)	1:6:A:ARG:HB2	1:9:A:ILE:H	4	1.81
(2,158)	1:6:A:ARG:HB3	1:9:A:ILE:H	4	1.81
(2,141)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	7	1.81
(2,141)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	7	1.81
(2,141)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	8	1.81
(2,141)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	8	1.81
(1,220)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG3	3	1.79

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,201)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	9	1.78
(1,201)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	9	1.78
(1,201)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	9	1.78
(1,201)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG3	9	1.78
(1,201)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG3	9	1.78
(1,201)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG3	9	1.78
(4,18)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	4	1.77
(4,18)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	4	1.77
(2,141)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	4	1.77
(2,141)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	4	1.77
(1,207)	1:12:A:LEU:HD11	1:13:A:LYS:HG2	9	1.76
(1,207)	1:12:A:LEU:HD12	1:13:A:LYS:HG2	9	1.76
(1,207)	1:12:A:LEU:HD13	1:13:A:LYS:HG2	9	1.76
(4,30)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:HB3	8	1.74
(4,30)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:HB3	8	1.74
(4,30)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:HB3	8	1.74
(4,30)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HB3	8	1.74
(4,30)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HB3	8	1.74
(4,30)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HB3	8	1.74
(2,186)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:HB3	8	1.74
(2,186)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:HB3	8	1.74
(2,186)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:HB3	8	1.74
(2,186)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HB3	8	1.74
(2,186)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HB3	8	1.74
(2,186)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HB3	8	1.74
(1,186)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:HB3	3	1.72
(1,186)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:HB3	3	1.72
(1,186)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:HB3	3	1.72
(1,186)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HB3	3	1.72
(1,186)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HB3	3	1.72
(1,186)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HB3	3	1.72
(4,18)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	3	1.71
(4,18)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	3	1.71
(4,18)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	9	1.71
(4,18)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	9	1.71
(2,141)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	3	1.71
(2,141)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	3	1.71
(2,141)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	9	1.71
(2,141)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	9	1.71
(4,33)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HA	6	1.7
(4,33)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HA	6	1.7
(4,33)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HA	6	1.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,33)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HA	10	1.7
(4,33)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HA	10	1.7
(4,33)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HA	10	1.7
(2,193)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HA	6	1.7
(2,193)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HA	6	1.7
(2,193)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HA	6	1.7
(2,193)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HA	10	1.7
(2,193)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HA	10	1.7
(2,193)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HA	10	1.7
(3,162)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	7	1.69
(3,162)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	7	1.69
(3,162)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	7	1.69
(2,195)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	7	1.69
(2,195)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	7	1.69
(2,195)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	7	1.69
(1,196)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:HB2	4	1.69
(1,196)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:HB2	4	1.69
(1,196)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:HB2	4	1.69
(4,18)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	6	1.68
(4,18)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	6	1.68
(3,167)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB2	9	1.68
(3,167)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB2	9	1.68
(3,167)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB2	9	1.68
(2,203)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB2	9	1.68
(2,203)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB2	9	1.68
(2,203)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB2	9	1.68
(2,141)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	6	1.68
(2,141)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	6	1.68
(1,201)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	3	1.68
(1,201)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	3	1.68
(1,201)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	3	1.68
(1,201)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG3	3	1.68
(1,201)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG3	3	1.68
(1,201)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG3	3	1.68
(3,174)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB2	9	1.67
(3,174)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB2	9	1.67
(3,174)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB2	9	1.67
(2,213)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB2	9	1.67
(2,213)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB2	9	1.67
(2,213)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB2	9	1.67
(4,16)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	7	1.66
(4,16)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	7	1.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,16)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	7	1.66
(4,16)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	7	1.66
(4,16)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	7	1.66
(4,16)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	7	1.66
(4,16)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	8	1.66
(4,16)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	8	1.66
(4,16)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	8	1.66
(4,16)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	8	1.66
(4,16)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	8	1.66
(4,16)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	8	1.66
(2,127)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	7	1.66
(2,127)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	7	1.66
(2,127)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	7	1.66
(2,127)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	7	1.66
(2,127)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	7	1.66
(2,127)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	7	1.66
(2,127)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	8	1.66
(2,127)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	8	1.66
(2,127)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	8	1.66
(2,127)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	8	1.66
(2,127)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	8	1.66
(2,127)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	8	1.66
(3,162)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	2	1.65
(3,162)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	2	1.65
(3,162)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	2	1.65
(3,162)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	6	1.65
(3,162)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	6	1.65
(3,162)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	6	1.65
(2,195)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	2	1.65
(2,195)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	2	1.65
(2,195)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	2	1.65
(2,195)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	6	1.65
(2,195)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	6	1.65
(2,195)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	6	1.65
(1,201)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	2	1.65
(1,201)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	2	1.65
(1,201)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	2	1.65
(1,201)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG3	2	1.65
(1,201)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG3	2	1.65
(1,201)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG3	2	1.65
(4,22)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HZ2	7	1.64
(3,162)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	4	1.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,162)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	4	1.64
(3,162)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	4	1.64
(2,195)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	4	1.64
(2,195)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	4	1.64
(2,195)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	4	1.64
(2,148)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HZ2	7	1.64
(4,22)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HZ2	3	1.63
(4,22)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HZ2	6	1.63
(4,22)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HZ2	9	1.63
(2,148)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HZ2	3	1.63
(2,148)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HZ2	6	1.63
(2,148)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HZ2	9	1.63
(4,22)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HZ2	1	1.62
(4,22)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HZ2	2	1.62
(4,22)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HZ2	4	1.62
(4,22)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HZ2	10	1.62
(3,153)	1:6:A:ARG:HG2	1:7:A:LEU:HB2	5	1.62
(3,151)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	6	1.62
(3,151)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	6	1.62
(3,151)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	6	1.62
(2,182)	1:6:A:ARG:HG2	1:7:A:LEU:HB2	5	1.62
(2,179)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	6	1.62
(2,179)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	6	1.62
(2,179)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	6	1.62
(2,148)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HZ2	1	1.62
(2,148)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HZ2	2	1.62
(2,148)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HZ2	4	1.62
(2,148)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HZ2	10	1.62
(1,192)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HA	4	1.62
(1,192)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HA	4	1.62
(1,192)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HA	4	1.62
(4,35)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD21	6	1.61
(4,35)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD22	6	1.61
(4,35)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD23	6	1.61
(4,35)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD21	6	1.61
(4,35)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD22	6	1.61
(4,35)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD23	6	1.61
(4,33)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HA	5	1.61
(4,33)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HA	5	1.61
(4,33)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HA	5	1.61
(4,22)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HZ2	5	1.61
(4,22)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HZ2	8	1.61

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,200)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD21	6	1.61
(2,200)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD22	6	1.61
(2,200)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD23	6	1.61
(2,200)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD21	6	1.61
(2,200)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD22	6	1.61
(2,200)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD23	6	1.61
(2,193)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HA	5	1.61
(2,193)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HA	5	1.61
(2,193)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HA	5	1.61
(2,148)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HZ2	5	1.61
(2,148)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HZ2	8	1.61
(1,158)	1:6:A:ARG:HB2	1:9:A:ILE:H	1	1.61
(1,158)	1:6:A:ARG:HB3	1:9:A:ILE:H	1	1.61
(3,147)	1:6:A:ARG:HD2	1:10:A:GLN:HG2	1	1.6
(3,147)	1:6:A:ARG:HD2	1:10:A:GLN:HG3	1	1.6
(2,173)	1:6:A:ARG:HD2	1:10:A:GLN:HG2	1	1.6
(2,173)	1:6:A:ARG:HD2	1:10:A:GLN:HG3	1	1.6
(3,151)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	9	1.59
(3,151)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	9	1.59
(3,151)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	9	1.59
(2,179)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	9	1.59
(2,179)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	9	1.59
(2,179)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	9	1.59
(1,201)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	1	1.59
(1,201)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	1	1.59
(1,201)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	1	1.59
(1,201)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG3	1	1.59
(1,201)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG3	1	1.59
(1,201)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG3	1	1.59
(3,151)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	1	1.58
(3,151)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	1	1.58
(3,151)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	1	1.58
(3,151)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	5	1.58
(3,151)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	5	1.58
(3,151)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	5	1.58
(3,151)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	10	1.58
(3,151)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	10	1.58
(3,151)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	10	1.58
(2,179)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	1	1.58
(2,179)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	1	1.58
(2,179)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	1	1.58
(2,179)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	5	1.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,179)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	5	1.58
(2,179)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	5	1.58
(2,179)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	10	1.58
(2,179)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	10	1.58
(2,179)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	10	1.58
(4,35)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD21	5	1.57
(4,35)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD22	5	1.57
(4,35)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD23	5	1.57
(4,35)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD21	5	1.57
(4,35)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD22	5	1.57
(4,35)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD23	5	1.57
(3,162)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	1	1.57
(3,162)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	1	1.57
(3,162)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	1	1.57
(3,151)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	3	1.57
(3,151)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	3	1.57
(3,151)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	3	1.57
(2,200)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD21	5	1.57
(2,200)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD22	5	1.57
(2,200)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD23	5	1.57
(2,200)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD21	5	1.57
(2,200)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD22	5	1.57
(2,200)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD23	5	1.57
(2,195)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	1	1.57
(2,195)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	1	1.57
(2,195)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	1	1.57
(2,179)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	3	1.57
(2,179)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	3	1.57
(2,179)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	3	1.57
(4,16)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	4	1.56
(4,16)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	4	1.56
(4,16)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	4	1.56
(4,16)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	4	1.56
(4,16)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	4	1.56
(4,16)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	4	1.56
(2,127)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	4	1.56
(2,127)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	4	1.56
(2,127)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	4	1.56
(2,127)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	4	1.56
(2,127)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	4	1.56
(2,127)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	4	1.56
(1,201)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	5	1.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,201)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	5	1.55
(1,201)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	5	1.55
(1,201)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG3	5	1.55
(1,201)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG3	5	1.55
(1,201)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG3	5	1.55
(4,18)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	10	1.54
(4,18)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	10	1.54
(2,141)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	10	1.54
(2,141)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	10	1.54
(4,36)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	10	1.53
(4,36)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	10	1.53
(4,36)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	10	1.53
(4,36)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG3	10	1.53
(4,36)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG3	10	1.53
(4,36)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG3	10	1.53
(3,147)	1:6:A:ARG:HD2	1:10:A:GLN:HG2	8	1.53
(3,147)	1:6:A:ARG:HD2	1:10:A:GLN:HG3	8	1.53
(2,201)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	10	1.53
(2,201)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	10	1.53
(2,201)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	10	1.53
(2,201)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG3	10	1.53
(2,201)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG3	10	1.53
(2,201)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG3	10	1.53
(2,173)	1:6:A:ARG:HD2	1:10:A:GLN:HG2	8	1.53
(2,173)	1:6:A:ARG:HD2	1:10:A:GLN:HG3	8	1.53
(4,35)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD21	1	1.52
(4,35)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD22	1	1.52
(4,35)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD23	1	1.52
(4,35)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD21	1	1.52
(4,35)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD22	1	1.52
(4,35)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD23	1	1.52
(4,34)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:HB2	5	1.52
(4,34)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:HB2	5	1.52
(4,34)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:HB2	5	1.52
(3,146)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD3	1	1.52
(3,146)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD3	1	1.52
(2,200)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD21	1	1.52
(2,200)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD22	1	1.52
(2,200)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD23	1	1.52
(2,200)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD21	1	1.52
(2,200)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD22	1	1.52
(2,200)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD23	1	1.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,196)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:HB2	5	1.52
(2,196)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:HB2	5	1.52
(2,196)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:HB2	5	1.52
(2,172)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD3	1	1.52
(2,172)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD3	1	1.52
(3,151)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	2	1.51
(3,151)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	2	1.51
(3,151)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	2	1.51
(2,179)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	2	1.51
(2,179)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	2	1.51
(2,179)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	2	1.51
(4,16)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	2	1.5
(4,16)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	2	1.5
(4,16)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	2	1.5
(4,16)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	2	1.5
(4,16)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	2	1.5
(4,16)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	2	1.5
(3,147)	1:6:A:ARG:HD2	1:10:A:GLN:HG2	10	1.5
(3,147)	1:6:A:ARG:HD2	1:10:A:GLN:HG3	10	1.5
(2,173)	1:6:A:ARG:HD2	1:10:A:GLN:HG2	10	1.5
(2,173)	1:6:A:ARG:HD2	1:10:A:GLN:HG3	10	1.5
(2,127)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	2	1.5
(2,127)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	2	1.5
(2,127)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	2	1.5
(2,127)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	2	1.5
(2,127)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	2	1.5
(2,127)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	2	1.5
(1,186)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:HB3	2	1.5
(1,186)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:HB3	2	1.5
(1,186)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:HB3	2	1.5
(1,186)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HB3	2	1.5
(1,186)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HB3	2	1.5
(1,186)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HB3	2	1.5
(4,23)	1:11:A:TRP:HD1	1:23:A:PRO:HA	10	1.49
(2,149)	1:11:A:TRP:HD1	1:23:A:PRO:HA	10	1.49
(1,201)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	4	1.49
(1,201)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	4	1.49
(1,201)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	4	1.49
(1,201)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG3	4	1.49
(1,201)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG3	4	1.49
(1,201)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG3	4	1.49
(3,171)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD21	9	1.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,171)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD22	9	1.48
(3,171)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD23	9	1.48
(2,209)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD21	9	1.48
(2,209)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD22	9	1.48
(2,209)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD23	9	1.48
(4,30)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:HB3	1	1.47
(4,30)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:HB3	1	1.47
(4,30)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:HB3	1	1.47
(4,30)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HB3	1	1.47
(4,30)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HB3	1	1.47
(4,30)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HB3	1	1.47
(2,186)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:HB3	1	1.47
(2,186)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:HB3	1	1.47
(2,186)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:HB3	1	1.47
(2,186)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HB3	1	1.47
(2,186)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HB3	1	1.47
(2,186)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HB3	1	1.47
(1,158)	1:6:A:ARG:HB2	1:9:A:ILE:H	8	1.47
(1,158)	1:6:A:ARG:HB3	1:9:A:ILE:H	8	1.47
(1,143)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG2	10	1.47
(1,143)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG2	10	1.47
(4,25)	1:6:A:ARG:HB2	1:9:A:ILE:H	5	1.46
(4,25)	1:6:A:ARG:HB3	1:9:A:ILE:H	5	1.46
(3,176)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HE2	9	1.46
(3,176)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HE2	9	1.46
(3,176)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HE2	9	1.46
(3,151)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	7	1.46
(3,151)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	7	1.46
(3,151)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	7	1.46
(2,215)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HE2	9	1.46
(2,215)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HE2	9	1.46
(2,215)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HE2	9	1.46
(2,179)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	7	1.46
(2,179)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	7	1.46
(2,179)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	7	1.46
(2,158)	1:6:A:ARG:HB2	1:9:A:ILE:H	5	1.46
(2,158)	1:6:A:ARG:HB3	1:9:A:ILE:H	5	1.46
(1,196)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:HB2	6	1.46
(1,196)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:HB2	6	1.46
(1,196)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:HB2	6	1.46
(1,158)	1:6:A:ARG:HB2	1:9:A:ILE:H	10	1.46
(1,158)	1:6:A:ARG:HB3	1:9:A:ILE:H	10	1.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,149)	1:11:A:TRP:HD1	1:23:A:PRO:HA	9	1.46
(4,16)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	6	1.45
(4,16)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	6	1.45
(4,16)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	6	1.45
(4,16)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	6	1.45
(4,16)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	6	1.45
(4,16)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	6	1.45
(2,127)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	6	1.45
(2,127)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	6	1.45
(2,127)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	6	1.45
(2,127)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	6	1.45
(2,127)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	6	1.45
(2,127)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	6	1.45
(4,16)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	5	1.44
(4,16)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	5	1.44
(4,16)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	5	1.44
(4,16)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	5	1.44
(4,16)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	5	1.44
(4,16)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	5	1.44
(2,127)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	5	1.44
(2,127)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	5	1.44
(2,127)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	5	1.44
(2,127)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	5	1.44
(2,127)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	5	1.44
(2,127)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	5	1.44
(1,201)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	6	1.44
(1,201)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	6	1.44
(1,201)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	6	1.44
(1,201)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG3	6	1.44
(1,201)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG3	6	1.44
(1,201)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG3	6	1.44
(1,158)	1:6:A:ARG:HB2	1:9:A:ILE:H	7	1.44
(1,158)	1:6:A:ARG:HB3	1:9:A:ILE:H	7	1.44
(3,102)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HD2	1	1.43
(3,102)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HD2	4	1.43
(2,115)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HD2	1	1.43
(2,115)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HD2	4	1.43
(3,164)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA3	7	1.42
(3,164)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA3	7	1.42
(3,164)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA3	7	1.42
(3,102)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HD2	2	1.42
(3,102)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HD2	6	1.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,102)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HD2	7	1.42
(3,102)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HD2	8	1.42
(2,198)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA3	7	1.42
(2,198)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA3	7	1.42
(2,198)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA3	7	1.42
(2,115)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HD2	2	1.42
(2,115)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HD2	6	1.42
(2,115)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HD2	7	1.42
(2,115)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HD2	8	1.42
(1,158)	1:6:A:ARG:HB2	1:9:A:ILE:H	9	1.42
(1,158)	1:6:A:ARG:HB3	1:9:A:ILE:H	9	1.42
(3,147)	1:6:A:ARG:HD2	1:10:A:GLN:HG2	6	1.41
(3,147)	1:6:A:ARG:HD2	1:10:A:GLN:HG3	6	1.41
(3,147)	1:6:A:ARG:HD2	1:10:A:GLN:HG2	7	1.41
(3,147)	1:6:A:ARG:HD2	1:10:A:GLN:HG3	7	1.41
(2,173)	1:6:A:ARG:HD2	1:10:A:GLN:HG2	6	1.41
(2,173)	1:6:A:ARG:HD2	1:10:A:GLN:HG3	6	1.41
(2,173)	1:6:A:ARG:HD2	1:10:A:GLN:HG2	7	1.41
(2,173)	1:6:A:ARG:HD2	1:10:A:GLN:HG3	7	1.41
(1,193)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HA	2	1.41
(1,193)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HA	2	1.41
(1,193)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HA	2	1.41
(1,158)	1:6:A:ARG:HB2	1:9:A:ILE:H	2	1.41
(1,158)	1:6:A:ARG:HB3	1:9:A:ILE:H	2	1.41
(4,30)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:HB3	10	1.4
(4,30)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:HB3	10	1.4
(4,30)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:HB3	10	1.4
(4,30)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HB3	10	1.4
(4,30)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HB3	10	1.4
(4,30)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HB3	10	1.4
(2,186)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:HB3	10	1.4
(2,186)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:HB3	10	1.4
(2,186)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:HB3	10	1.4
(2,186)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HB3	10	1.4
(2,186)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HB3	10	1.4
(2,186)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HB3	10	1.4
(1,193)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HA	4	1.4
(1,193)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HA	4	1.4
(1,193)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HA	4	1.4
(4,36)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	8	1.39
(4,36)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	8	1.39
(4,36)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	8	1.39

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,36)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG3	8	1.39
(4,36)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG3	8	1.39
(4,36)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG3	8	1.39
(4,12)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	6	1.39
(4,12)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	6	1.39
(4,12)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	6	1.39
(3,153)	1:6:A:ARG:HG2	1:7:A:LEU:HB2	3	1.39
(2,201)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	8	1.39
(2,201)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	8	1.39
(2,201)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	8	1.39
(2,201)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG3	8	1.39
(2,201)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG3	8	1.39
(2,201)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG3	8	1.39
(2,182)	1:6:A:ARG:HG2	1:7:A:LEU:HB2	3	1.39
(2,110)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	6	1.39
(2,110)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	6	1.39
(2,110)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	6	1.39
(1,14)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG2	7	1.39
(1,14)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG3	7	1.39
(4,12)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	4	1.38
(4,12)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	4	1.38
(4,12)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	4	1.38
(4,12)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	5	1.38
(4,12)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	5	1.38
(4,12)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	5	1.38
(3,147)	1:6:A:ARG:HD2	1:10:A:GLN:HG2	3	1.38
(3,147)	1:6:A:ARG:HD2	1:10:A:GLN:HG3	3	1.38
(2,173)	1:6:A:ARG:HD2	1:10:A:GLN:HG2	3	1.38
(2,173)	1:6:A:ARG:HD2	1:10:A:GLN:HG3	3	1.38
(2,110)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	4	1.38
(2,110)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	4	1.38
(2,110)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	4	1.38
(2,110)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	5	1.38
(2,110)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	5	1.38
(2,110)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	5	1.38
(1,143)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG2	9	1.38
(1,143)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG2	9	1.38
(4,16)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	1	1.37
(4,16)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	1	1.37
(4,16)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	1	1.37
(4,16)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	1	1.37
(4,16)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	1	1.37

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,16)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	1	1.37
(3,102)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HD2	3	1.37
(3,102)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HD2	9	1.37
(3,102)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HD2	10	1.37
(2,127)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	1	1.37
(2,127)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	1	1.37
(2,127)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	1	1.37
(2,127)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	1	1.37
(2,127)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	1	1.37
(2,127)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	1	1.37
(2,115)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HD2	3	1.37
(2,115)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HD2	9	1.37
(2,115)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HD2	10	1.37
(1,186)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:HB3	9	1.37
(1,186)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:HB3	9	1.37
(1,186)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:HB3	9	1.37
(1,186)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HB3	9	1.37
(1,186)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HB3	9	1.37
(1,186)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HB3	9	1.37
(3,153)	1:6:A:ARG:HG2	1:7:A:LEU:HB2	6	1.36
(2,182)	1:6:A:ARG:HG2	1:7:A:LEU:HB2	6	1.36
(4,10)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	3	1.35
(4,10)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	3	1.35
(3,159)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	2	1.35
(3,159)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	2	1.35
(3,159)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	2	1.35
(3,159)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HB2	2	1.35
(3,159)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HB2	2	1.35
(3,159)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HB2	2	1.35
(3,147)	1:6:A:ARG:HD2	1:10:A:GLN:HG2	4	1.35
(3,147)	1:6:A:ARG:HD2	1:10:A:GLN:HG3	4	1.35
(3,143)	1:21:A:ARG:HG2	1:22:A:PRO:HD2	6	1.35
(2,189)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	2	1.35
(2,189)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	2	1.35
(2,189)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	2	1.35
(2,189)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HB2	2	1.35
(2,189)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HB2	2	1.35
(2,189)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HB2	2	1.35
(2,173)	1:6:A:ARG:HD2	1:10:A:GLN:HG2	4	1.35
(2,173)	1:6:A:ARG:HD2	1:10:A:GLN:HG3	4	1.35
(2,169)	1:21:A:ARG:HG2	1:22:A:PRO:HD2	6	1.35
(2,92)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	3	1.35

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,92)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	3	1.35
(3,147)	1:6:A:ARG:HD2	1:10:A:GLN:HG2	2	1.34
(3,147)	1:6:A:ARG:HD2	1:10:A:GLN:HG3	2	1.34
(2,173)	1:6:A:ARG:HD2	1:10:A:GLN:HG2	2	1.34
(2,173)	1:6:A:ARG:HD2	1:10:A:GLN:HG3	2	1.34
(4,10)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	2	1.33
(4,10)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	2	1.33
(2,92)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	2	1.33
(2,92)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	2	1.33
(4,10)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	1	1.32
(4,10)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	1	1.32
(3,164)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA3	3	1.32
(3,164)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA3	3	1.32
(3,164)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA3	3	1.32
(2,198)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA3	3	1.32
(2,198)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA3	3	1.32
(2,198)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA3	3	1.32
(2,92)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	1	1.32
(2,92)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	1	1.32
(4,28)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	4	1.31
(4,28)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	4	1.31
(4,28)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	4	1.31
(4,28)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB1	4	1.31
(4,28)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB2	4	1.31
(4,28)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB3	4	1.31
(2,178)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	4	1.31
(2,178)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	4	1.31
(2,178)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	4	1.31
(2,178)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB1	4	1.31
(2,178)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB2	4	1.31
(2,178)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB3	4	1.31
(1,155)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG13	5	1.31
(4,35)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD21	4	1.3
(4,35)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD22	4	1.3
(4,35)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD23	4	1.3
(4,35)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD21	4	1.3
(4,35)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD22	4	1.3
(4,35)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD23	4	1.3
(4,10)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	4	1.3
(4,10)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	4	1.3
(3,153)	1:6:A:ARG:HG2	1:7:A:LEU:HB2	2	1.3
(3,153)	1:6:A:ARG:HG2	1:7:A:LEU:HB2	9	1.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,200)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD21	4	1.3
(2,200)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD22	4	1.3
(2,200)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD23	4	1.3
(2,200)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD21	4	1.3
(2,200)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD22	4	1.3
(2,200)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD23	4	1.3
(2,182)	1:6:A:ARG:HG2	1:7:A:LEU:HB2	2	1.3
(2,182)	1:6:A:ARG:HG2	1:7:A:LEU:HB2	9	1.3
(2,92)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	4	1.3
(2,92)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	4	1.3
(1,178)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	7	1.3
(1,178)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	7	1.3
(1,178)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	7	1.3
(1,178)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB1	7	1.3
(1,178)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB2	7	1.3
(1,178)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB3	7	1.3
(1,158)	1:6:A:ARG:HB2	1:9:A:ILE:H	3	1.3
(1,158)	1:6:A:ARG:HB3	1:9:A:ILE:H	3	1.3
(1,155)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG13	9	1.3
(1,143)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG2	3	1.3
(1,143)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG2	3	1.3
(3,163)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD21	3	1.29
(3,163)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD22	3	1.29
(3,163)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD23	3	1.29
(3,163)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD21	9	1.29
(3,163)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD22	9	1.29
(3,163)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD23	9	1.29
(3,153)	1:6:A:ARG:HG2	1:7:A:LEU:HB2	7	1.29
(2,197)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD21	3	1.29
(2,197)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD22	3	1.29
(2,197)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD23	3	1.29
(2,197)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD21	9	1.29
(2,197)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD22	9	1.29
(2,197)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD23	9	1.29
(2,182)	1:6:A:ARG:HG2	1:7:A:LEU:HB2	7	1.29
(1,155)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG13	10	1.29
(1,143)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG2	7	1.29
(1,143)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG2	7	1.29
(1,143)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG2	8	1.29
(1,143)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG2	8	1.29
(3,171)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD21	3	1.28
(3,171)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD22	3	1.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,171)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD23	3	1.28
(3,159)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	3	1.28
(3,159)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	3	1.28
(3,159)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	3	1.28
(3,159)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HB2	3	1.28
(3,159)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HB2	3	1.28
(3,159)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HB2	3	1.28
(3,153)	1:6:A:ARG:HG2	1:7:A:LEU:HB2	1	1.28
(2,209)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD21	3	1.28
(2,209)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD22	3	1.28
(2,209)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD23	3	1.28
(2,189)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	3	1.28
(2,189)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	3	1.28
(2,189)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	3	1.28
(2,189)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HB2	3	1.28
(2,189)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HB2	3	1.28
(2,189)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HB2	3	1.28
(2,182)	1:6:A:ARG:HG2	1:7:A:LEU:HB2	1	1.28
(1,178)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	3	1.28
(1,178)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	3	1.28
(1,178)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	3	1.28
(1,178)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB1	3	1.28
(1,178)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB2	3	1.28
(1,178)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB3	3	1.28
(1,155)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG13	8	1.28
(4,33)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HA	7	1.27
(4,33)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HA	7	1.27
(4,33)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HA	7	1.27
(4,29)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	10	1.27
(4,29)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	10	1.27
(4,29)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	10	1.27
(4,29)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB1	10	1.27
(4,29)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB2	10	1.27
(4,29)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB3	10	1.27
(3,153)	1:6:A:ARG:HG2	1:7:A:LEU:HB2	10	1.27
(3,144)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HD2	6	1.27
(2,193)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HA	7	1.27
(2,193)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HA	7	1.27
(2,193)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HA	7	1.27
(2,182)	1:6:A:ARG:HG2	1:7:A:LEU:HB2	10	1.27
(2,180)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	10	1.27
(2,180)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	10	1.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,180)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	10	1.27
(2,180)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB1	10	1.27
(2,180)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB2	10	1.27
(2,180)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB3	10	1.27
(2,170)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HD2	6	1.27
(1,152)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:H	2	1.27
(3,159)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	9	1.26
(3,159)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	9	1.26
(3,159)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	9	1.26
(3,159)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HB2	9	1.26
(3,159)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HB2	9	1.26
(3,159)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HB2	9	1.26
(3,120)	1:8:A:TYR:HD1	1:23:A:PRO:HB3	3	1.26
(3,120)	1:8:A:TYR:HD2	1:23:A:PRO:HB3	3	1.26
(2,189)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	9	1.26
(2,189)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	9	1.26
(2,189)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	9	1.26
(2,189)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HB2	9	1.26
(2,189)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HB2	9	1.26
(2,189)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HB2	9	1.26
(2,136)	1:8:A:TYR:HD1	1:23:A:PRO:HB3	3	1.26
(2,136)	1:8:A:TYR:HD2	1:23:A:PRO:HB3	3	1.26
(1,155)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG13	4	1.26
(3,170)	1:12:A:LEU:HD21	1:13:A:LYS:HG2	6	1.25
(3,170)	1:12:A:LEU:HD22	1:13:A:LYS:HG2	6	1.25
(3,170)	1:12:A:LEU:HD23	1:13:A:LYS:HG2	6	1.25
(3,147)	1:6:A:ARG:HD2	1:10:A:GLN:HG2	9	1.25
(3,147)	1:6:A:ARG:HD2	1:10:A:GLN:HG3	9	1.25
(2,208)	1:12:A:LEU:HD21	1:13:A:LYS:HG2	6	1.25
(2,208)	1:12:A:LEU:HD22	1:13:A:LYS:HG2	6	1.25
(2,208)	1:12:A:LEU:HD23	1:13:A:LYS:HG2	6	1.25
(2,173)	1:6:A:ARG:HD2	1:10:A:GLN:HG2	9	1.25
(2,173)	1:6:A:ARG:HD2	1:10:A:GLN:HG3	9	1.25
(1,143)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG2	5	1.25
(1,143)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG2	5	1.25
(1,143)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG2	6	1.25
(1,143)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG2	6	1.25
(4,35)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD21	8	1.24
(4,35)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD22	8	1.24
(4,35)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD23	8	1.24
(4,35)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD21	8	1.24
(4,35)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD22	8	1.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,35)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD23	8	1.24
(2,200)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD21	8	1.24
(2,200)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD22	8	1.24
(2,200)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD23	8	1.24
(2,200)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD21	8	1.24
(2,200)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD22	8	1.24
(2,200)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD23	8	1.24
(1,143)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG2	1	1.24
(1,143)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG2	1	1.24
(1,53)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HB3	3	1.24
(3,159)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	4	1.23
(3,159)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	4	1.23
(3,159)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	4	1.23
(3,159)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HB2	4	1.23
(3,159)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HB2	4	1.23
(3,159)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HB2	4	1.23
(2,189)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	4	1.23
(2,189)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	4	1.23
(2,189)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	4	1.23
(2,189)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HB2	4	1.23
(2,189)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HB2	4	1.23
(2,189)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HB2	4	1.23
(1,53)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HB3	8	1.23
(1,53)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HB3	9	1.23
(4,36)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	7	1.22
(4,36)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	7	1.22
(4,36)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	7	1.22
(4,36)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG3	7	1.22
(4,36)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG3	7	1.22
(4,36)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG3	7	1.22
(4,10)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	5	1.22
(4,10)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	5	1.22
(3,153)	1:6:A:ARG:HG2	1:7:A:LEU:HB2	8	1.22
(2,201)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	7	1.22
(2,201)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	7	1.22
(2,201)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	7	1.22
(2,201)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG3	7	1.22
(2,201)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG3	7	1.22
(2,201)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG3	7	1.22
(2,182)	1:6:A:ARG:HG2	1:7:A:LEU:HB2	8	1.22
(2,92)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	5	1.22
(2,92)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	5	1.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,53)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HB3	1	1.22
(1,53)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HB3	2	1.22
(1,53)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HB3	4	1.22
(1,53)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HB3	5	1.22
(1,53)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HB3	10	1.22
(3,136)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	5	1.21
(2,161)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	5	1.21
(1,155)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG13	7	1.21
(1,53)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HB3	6	1.21
(1,53)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HB3	7	1.21
(1,14)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG2	6	1.21
(1,14)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG3	6	1.21
(4,35)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD21	2	1.2
(4,35)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD22	2	1.2
(4,35)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD23	2	1.2
(4,35)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD21	2	1.2
(4,35)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD22	2	1.2
(4,35)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD23	2	1.2
(2,200)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD21	2	1.2
(2,200)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD22	2	1.2
(2,200)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD23	2	1.2
(2,200)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD21	2	1.2
(2,200)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD22	2	1.2
(2,200)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD23	2	1.2
(3,171)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD21	1	1.19
(3,171)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD22	1	1.19
(3,171)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD23	1	1.19
(2,209)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD21	1	1.19
(2,209)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD22	1	1.19
(2,209)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD23	1	1.19
(1,152)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:H	8	1.19
(1,178)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	10	1.18
(1,178)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	10	1.18
(1,178)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	10	1.18
(1,178)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB1	10	1.18
(1,178)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB2	10	1.18
(1,178)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB3	10	1.18
(1,152)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:H	4	1.18
(1,143)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG2	2	1.18
(1,143)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG2	2	1.18
(4,16)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	10	1.17
(4,16)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	10	1.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,16)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	10	1.17
(4,16)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	10	1.17
(4,16)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	10	1.17
(4,16)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	10	1.17
(3,146)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD3	2	1.17
(3,146)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD3	2	1.17
(3,146)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD3	6	1.17
(3,146)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD3	6	1.17
(2,172)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD3	2	1.17
(2,172)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD3	2	1.17
(2,172)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD3	6	1.17
(2,172)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD3	6	1.17
(2,127)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	10	1.17
(2,127)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	10	1.17
(2,127)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	10	1.17
(2,127)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	10	1.17
(2,127)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	10	1.17
(2,127)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	10	1.17
(1,178)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	9	1.17
(1,178)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	9	1.17
(1,178)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	9	1.17
(1,178)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB1	9	1.17
(1,178)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB2	9	1.17
(1,178)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB3	9	1.17
(4,29)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	7	1.15
(4,29)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	7	1.15
(4,29)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	7	1.15
(4,29)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB1	7	1.15
(4,29)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB2	7	1.15
(4,29)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB3	7	1.15
(4,10)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	8	1.15
(4,10)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	8	1.15
(3,170)	1:12:A:LEU:HD21	1:13:A:LYS:HG2	7	1.15
(3,170)	1:12:A:LEU:HD22	1:13:A:LYS:HG2	7	1.15
(3,170)	1:12:A:LEU:HD23	1:13:A:LYS:HG2	7	1.15
(3,159)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	7	1.15
(3,159)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	7	1.15
(3,159)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	7	1.15
(3,159)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HB2	7	1.15
(3,159)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HB2	7	1.15
(3,159)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HB2	7	1.15
(3,146)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD3	8	1.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,146)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD3	8	1.15
(2,208)	1:12:A:LEU:HD21	1:13:A:LYS:HG2	7	1.15
(2,208)	1:12:A:LEU:HD22	1:13:A:LYS:HG2	7	1.15
(2,208)	1:12:A:LEU:HD23	1:13:A:LYS:HG2	7	1.15
(2,189)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	7	1.15
(2,189)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	7	1.15
(2,189)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	7	1.15
(2,189)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HB2	7	1.15
(2,189)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HB2	7	1.15
(2,189)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HB2	7	1.15
(2,180)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	7	1.15
(2,180)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	7	1.15
(2,180)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	7	1.15
(2,180)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB1	7	1.15
(2,180)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB2	7	1.15
(2,180)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB3	7	1.15
(2,172)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD3	8	1.15
(2,172)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD3	8	1.15
(2,92)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	8	1.15
(2,92)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	8	1.15
(1,186)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:HB3	7	1.15
(1,186)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:HB3	7	1.15
(1,186)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:HB3	7	1.15
(1,186)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HB3	7	1.15
(1,186)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HB3	7	1.15
(1,186)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HB3	7	1.15
(4,29)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	9	1.13
(4,29)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	9	1.13
(4,29)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	9	1.13
(4,29)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB1	9	1.13
(4,29)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB2	9	1.13
(4,29)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB3	9	1.13
(3,120)	1:8:A:TYR:HD1	1:23:A:PRO:HB3	8	1.13
(3,120)	1:8:A:TYR:HD2	1:23:A:PRO:HB3	8	1.13
(2,180)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	9	1.13
(2,180)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	9	1.13
(2,180)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	9	1.13
(2,180)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB1	9	1.13
(2,180)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB2	9	1.13
(2,180)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB3	9	1.13
(2,136)	1:8:A:TYR:HD1	1:23:A:PRO:HB3	8	1.13
(2,136)	1:8:A:TYR:HD2	1:23:A:PRO:HB3	8	1.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,155)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG13	2	1.13
(1,75)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HE22	1	1.13
(1,75)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HE22	2	1.13
(1,75)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HE22	4	1.13
(1,75)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HE22	6	1.13
(1,75)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HE22	7	1.13
(1,75)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HE22	8	1.13
(1,75)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HE22	9	1.13
(1,75)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HE22	10	1.13
(1,46)	1:20:A:GLY:HA2	1:20:A:GLY:HA3	2	1.13
(1,46)	1:20:A:GLY:HA2	1:20:A:GLY:HA3	3	1.13
(1,46)	1:20:A:GLY:HA2	1:20:A:GLY:HA3	6	1.13
(4,28)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	2	1.12
(4,28)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	2	1.12
(4,28)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	2	1.12
(4,28)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB1	2	1.12
(4,28)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB2	2	1.12
(4,28)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB3	2	1.12
(4,21)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HA	5	1.12
(4,21)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HA	5	1.12
(3,171)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD21	10	1.12
(3,171)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD22	10	1.12
(3,171)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD23	10	1.12
(3,146)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD3	9	1.12
(3,146)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD3	9	1.12
(3,136)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	10	1.12
(3,120)	1:8:A:TYR:HD1	1:23:A:PRO:HB3	1	1.12
(3,120)	1:8:A:TYR:HD2	1:23:A:PRO:HB3	1	1.12
(2,209)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD21	10	1.12
(2,209)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD22	10	1.12
(2,209)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD23	10	1.12
(2,178)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	2	1.12
(2,178)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	2	1.12
(2,178)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	2	1.12
(2,178)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB1	2	1.12
(2,178)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB2	2	1.12
(2,178)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB3	2	1.12
(2,172)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD3	9	1.12
(2,172)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD3	9	1.12
(2,161)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	10	1.12
(2,146)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HA	5	1.12
(2,146)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HA	5	1.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,136)	1:8:A:TYR:HD1	1:23:A:PRO:HB3	1	1.12
(2,136)	1:8:A:TYR:HD2	1:23:A:PRO:HB3	1	1.12
(1,143)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG2	4	1.12
(1,143)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG2	4	1.12
(1,75)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HE22	3	1.12
(1,75)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HE22	5	1.12
(1,46)	1:20:A:GLY:HA2	1:20:A:GLY:HA3	1	1.12
(1,46)	1:20:A:GLY:HA2	1:20:A:GLY:HA3	4	1.12
(1,46)	1:20:A:GLY:HA2	1:20:A:GLY:HA3	5	1.12
(1,46)	1:20:A:GLY:HA2	1:20:A:GLY:HA3	7	1.12
(1,46)	1:20:A:GLY:HA2	1:20:A:GLY:HA3	8	1.12
(1,46)	1:20:A:GLY:HA2	1:20:A:GLY:HA3	9	1.12
(1,46)	1:20:A:GLY:HA2	1:20:A:GLY:HA3	10	1.12
(4,12)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	1	1.11
(4,12)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	1	1.11
(4,12)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	1	1.11
(4,10)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	9	1.11
(4,10)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	9	1.11
(3,171)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD21	6	1.11
(3,171)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD22	6	1.11
(3,171)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD23	6	1.11
(3,146)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD3	4	1.11
(3,146)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD3	4	1.11
(2,209)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD21	6	1.11
(2,209)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD22	6	1.11
(2,209)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD23	6	1.11
(2,172)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD3	4	1.11
(2,172)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD3	4	1.11
(2,110)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	1	1.11
(2,110)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	1	1.11
(2,110)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	1	1.11
(2,92)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	9	1.11
(2,92)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	9	1.11
(1,132)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD21	6	1.11
(1,132)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD22	6	1.11
(1,132)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD23	6	1.11
(1,132)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD21	7	1.11
(1,132)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD22	7	1.11
(1,132)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD23	7	1.11
(4,21)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HA	8	1.1
(4,21)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HA	8	1.1
(4,12)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	3	1.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,12)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	3	1.1
(4,12)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	3	1.1
(4,10)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	10	1.1
(4,10)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	10	1.1
(2,146)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HA	8	1.1
(2,146)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HA	8	1.1
(2,110)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	3	1.1
(2,110)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	3	1.1
(2,110)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	3	1.1
(2,92)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	10	1.1
(2,92)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	10	1.1
(1,158)	1:6:A:ARG:HB2	1:9:A:ILE:H	6	1.1
(1,158)	1:6:A:ARG:HB3	1:9:A:ILE:H	6	1.1
(1,132)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD21	4	1.1
(1,132)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD22	4	1.1
(1,132)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD23	4	1.1
(1,30)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HD3	1	1.1
(1,30)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HD3	2	1.1
(1,30)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HD3	4	1.1
(1,30)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HD3	5	1.1
(1,30)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HD3	6	1.1
(1,30)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HD3	7	1.1
(1,30)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HD3	8	1.1
(1,30)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HD3	9	1.1
(1,30)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HD3	10	1.1
(4,21)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HA	9	1.09
(4,21)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HA	9	1.09
(3,13)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD2	7	1.09
(2,146)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HA	9	1.09
(2,146)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HA	9	1.09
(2,16)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD2	7	1.09
(1,193)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HA	1	1.09
(1,193)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HA	1	1.09
(1,193)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HA	1	1.09
(1,152)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:H	6	1.09
(1,149)	1:11:A:TRP:HD1	1:23:A:PRO:HA	3	1.09
(1,132)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD21	1	1.09
(1,132)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD22	1	1.09
(1,132)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD23	1	1.09
(1,30)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HD3	3	1.09
(3,153)	1:6:A:ARG:HG2	1:7:A:LEU:HB2	4	1.08
(2,182)	1:6:A:ARG:HG2	1:7:A:LEU:HB2	4	1.08

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,141)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	1	1.08
(1,141)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	1	1.08
(1,122)	1:15:A:GLY:HA2	1:15:A:GLY:HA3	1	1.08
(1,122)	1:15:A:GLY:HA2	1:15:A:GLY:HA3	2	1.08
(1,122)	1:15:A:GLY:HA2	1:15:A:GLY:HA3	4	1.08
(1,122)	1:15:A:GLY:HA2	1:15:A:GLY:HA3	6	1.08
(1,122)	1:15:A:GLY:HA2	1:15:A:GLY:HA3	7	1.08
(1,122)	1:15:A:GLY:HA2	1:15:A:GLY:HA3	10	1.08
(3,136)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	7	1.07
(2,161)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	7	1.07
(1,122)	1:15:A:GLY:HA2	1:15:A:GLY:HA3	3	1.07
(1,122)	1:15:A:GLY:HA2	1:15:A:GLY:HA3	5	1.07
(1,122)	1:15:A:GLY:HA2	1:15:A:GLY:HA3	8	1.07
(1,122)	1:15:A:GLY:HA2	1:15:A:GLY:HA3	9	1.07
(1,10)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD3	7	1.07
(1,132)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD21	2	1.06
(1,132)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD22	2	1.06
(1,132)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD23	2	1.06
(1,1)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD2	3	1.06
(4,35)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD21	3	1.05
(4,35)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD22	3	1.05
(4,35)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD23	3	1.05
(4,35)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD21	3	1.05
(4,35)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD22	3	1.05
(4,35)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD23	3	1.05
(4,35)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD21	9	1.05
(4,35)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD22	9	1.05
(4,35)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD23	9	1.05
(4,35)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD21	9	1.05
(4,35)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD22	9	1.05
(4,35)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD23	9	1.05
(4,12)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	2	1.05
(4,12)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	2	1.05
(4,12)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	2	1.05
(4,12)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	9	1.05
(4,12)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	9	1.05
(4,12)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	9	1.05
(4,12)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	10	1.05
(4,12)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	10	1.05
(4,12)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	10	1.05
(3,146)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD3	3	1.05
(3,146)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD3	3	1.05

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,200)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD21	3	1.05
(2,200)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD22	3	1.05
(2,200)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD23	3	1.05
(2,200)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD21	3	1.05
(2,200)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD22	3	1.05
(2,200)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD23	3	1.05
(2,200)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD21	9	1.05
(2,200)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD22	9	1.05
(2,200)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD23	9	1.05
(2,200)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD21	9	1.05
(2,200)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD22	9	1.05
(2,200)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD23	9	1.05
(2,172)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD3	3	1.05
(2,172)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD3	3	1.05
(2,110)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	2	1.05
(2,110)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	2	1.05
(2,110)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	2	1.05
(2,110)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	9	1.05
(2,110)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	9	1.05
(2,110)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	9	1.05
(2,110)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	10	1.05
(2,110)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	10	1.05
(2,110)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	10	1.05
(1,141)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	5	1.05
(1,141)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	5	1.05
(1,10)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD3	9	1.05
(3,171)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD21	4	1.04
(3,171)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD22	4	1.04
(3,171)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD23	4	1.04
(3,170)	1:12:A:LEU:HD21	1:13:A:LYS:HG2	8	1.04
(3,170)	1:12:A:LEU:HD22	1:13:A:LYS:HG2	8	1.04
(3,170)	1:12:A:LEU:HD23	1:13:A:LYS:HG2	8	1.04
(3,146)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD3	7	1.04
(3,146)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD3	7	1.04
(2,209)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD21	4	1.04
(2,209)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD22	4	1.04
(2,209)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD23	4	1.04
(2,208)	1:12:A:LEU:HD21	1:13:A:LYS:HG2	8	1.04
(2,208)	1:12:A:LEU:HD22	1:13:A:LYS:HG2	8	1.04
(2,208)	1:12:A:LEU:HD23	1:13:A:LYS:HG2	8	1.04
(2,172)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD3	7	1.04
(2,172)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD3	7	1.04

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,141)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	2	1.04
(1,141)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	2	1.04
(1,10)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD3	1	1.04
(1,2)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD3	8	1.04
(1,2)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD3	9	1.04
(4,21)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HA	3	1.03
(4,21)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HA	3	1.03
(4,21)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HA	7	1.03
(4,21)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HA	7	1.03
(3,120)	1:8:A:TYR:HD1	1:23:A:PRO:HB3	9	1.03
(3,120)	1:8:A:TYR:HD2	1:23:A:PRO:HB3	9	1.03
(3,120)	1:8:A:TYR:HD1	1:23:A:PRO:HB3	10	1.03
(3,120)	1:8:A:TYR:HD2	1:23:A:PRO:HB3	10	1.03
(2,146)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HA	3	1.03
(2,146)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HA	3	1.03
(2,146)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HA	7	1.03
(2,146)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HA	7	1.03
(2,136)	1:8:A:TYR:HD1	1:23:A:PRO:HB3	9	1.03
(2,136)	1:8:A:TYR:HD2	1:23:A:PRO:HB3	9	1.03
(2,136)	1:8:A:TYR:HD1	1:23:A:PRO:HB3	10	1.03
(2,136)	1:8:A:TYR:HD2	1:23:A:PRO:HB3	10	1.03
(1,141)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	7	1.03
(1,141)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	7	1.03
(1,2)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD3	1	1.03
(1,2)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD3	2	1.03
(1,2)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD3	4	1.03
(1,2)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD3	5	1.03
(1,2)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD3	10	1.03
(1,158)	1:6:A:ARG:HB2	1:9:A:ILE:H	4	1.02
(1,158)	1:6:A:ARG:HB3	1:9:A:ILE:H	4	1.02
(1,141)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	8	1.02
(1,141)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	8	1.02
(1,67)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HE2	1	1.02
(1,67)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HE2	1	1.02
(1,10)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD3	8	1.02
(3,171)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD21	2	1.01
(3,171)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD22	2	1.01
(3,171)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD23	2	1.01
(3,146)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD3	10	1.01
(3,146)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD3	10	1.01
(2,209)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD21	2	1.01
(2,209)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD22	2	1.01

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,209)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD23	2	1.01
(2,172)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD3	10	1.01
(2,172)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD3	10	1.01
(1,45)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HG3	7	1.01
(1,10)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD3	3	1.01
(4,38)	1:12:A:LEU:HD11	1:13:A:LYS:HG2	10	1.0
(4,38)	1:12:A:LEU:HD12	1:13:A:LYS:HG2	10	1.0
(4,38)	1:12:A:LEU:HD13	1:13:A:LYS:HG2	10	1.0
(4,33)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HA	8	1.0
(4,33)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HA	8	1.0
(4,33)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HA	8	1.0
(4,29)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	3	1.0
(4,29)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	3	1.0
(4,29)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	3	1.0
(4,29)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB1	3	1.0
(4,29)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB2	3	1.0
(4,29)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB3	3	1.0
(4,12)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	8	1.0
(4,12)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	8	1.0
(4,12)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	8	1.0
(3,171)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD21	5	1.0
(3,171)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD22	5	1.0
(3,171)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD23	5	1.0
(3,136)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	8	1.0
(2,209)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD21	5	1.0
(2,209)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD22	5	1.0
(2,209)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD23	5	1.0
(2,207)	1:12:A:LEU:HD11	1:13:A:LYS:HG2	10	1.0
(2,207)	1:12:A:LEU:HD12	1:13:A:LYS:HG2	10	1.0
(2,207)	1:12:A:LEU:HD13	1:13:A:LYS:HG2	10	1.0
(2,193)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HA	8	1.0
(2,193)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HA	8	1.0
(2,193)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HA	8	1.0
(2,180)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	3	1.0
(2,180)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	3	1.0
(2,180)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	3	1.0
(2,180)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB1	3	1.0
(2,180)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB2	3	1.0
(2,180)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB3	3	1.0
(2,161)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	8	1.0
(2,110)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	8	1.0
(2,110)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	8	1.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,110)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	8	1.0
(1,152)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:H	5	1.0
(4,12)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	7	0.99
(4,12)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	7	0.99
(4,12)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	7	0.99
(3,170)	1:12:A:LEU:HD21	1:13:A:LYS:HG2	10	0.99
(3,170)	1:12:A:LEU:HD22	1:13:A:LYS:HG2	10	0.99
(3,170)	1:12:A:LEU:HD23	1:13:A:LYS:HG2	10	0.99
(2,208)	1:12:A:LEU:HD21	1:13:A:LYS:HG2	10	0.99
(2,208)	1:12:A:LEU:HD22	1:13:A:LYS:HG2	10	0.99
(2,208)	1:12:A:LEU:HD23	1:13:A:LYS:HG2	10	0.99
(2,110)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	7	0.99
(2,110)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	7	0.99
(2,110)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	7	0.99
(1,197)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD21	6	0.99
(1,197)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD22	6	0.99
(1,197)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD23	6	0.99
(1,152)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:H	1	0.99
(1,141)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	4	0.99
(1,141)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	4	0.99
(1,10)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD3	2	0.99
(1,45)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HG3	6	0.98
(1,10)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD3	5	0.98
(1,10)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD3	10	0.98
(1,131)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD11	3	0.97
(1,131)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD12	3	0.97
(1,131)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD13	3	0.97
(4,26)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	10	0.96
(4,26)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB3	10	0.96
(3,171)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD21	8	0.96
(3,171)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD22	8	0.96
(3,171)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD23	8	0.96
(2,209)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD21	8	0.96
(2,209)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD22	8	0.96
(2,209)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD23	8	0.96
(2,162)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	10	0.96
(2,162)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB3	10	0.96
(1,186)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:HB3	8	0.96
(1,186)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:HB3	8	0.96
(1,186)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:HB3	8	0.96
(1,186)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HB3	8	0.96
(1,186)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HB3	8	0.96

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,186)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HB3	8	0.96
(1,131)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD11	9	0.96
(1,131)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD12	9	0.96
(1,131)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD13	9	0.96
(4,38)	1:12:A:LEU:HD11	1:13:A:LYS:HG2	7	0.95
(4,38)	1:12:A:LEU:HD12	1:13:A:LYS:HG2	7	0.95
(4,38)	1:12:A:LEU:HD13	1:13:A:LYS:HG2	7	0.95
(2,207)	1:12:A:LEU:HD11	1:13:A:LYS:HG2	7	0.95
(2,207)	1:12:A:LEU:HD12	1:13:A:LYS:HG2	7	0.95
(2,207)	1:12:A:LEU:HD13	1:13:A:LYS:HG2	7	0.95
(1,152)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:H	7	0.95
(1,152)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:H	9	0.95
(4,11)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	9	0.94
(4,11)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	9	0.94
(4,11)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	9	0.94
(4,11)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	10	0.94
(4,11)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	10	0.94
(4,11)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	10	0.94
(3,159)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	5	0.94
(3,159)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	5	0.94
(3,159)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	5	0.94
(3,159)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HB2	5	0.94
(3,159)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HB2	5	0.94
(3,159)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HB2	5	0.94
(2,189)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	5	0.94
(2,189)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	5	0.94
(2,189)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	5	0.94
(2,189)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HB2	5	0.94
(2,189)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HB2	5	0.94
(2,189)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HB2	5	0.94
(2,93)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	9	0.94
(2,93)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	9	0.94
(2,93)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	9	0.94
(2,93)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	10	0.94
(2,93)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	10	0.94
(2,93)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	10	0.94
(1,71)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HD3	8	0.94
(1,18)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HB3	2	0.94
(1,18)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HB3	3	0.94
(1,18)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HB3	4	0.94
(1,18)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HB3	6	0.94
(1,18)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HB3	9	0.94

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,18)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HB3	10	0.94
(1,10)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD3	4	0.94
(1,10)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD3	6	0.94
(4,9)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD11	2	0.93
(4,9)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD12	2	0.93
(4,9)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD13	2	0.93
(3,121)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB3	3	0.93
(3,121)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB3	3	0.93
(3,121)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB3	7	0.93
(3,121)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB3	7	0.93
(3,120)	1:8:A:TYR:HD1	1:23:A:PRO:HB3	5	0.93
(3,120)	1:8:A:TYR:HD2	1:23:A:PRO:HB3	5	0.93
(2,137)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB3	3	0.93
(2,137)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB3	3	0.93
(2,137)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB3	7	0.93
(2,137)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB3	7	0.93
(2,136)	1:8:A:TYR:HD1	1:23:A:PRO:HB3	5	0.93
(2,136)	1:8:A:TYR:HD2	1:23:A:PRO:HB3	5	0.93
(2,61)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD11	2	0.93
(2,61)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD12	2	0.93
(2,61)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD13	2	0.93
(1,174)	1:6:A:ARG:HD2	1:10:A:GLN:HB3	9	0.93
(1,174)	1:6:A:ARG:HD3	1:10:A:GLN:HB3	9	0.93
(1,141)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	3	0.93
(1,141)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	3	0.93
(1,141)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	9	0.93
(1,141)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	9	0.93
(1,132)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD21	5	0.93
(1,132)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD22	5	0.93
(1,132)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD23	5	0.93
(1,71)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HD3	2	0.93
(1,71)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HD3	3	0.93
(1,71)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HD3	10	0.93
(1,18)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HB3	1	0.93
(1,18)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HB3	5	0.93
(1,18)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HB3	7	0.93
(1,18)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HB3	8	0.93
(4,11)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	8	0.92
(4,11)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	8	0.92
(4,11)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	8	0.92
(4,9)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD11	4	0.92
(4,9)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD12	4	0.92

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,9)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD13	4	0.92
(4,9)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD11	8	0.92
(4,9)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD12	8	0.92
(4,9)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD13	8	0.92
(3,157)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG11	10	0.92
(3,157)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG12	10	0.92
(3,157)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG13	10	0.92
(3,157)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	10	0.92
(3,157)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	10	0.92
(3,157)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	10	0.92
(3,157)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG11	10	0.92
(3,157)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG12	10	0.92
(3,157)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG13	10	0.92
(3,144)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HD2	7	0.92
(2,187)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG11	10	0.92
(2,187)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG12	10	0.92
(2,187)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG13	10	0.92
(2,187)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	10	0.92
(2,187)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	10	0.92
(2,187)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	10	0.92
(2,187)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG11	10	0.92
(2,187)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG12	10	0.92
(2,187)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG13	10	0.92
(2,170)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HD2	7	0.92
(2,93)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	8	0.92
(2,93)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	8	0.92
(2,93)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	8	0.92
(2,61)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD11	4	0.92
(2,61)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD12	4	0.92
(2,61)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD13	4	0.92
(2,61)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD11	8	0.92
(2,61)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD12	8	0.92
(2,61)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD13	8	0.92
(1,193)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HA	6	0.92
(1,193)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HA	6	0.92
(1,193)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HA	6	0.92
(1,193)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HA	10	0.92
(1,193)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HA	10	0.92
(1,193)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HA	10	0.92
(1,131)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD11	4	0.92
(1,131)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD12	4	0.92
(1,131)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD13	4	0.92

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,71)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HD3	1	0.92
(1,71)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HD3	4	0.92
(1,71)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HD3	5	0.92
(1,71)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HD3	6	0.92
(1,71)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HD3	7	0.92
(1,71)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HD3	9	0.92
(4,9)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD11	7	0.91
(4,9)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD12	7	0.91
(4,9)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD13	7	0.91
(3,14)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	7	0.91
(2,61)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD11	7	0.91
(2,61)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD12	7	0.91
(2,61)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD13	7	0.91
(2,17)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	7	0.91
(1,195)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	7	0.91
(1,195)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	7	0.91
(1,195)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	7	0.91
(1,185)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG13	8	0.91
(1,185)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG13	8	0.91
(1,185)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG13	8	0.91
(1,185)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG13	8	0.91
(1,185)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG13	8	0.91
(1,185)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG13	8	0.91
(1,132)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD21	8	0.91
(1,132)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD22	8	0.91
(1,132)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD23	8	0.91
(1,44)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HG2	10	0.91
(4,11)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	7	0.9
(4,11)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	7	0.9
(4,11)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	7	0.9
(4,9)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD11	6	0.9
(4,9)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD12	6	0.9
(4,9)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD13	6	0.9
(3,159)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	6	0.9
(3,159)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	6	0.9
(3,159)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	6	0.9
(3,159)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HB2	6	0.9
(3,159)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HB2	6	0.9
(3,159)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HB2	6	0.9
(2,189)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	6	0.9
(2,189)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	6	0.9
(2,189)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	6	0.9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,189)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HB2	6	0.9
(2,189)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HB2	6	0.9
(2,189)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HB2	6	0.9
(2,93)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	7	0.9
(2,93)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	7	0.9
(2,93)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	7	0.9
(2,61)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD11	6	0.9
(2,61)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD12	6	0.9
(2,61)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD13	6	0.9
(1,157)	1:4:A:ALA:H	1:4:A:ALA:HB1	5	0.9
(1,157)	1:4:A:ALA:H	1:4:A:ALA:HB2	5	0.9
(1,157)	1:4:A:ALA:H	1:4:A:ALA:HB3	5	0.9
(1,141)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	6	0.9
(1,141)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	6	0.9
(1,44)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HG2	1	0.9
(3,157)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG11	3	0.89
(3,157)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG12	3	0.89
(3,157)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG13	3	0.89
(3,157)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	3	0.89
(3,157)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	3	0.89
(3,157)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	3	0.89
(3,157)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG11	3	0.89
(3,157)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG12	3	0.89
(3,157)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG13	3	0.89
(3,120)	1:8:A:TYR:HD1	1:23:A:PRO:HB3	6	0.89
(3,120)	1:8:A:TYR:HD2	1:23:A:PRO:HB3	6	0.89
(3,120)	1:8:A:TYR:HD1	1:23:A:PRO:HB3	7	0.89
(3,120)	1:8:A:TYR:HD2	1:23:A:PRO:HB3	7	0.89
(2,187)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG11	3	0.89
(2,187)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG12	3	0.89
(2,187)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG13	3	0.89
(2,187)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	3	0.89
(2,187)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	3	0.89
(2,187)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	3	0.89
(2,187)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG11	3	0.89
(2,187)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG12	3	0.89
(2,187)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG13	3	0.89
(2,136)	1:8:A:TYR:HD1	1:23:A:PRO:HB3	6	0.89
(2,136)	1:8:A:TYR:HD2	1:23:A:PRO:HB3	6	0.89
(2,136)	1:8:A:TYR:HD1	1:23:A:PRO:HB3	7	0.89
(2,136)	1:8:A:TYR:HD2	1:23:A:PRO:HB3	7	0.89
(1,157)	1:4:A:ALA:H	1:4:A:ALA:HB1	1	0.89

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,157)	1:4:A:ALA:H	1:4:A:ALA:HB2	1	0.89
(1,157)	1:4:A:ALA:H	1:4:A:ALA:HB3	1	0.89
(1,157)	1:4:A:ALA:H	1:4:A:ALA:HB1	2	0.89
(1,157)	1:4:A:ALA:H	1:4:A:ALA:HB2	2	0.89
(1,157)	1:4:A:ALA:H	1:4:A:ALA:HB3	2	0.89
(1,131)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD11	2	0.89
(1,131)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD12	2	0.89
(1,131)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD13	2	0.89
(4,17)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG12	10	0.88
(4,17)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG12	10	0.88
(4,10)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	7	0.88
(4,10)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	7	0.88
(3,120)	1:8:A:TYR:HD1	1:23:A:PRO:HB3	2	0.88
(3,120)	1:8:A:TYR:HD2	1:23:A:PRO:HB3	2	0.88
(3,104)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG2	3	0.88
(2,138)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG12	10	0.88
(2,138)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG12	10	0.88
(2,136)	1:8:A:TYR:HD1	1:23:A:PRO:HB3	2	0.88
(2,136)	1:8:A:TYR:HD2	1:23:A:PRO:HB3	2	0.88
(2,117)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG2	3	0.88
(2,92)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	7	0.88
(2,92)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	7	0.88
(1,185)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG13	10	0.88
(1,185)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG13	10	0.88
(1,185)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG13	10	0.88
(1,185)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG13	10	0.88
(1,185)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG13	10	0.88
(1,185)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG13	10	0.88
(1,157)	1:4:A:ALA:H	1:4:A:ALA:HB1	4	0.88
(1,157)	1:4:A:ALA:H	1:4:A:ALA:HB2	4	0.88
(1,157)	1:4:A:ALA:H	1:4:A:ALA:HB3	4	0.88
(1,157)	1:4:A:ALA:H	1:4:A:ALA:HB1	8	0.88
(1,157)	1:4:A:ALA:H	1:4:A:ALA:HB2	8	0.88
(1,157)	1:4:A:ALA:H	1:4:A:ALA:HB3	8	0.88
(1,127)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	7	0.88
(1,127)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	7	0.88
(1,127)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	7	0.88
(1,127)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	7	0.88
(1,127)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	7	0.88
(1,127)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	7	0.88
(1,127)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	8	0.88
(1,127)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	8	0.88

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,127)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	8	0.88
(1,127)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	8	0.88
(1,127)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	8	0.88
(1,127)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	8	0.88
(1,3)	1:22:A:PRO:HD2	1:22:A:PRO:HD3	7	0.88
(4,26)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	7	0.87
(4,26)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB3	7	0.87
(4,9)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD11	1	0.87
(4,9)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD12	1	0.87
(4,9)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD13	1	0.87
(3,104)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG2	2	0.87
(3,104)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG2	7	0.87
(3,104)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG2	8	0.87
(3,104)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG2	10	0.87
(2,162)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	7	0.87
(2,162)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB3	7	0.87
(2,117)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG2	2	0.87
(2,117)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG2	7	0.87
(2,117)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG2	8	0.87
(2,117)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG2	10	0.87
(2,61)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD11	1	0.87
(2,61)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD12	1	0.87
(2,61)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD13	1	0.87
(1,195)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	2	0.87
(1,195)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	2	0.87
(1,195)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	2	0.87
(1,195)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	6	0.87
(1,195)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	6	0.87
(1,195)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	6	0.87
(1,157)	1:4:A:ALA:H	1:4:A:ALA:HB1	6	0.87
(1,157)	1:4:A:ALA:H	1:4:A:ALA:HB2	6	0.87
(1,157)	1:4:A:ALA:H	1:4:A:ALA:HB3	6	0.87
(1,44)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HG2	4	0.87
(1,19)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG2	6	0.87
(1,3)	1:22:A:PRO:HD2	1:22:A:PRO:HD3	8	0.87
(4,11)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	4	0.86
(4,11)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	4	0.86
(4,11)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	4	0.86
(4,7)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	1	0.86
(4,7)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	1	0.86
(3,104)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG2	1	0.86
(3,104)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG2	4	0.86

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,104)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG2	6	0.86
(3,104)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG2	9	0.86
(2,117)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG2	1	0.86
(2,117)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG2	4	0.86
(2,117)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG2	6	0.86
(2,117)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG2	9	0.86
(2,93)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	4	0.86
(2,93)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	4	0.86
(2,93)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	4	0.86
(2,58)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	1	0.86
(2,58)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	1	0.86
(1,195)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	4	0.86
(1,195)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	4	0.86
(1,195)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	4	0.86
(1,170)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HD2	10	0.86
(1,160)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG2	8	0.86
(1,160)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG3	8	0.86
(1,148)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HZ2	7	0.86
(1,132)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD21	10	0.86
(1,132)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD22	10	0.86
(1,132)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD23	10	0.86
(1,19)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG2	2	0.86
(1,19)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG2	3	0.86
(1,19)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG2	4	0.86
(1,19)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG2	9	0.86
(1,3)	1:22:A:PRO:HD2	1:22:A:PRO:HD3	1	0.86
(1,3)	1:22:A:PRO:HD2	1:22:A:PRO:HD3	2	0.86
(1,3)	1:22:A:PRO:HD2	1:22:A:PRO:HD3	3	0.86
(1,3)	1:22:A:PRO:HD2	1:22:A:PRO:HD3	4	0.86
(1,3)	1:22:A:PRO:HD2	1:22:A:PRO:HD3	5	0.86
(1,3)	1:22:A:PRO:HD2	1:22:A:PRO:HD3	9	0.86
(1,3)	1:22:A:PRO:HD2	1:22:A:PRO:HD3	10	0.86
(4,38)	1:12:A:LEU:HD11	1:13:A:LYS:HG2	4	0.85
(4,38)	1:12:A:LEU:HD12	1:13:A:LYS:HG2	4	0.85
(4,38)	1:12:A:LEU:HD13	1:13:A:LYS:HG2	4	0.85
(4,38)	1:12:A:LEU:HD11	1:13:A:LYS:HG2	6	0.85
(4,38)	1:12:A:LEU:HD12	1:13:A:LYS:HG2	6	0.85
(4,38)	1:12:A:LEU:HD13	1:13:A:LYS:HG2	6	0.85
(4,26)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	3	0.85
(4,26)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB3	3	0.85
(4,11)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	5	0.85
(4,11)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	5	0.85

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,11)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	5	0.85
(4,7)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	4	0.85
(4,7)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	4	0.85
(3,157)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG11	7	0.85
(3,157)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG12	7	0.85
(3,157)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG13	7	0.85
(3,157)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	7	0.85
(3,157)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	7	0.85
(3,157)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	7	0.85
(3,157)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG11	7	0.85
(3,157)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG12	7	0.85
(3,157)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG13	7	0.85
(2,207)	1:12:A:LEU:HD11	1:13:A:LYS:HG2	4	0.85
(2,207)	1:12:A:LEU:HD12	1:13:A:LYS:HG2	4	0.85
(2,207)	1:12:A:LEU:HD13	1:13:A:LYS:HG2	4	0.85
(2,207)	1:12:A:LEU:HD11	1:13:A:LYS:HG2	6	0.85
(2,207)	1:12:A:LEU:HD12	1:13:A:LYS:HG2	6	0.85
(2,207)	1:12:A:LEU:HD13	1:13:A:LYS:HG2	6	0.85
(2,187)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG11	7	0.85
(2,187)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG12	7	0.85
(2,187)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG13	7	0.85
(2,187)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	7	0.85
(2,187)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	7	0.85
(2,187)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	7	0.85
(2,187)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG11	7	0.85
(2,187)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG12	7	0.85
(2,187)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG13	7	0.85
(2,162)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	3	0.85
(2,162)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB3	3	0.85
(2,93)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	5	0.85
(2,93)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	5	0.85
(2,93)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	5	0.85
(2,58)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	4	0.85
(2,58)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	4	0.85
(1,152)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:H	3	0.85
(1,148)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HZ2	3	0.85
(1,148)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HZ2	6	0.85
(1,19)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG2	1	0.85
(1,19)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG2	7	0.85
(1,19)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG2	10	0.85
(1,3)	1:22:A:PRO:HD2	1:22:A:PRO:HD3	6	0.85
(1,182)	1:6:A:ARG:HG2	1:7:A:LEU:HB2	5	0.84

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,148)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HZ2	1	0.84
(1,148)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HZ2	4	0.84
(1,148)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HZ2	9	0.84
(1,44)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HG2	2	0.84
(1,19)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG2	8	0.84
(4,38)	1:12:A:LEU:HD11	1:13:A:LYS:HG2	2	0.83
(4,38)	1:12:A:LEU:HD12	1:13:A:LYS:HG2	2	0.83
(4,38)	1:12:A:LEU:HD13	1:13:A:LYS:HG2	2	0.83
(3,6)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD3	5	0.83
(3,6)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD3	6	0.83
(3,6)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD3	8	0.83
(3,6)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD3	9	0.83
(3,6)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD3	10	0.83
(2,207)	1:12:A:LEU:HD11	1:13:A:LYS:HG2	2	0.83
(2,207)	1:12:A:LEU:HD12	1:13:A:LYS:HG2	2	0.83
(2,207)	1:12:A:LEU:HD13	1:13:A:LYS:HG2	2	0.83
(2,8)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD3	5	0.83
(2,8)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD3	6	0.83
(2,8)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD3	8	0.83
(2,8)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD3	9	0.83
(2,8)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD3	10	0.83
(1,200)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD21	6	0.83
(1,200)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD22	6	0.83
(1,200)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD23	6	0.83
(1,200)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD21	6	0.83
(1,200)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD22	6	0.83
(1,200)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD23	6	0.83
(1,193)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HA	5	0.83
(1,193)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HA	5	0.83
(1,193)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HA	5	0.83
(1,179)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	6	0.83
(1,179)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	6	0.83
(1,179)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	6	0.83
(1,148)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HZ2	2	0.83
(1,148)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HZ2	8	0.83
(1,148)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HZ2	10	0.83
(1,65)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HG2	1	0.83
(1,42)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB3	5	0.83
(1,19)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG2	5	0.83
(4,11)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	2	0.82
(4,11)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	2	0.82
(4,11)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	2	0.82

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,9)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD11	5	0.82
(4,9)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD12	5	0.82
(4,9)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD13	5	0.82
(4,9)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD11	10	0.82
(4,9)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD12	10	0.82
(4,9)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD13	10	0.82
(4,7)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	9	0.82
(4,7)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	9	0.82
(3,171)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD21	7	0.82
(3,171)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD22	7	0.82
(3,171)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD23	7	0.82
(3,140)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	5	0.82
(3,140)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	6	0.82
(3,140)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	10	0.82
(3,6)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD3	1	0.82
(3,6)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD3	2	0.82
(3,6)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD3	4	0.82
(2,209)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD21	7	0.82
(2,209)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD22	7	0.82
(2,209)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD23	7	0.82
(2,166)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	5	0.82
(2,166)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	6	0.82
(2,166)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	10	0.82
(2,93)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	2	0.82
(2,93)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	2	0.82
(2,93)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	2	0.82
(2,61)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD11	5	0.82
(2,61)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD12	5	0.82
(2,61)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD13	5	0.82
(2,61)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD11	10	0.82
(2,61)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD12	10	0.82
(2,61)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD13	10	0.82
(2,58)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	9	0.82
(2,58)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	9	0.82
(2,8)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD3	1	0.82
(2,8)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD3	2	0.82
(2,8)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD3	4	0.82
(1,185)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG13	7	0.82
(1,185)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG13	7	0.82
(1,185)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG13	7	0.82
(1,185)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG13	7	0.82
(1,185)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG13	7	0.82

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,185)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG13	7	0.82
(1,148)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HZ2	5	0.82
(1,44)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HG2	8	0.82
(4,13)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HG	7	0.81
(3,158)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HE2	8	0.81
(3,158)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HE2	8	0.81
(3,158)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HE2	8	0.81
(3,157)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG11	1	0.81
(3,157)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG12	1	0.81
(3,157)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG13	1	0.81
(3,157)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	1	0.81
(3,157)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	1	0.81
(3,157)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	1	0.81
(3,157)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG11	1	0.81
(3,157)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG12	1	0.81
(3,157)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG13	1	0.81
(2,188)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HE2	8	0.81
(2,188)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HE2	8	0.81
(2,188)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HE2	8	0.81
(2,187)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG11	1	0.81
(2,187)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG12	1	0.81
(2,187)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG13	1	0.81
(2,187)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	1	0.81
(2,187)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	1	0.81
(2,187)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	1	0.81
(2,187)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG11	1	0.81
(2,187)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG12	1	0.81
(2,187)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG13	1	0.81
(2,112)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HG	7	0.81
(1,195)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	9	0.81
(1,195)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	9	0.81
(1,195)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	9	0.81
(1,131)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD11	6	0.81
(1,131)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD12	6	0.81
(1,131)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD13	6	0.81
(4,24)	1:24:A:PRO:HG3	1:25:A:SER:H	4	0.8
(4,7)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	2	0.8
(4,7)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	2	0.8
(3,140)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	4	0.8
(3,121)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB3	1	0.8
(3,121)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB3	1	0.8
(3,121)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB3	8	0.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,121)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB3	8	0.8
(3,121)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB3	9	0.8
(3,121)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB3	9	0.8
(2,166)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	4	0.8
(2,151)	1:24:A:PRO:HG3	1:25:A:SER:H	4	0.8
(2,137)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB3	1	0.8
(2,137)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB3	1	0.8
(2,137)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB3	8	0.8
(2,137)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB3	8	0.8
(2,137)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB3	9	0.8
(2,137)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB3	9	0.8
(2,58)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	2	0.8
(2,58)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	2	0.8
(1,200)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD21	5	0.8
(1,200)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD22	5	0.8
(1,200)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD23	5	0.8
(1,200)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD21	5	0.8
(1,200)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD22	5	0.8
(1,200)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD23	5	0.8
(1,179)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	1	0.8
(1,179)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	1	0.8
(1,179)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	1	0.8
(1,179)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	9	0.8
(1,179)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	9	0.8
(1,179)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	9	0.8
(1,179)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	10	0.8
(1,179)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	10	0.8
(1,179)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	10	0.8
(1,170)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HD2	8	0.8
(1,108)	1:14:A:GLU:HG2	1:14:A:GLU:HG3	1	0.8
(1,108)	1:14:A:GLU:HG2	1:14:A:GLU:HG3	2	0.8
(1,108)	1:14:A:GLU:HG2	1:14:A:GLU:HG3	3	0.8
(1,108)	1:14:A:GLU:HG2	1:14:A:GLU:HG3	4	0.8
(1,108)	1:14:A:GLU:HG2	1:14:A:GLU:HG3	5	0.8
(1,108)	1:14:A:GLU:HG2	1:14:A:GLU:HG3	6	0.8
(1,108)	1:14:A:GLU:HG2	1:14:A:GLU:HG3	7	0.8
(1,108)	1:14:A:GLU:HG2	1:14:A:GLU:HG3	8	0.8
(1,108)	1:14:A:GLU:HG2	1:14:A:GLU:HG3	9	0.8
(1,108)	1:14:A:GLU:HG2	1:14:A:GLU:HG3	10	0.8
(1,42)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB3	8	0.8
(1,42)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB3	10	0.8
(4,7)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	7	0.79

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,7)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	7	0.79
(3,140)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	8	0.79
(2,166)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	8	0.79
(2,58)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	7	0.79
(2,58)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	7	0.79
(1,195)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	1	0.79
(1,195)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	1	0.79
(1,195)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	1	0.79
(1,179)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	3	0.79
(1,179)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	3	0.79
(1,179)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	3	0.79
(1,179)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	5	0.79
(1,179)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	5	0.79
(1,179)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	5	0.79
(1,127)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	4	0.79
(1,127)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	4	0.79
(1,127)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	4	0.79
(1,127)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	4	0.79
(1,127)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	4	0.79
(1,127)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	4	0.79
(1,86)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HB3	1	0.79
(1,86)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HB3	4	0.79
(1,86)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HB3	7	0.79
(1,86)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HB3	8	0.79
(1,86)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HB3	9	0.79
(1,67)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HE2	3	0.79
(1,67)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HE2	3	0.79
(1,67)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HE2	9	0.79
(1,67)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HE2	9	0.79
(1,44)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HG2	5	0.79
(4,24)	1:24:A:PRO:HG3	1:25:A:SER:H	10	0.78
(4,21)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HA	1	0.78
(4,21)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HA	1	0.78
(4,7)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	3	0.78
(4,7)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	3	0.78
(4,7)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	5	0.78
(4,7)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	5	0.78
(3,176)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HE2	6	0.78
(3,176)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HE2	6	0.78
(3,176)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HE2	6	0.78
(3,140)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	3	0.78
(2,215)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HE2	6	0.78

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,215)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HE2	6	0.78
(2,215)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HE2	6	0.78
(2,166)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	3	0.78
(2,151)	1:24:A:PRO:HG3	1:25:A:SER:H	10	0.78
(2,146)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HA	1	0.78
(2,146)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HA	1	0.78
(2,58)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	3	0.78
(2,58)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	3	0.78
(2,58)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	5	0.78
(2,58)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	5	0.78
(1,197)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD21	7	0.78
(1,197)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD22	7	0.78
(1,197)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD23	7	0.78
(1,157)	1:4:A:ALA:H	1:4:A:ALA:HB1	3	0.78
(1,157)	1:4:A:ALA:H	1:4:A:ALA:HB2	3	0.78
(1,157)	1:4:A:ALA:H	1:4:A:ALA:HB3	3	0.78
(1,157)	1:4:A:ALA:H	1:4:A:ALA:HB1	9	0.78
(1,157)	1:4:A:ALA:H	1:4:A:ALA:HB2	9	0.78
(1,157)	1:4:A:ALA:H	1:4:A:ALA:HB3	9	0.78
(1,86)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HB3	2	0.78
(1,86)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HB3	3	0.78
(1,86)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HB3	5	0.78
(1,86)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HB3	6	0.78
(1,86)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HB3	10	0.78
(1,44)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HG2	3	0.78
(1,44)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HG2	9	0.78
(3,140)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	2	0.77
(3,120)	1:8:A:TYR:HD1	1:23:A:PRO:HB3	4	0.77
(3,120)	1:8:A:TYR:HD2	1:23:A:PRO:HB3	4	0.77
(3,6)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD3	7	0.77
(2,166)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	2	0.77
(2,136)	1:8:A:TYR:HD1	1:23:A:PRO:HB3	4	0.77
(2,136)	1:8:A:TYR:HD2	1:23:A:PRO:HB3	4	0.77
(2,8)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD3	7	0.77
(1,195)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	3	0.77
(1,195)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	3	0.77
(1,195)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	3	0.77
(1,157)	1:4:A:ALA:H	1:4:A:ALA:HB1	7	0.77
(1,157)	1:4:A:ALA:H	1:4:A:ALA:HB2	7	0.77
(1,157)	1:4:A:ALA:H	1:4:A:ALA:HB3	7	0.77
(4,7)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	6	0.76
(4,7)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	6	0.76

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,58)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	6	0.76
(2,58)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	6	0.76
(1,201)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	10	0.76
(1,201)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	10	0.76
(1,201)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	10	0.76
(1,201)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG3	10	0.76
(1,201)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG3	10	0.76
(1,201)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG3	10	0.76
(1,152)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:H	10	0.76
(1,141)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	10	0.76
(1,141)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	10	0.76
(1,60)	1:16:A:GLY:HA2	1:16:A:GLY:HA3	1	0.76
(1,60)	1:16:A:GLY:HA2	1:16:A:GLY:HA3	2	0.76
(1,60)	1:16:A:GLY:HA2	1:16:A:GLY:HA3	3	0.76
(1,60)	1:16:A:GLY:HA2	1:16:A:GLY:HA3	4	0.76
(1,60)	1:16:A:GLY:HA2	1:16:A:GLY:HA3	5	0.76
(1,60)	1:16:A:GLY:HA2	1:16:A:GLY:HA3	6	0.76
(1,60)	1:16:A:GLY:HA2	1:16:A:GLY:HA3	7	0.76
(1,60)	1:16:A:GLY:HA2	1:16:A:GLY:HA3	8	0.76
(1,60)	1:16:A:GLY:HA2	1:16:A:GLY:HA3	9	0.76
(1,54)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HB2	2	0.76
(4,26)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	9	0.75
(4,26)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB3	9	0.75
(4,21)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HA	10	0.75
(4,21)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HA	10	0.75
(3,140)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	9	0.75
(2,166)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	9	0.75
(2,162)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	9	0.75
(2,162)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB3	9	0.75
(2,146)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HA	10	0.75
(2,146)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HA	10	0.75
(1,200)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD21	1	0.75
(1,200)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD22	1	0.75
(1,200)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD23	1	0.75
(1,200)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD21	1	0.75
(1,200)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD22	1	0.75
(1,200)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD23	1	0.75
(1,131)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD11	7	0.75
(1,131)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD12	7	0.75
(1,131)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD13	7	0.75
(1,131)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD11	8	0.75
(1,131)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD12	8	0.75

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,131)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD13	8	0.75
(1,129)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD11	4	0.75
(1,129)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD12	4	0.75
(1,129)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD13	4	0.75
(1,60)	1:16:A:GLY:HA2	1:16:A:GLY:HA3	10	0.75
(1,54)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HB2	9	0.75
(4,7)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	8	0.74
(4,7)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	8	0.74
(3,170)	1:12:A:LEU:HD21	1:13:A:LYS:HG2	4	0.74
(3,170)	1:12:A:LEU:HD22	1:13:A:LYS:HG2	4	0.74
(3,170)	1:12:A:LEU:HD23	1:13:A:LYS:HG2	4	0.74
(2,208)	1:12:A:LEU:HD21	1:13:A:LYS:HG2	4	0.74
(2,208)	1:12:A:LEU:HD22	1:13:A:LYS:HG2	4	0.74
(2,208)	1:12:A:LEU:HD23	1:13:A:LYS:HG2	4	0.74
(2,58)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	8	0.74
(2,58)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	8	0.74
(1,196)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:HB2	5	0.74
(1,196)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:HB2	5	0.74
(1,196)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:HB2	5	0.74
(1,139)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HG13	5	0.74
(1,139)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HG13	5	0.74
(1,54)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HB2	4	0.74
(3,140)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	1	0.73
(2,166)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	1	0.73
(1,197)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD21	1	0.73
(1,197)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD22	1	0.73
(1,197)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD23	1	0.73
(1,160)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG2	7	0.73
(1,160)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG3	7	0.73
(1,159)	1:23:A:PRO:HD2	1:23:A:PRO:HD3	1	0.73
(1,159)	1:23:A:PRO:HD2	1:23:A:PRO:HD3	2	0.73
(1,159)	1:23:A:PRO:HD2	1:23:A:PRO:HD3	3	0.73
(1,159)	1:23:A:PRO:HD2	1:23:A:PRO:HD3	4	0.73
(1,159)	1:23:A:PRO:HD2	1:23:A:PRO:HD3	5	0.73
(1,159)	1:23:A:PRO:HD2	1:23:A:PRO:HD3	6	0.73
(1,159)	1:23:A:PRO:HD2	1:23:A:PRO:HD3	7	0.73
(1,159)	1:23:A:PRO:HD2	1:23:A:PRO:HD3	8	0.73
(1,159)	1:23:A:PRO:HD2	1:23:A:PRO:HD3	9	0.73
(1,159)	1:23:A:PRO:HD2	1:23:A:PRO:HD3	10	0.73
(1,129)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD11	2	0.73
(1,129)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD12	2	0.73
(1,129)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD13	2	0.73

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,54)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HB2	7	0.73
(4,24)	1:24:A:PRO:HG3	1:25:A:SER:H	6	0.72
(3,159)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	8	0.72
(3,159)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	8	0.72
(3,159)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	8	0.72
(3,159)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HB2	8	0.72
(3,159)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HB2	8	0.72
(3,159)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HB2	8	0.72
(3,123)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG13	10	0.72
(3,123)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG13	10	0.72
(3,121)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB3	5	0.72
(3,121)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB3	5	0.72
(2,189)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	8	0.72
(2,189)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	8	0.72
(2,189)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	8	0.72
(2,189)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HB2	8	0.72
(2,189)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HB2	8	0.72
(2,189)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HB2	8	0.72
(2,151)	1:24:A:PRO:HG3	1:25:A:SER:H	6	0.72
(2,140)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG13	10	0.72
(2,140)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG13	10	0.72
(2,137)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB3	5	0.72
(2,137)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB3	5	0.72
(1,215)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HE2	4	0.72
(1,215)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HE2	4	0.72
(1,215)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HE2	4	0.72
(1,179)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	2	0.72
(1,179)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	2	0.72
(1,179)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	2	0.72
(1,131)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD11	1	0.72
(1,131)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD12	1	0.72
(1,131)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD13	1	0.72
(1,127)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	2	0.72
(1,127)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	2	0.72
(1,127)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	2	0.72
(1,127)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	2	0.72
(1,127)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	2	0.72
(1,127)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	2	0.72
(1,215)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HE2	2	0.71
(1,215)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HE2	2	0.71
(1,215)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HE2	2	0.71
(1,161)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	4	0.71

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,65)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HG2	6	0.71
(3,140)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	7	0.7
(2,166)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	7	0.7
(1,209)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD21	9	0.7
(1,209)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD22	9	0.7
(1,209)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD23	9	0.7
(1,183)	1:13:A:LYS:HG2	1:13:A:LYS:HG3	3	0.7
(1,183)	1:13:A:LYS:HG2	1:13:A:LYS:HG3	5	0.7
(1,150)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HD2	3	0.7
(1,150)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HD3	3	0.7
(1,149)	1:11:A:TRP:HD1	1:23:A:PRO:HA	10	0.7
(1,43)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB2	6	0.7
(1,41)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HG3	3	0.7
(1,34)	1:24:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HG3	2	0.7
(4,7)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	10	0.69
(4,7)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	10	0.69
(3,123)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG13	9	0.69
(3,123)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG13	9	0.69
(2,140)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG13	9	0.69
(2,140)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG13	9	0.69
(2,58)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	10	0.69
(2,58)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	10	0.69
(1,174)	1:6:A:ARG:HD2	1:10:A:GLN:HB3	3	0.69
(1,174)	1:6:A:ARG:HD3	1:10:A:GLN:HB3	3	0.69
(1,131)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD11	10	0.69
(1,131)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD12	10	0.69
(1,131)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD13	10	0.69
(1,107)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HB3	2	0.69
(1,54)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HB2	8	0.69
(1,34)	1:24:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HG3	4	0.69
(1,22)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HB3	2	0.69
(1,22)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HB3	4	0.69
(1,22)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HB3	6	0.69
(1,186)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:HB3	1	0.68
(1,186)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:HB3	1	0.68
(1,186)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:HB3	1	0.68
(1,186)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HB3	1	0.68
(1,186)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HB3	1	0.68
(1,186)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HB3	1	0.68
(1,183)	1:13:A:LYS:HG2	1:13:A:LYS:HG3	1	0.68
(1,183)	1:13:A:LYS:HG2	1:13:A:LYS:HG3	2	0.68
(1,183)	1:13:A:LYS:HG2	1:13:A:LYS:HG3	4	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,183)	1:13:A:LYS:HG2	1:13:A:LYS:HG3	6	0.68
(1,183)	1:13:A:LYS:HG2	1:13:A:LYS:HG3	7	0.68
(1,183)	1:13:A:LYS:HG2	1:13:A:LYS:HG3	8	0.68
(1,183)	1:13:A:LYS:HG2	1:13:A:LYS:HG3	9	0.68
(1,183)	1:13:A:LYS:HG2	1:13:A:LYS:HG3	10	0.68
(1,179)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	7	0.68
(1,179)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	7	0.68
(1,179)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	7	0.68
(1,158)	1:6:A:ARG:HB2	1:9:A:ILE:H	5	0.68
(1,158)	1:6:A:ARG:HB3	1:9:A:ILE:H	5	0.68
(1,156)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HB2	1	0.68
(1,41)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HG3	9	0.68
(1,34)	1:24:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HG3	10	0.68
(4,24)	1:24:A:PRO:HG3	1:25:A:SER:H	1	0.67
(4,24)	1:24:A:PRO:HG3	1:25:A:SER:H	2	0.67
(4,8)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	2	0.67
(4,8)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	2	0.67
(4,3)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG2	3	0.67
(4,3)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG3	3	0.67
(2,151)	1:24:A:PRO:HG3	1:25:A:SER:H	1	0.67
(2,151)	1:24:A:PRO:HG3	1:25:A:SER:H	2	0.67
(2,59)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	2	0.67
(2,59)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	2	0.67
(2,14)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG2	3	0.67
(2,14)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG3	3	0.67
(1,215)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HE2	9	0.67
(1,215)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HE2	9	0.67
(1,215)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HE2	9	0.67
(1,197)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD21	4	0.67
(1,197)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD22	4	0.67
(1,197)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD23	4	0.67
(1,160)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG2	6	0.67
(1,160)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG3	6	0.67
(1,127)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	5	0.67
(1,127)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	5	0.67
(1,127)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	5	0.67
(1,127)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	5	0.67
(1,127)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	5	0.67
(1,127)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	5	0.67
(1,127)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	6	0.67
(1,127)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	6	0.67
(1,127)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	6	0.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,127)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	6	0.67
(1,127)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	6	0.67
(1,127)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	6	0.67
(1,54)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HB2	3	0.67
(4,15)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	10	0.66
(4,15)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	10	0.66
(4,15)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	10	0.66
(4,15)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	10	0.66
(4,15)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	10	0.66
(4,15)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	10	0.66
(4,15)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE1	10	0.66
(4,15)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE2	10	0.66
(4,15)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE1	10	0.66
(4,15)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE2	10	0.66
(4,15)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE1	10	0.66
(4,15)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE2	10	0.66
(2,123)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	10	0.66
(2,123)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	10	0.66
(2,123)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	10	0.66
(2,123)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	10	0.66
(2,123)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	10	0.66
(2,123)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	10	0.66
(2,123)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE1	10	0.66
(2,123)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE2	10	0.66
(2,123)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE1	10	0.66
(2,123)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE2	10	0.66
(2,123)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE1	10	0.66
(2,123)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE2	10	0.66
(1,185)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG13	9	0.66
(1,185)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG13	9	0.66
(1,185)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG13	9	0.66
(1,185)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG13	9	0.66
(1,185)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG13	9	0.66
(1,185)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG13	9	0.66
(1,174)	1:6:A:ARG:HD2	1:10:A:GLN:HB3	5	0.66
(1,174)	1:6:A:ARG:HD3	1:10:A:GLN:HB3	5	0.66
(1,160)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG2	10	0.66
(1,160)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG3	10	0.66
(1,52)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HB3	8	0.66
(1,34)	1:24:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HG3	6	0.66
(1,22)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HB3	1	0.66
(3,121)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB3	6	0.65

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,121)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB3	6	0.65
(3,14)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	1	0.65
(2,137)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB3	6	0.65
(2,137)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB3	6	0.65
(2,17)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	1	0.65
(1,197)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD21	2	0.65
(1,197)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD22	2	0.65
(1,197)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD23	2	0.65
(1,150)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HD2	2	0.65
(1,150)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HD3	2	0.65
(1,139)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HG13	8	0.65
(1,139)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HG13	8	0.65
(1,129)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD11	6	0.65
(1,129)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD12	6	0.65
(1,129)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD13	6	0.65
(1,54)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HB2	5	0.65
(1,34)	1:24:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HG3	1	0.65
(1,22)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HB3	10	0.65
(4,8)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	7	0.64
(4,8)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	7	0.64
(4,8)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	10	0.64
(4,8)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	10	0.64
(3,170)	1:12:A:LEU:HD21	1:13:A:LYS:HG2	2	0.64
(3,170)	1:12:A:LEU:HD22	1:13:A:LYS:HG2	2	0.64
(3,170)	1:12:A:LEU:HD23	1:13:A:LYS:HG2	2	0.64
(2,208)	1:12:A:LEU:HD21	1:13:A:LYS:HG2	2	0.64
(2,208)	1:12:A:LEU:HD22	1:13:A:LYS:HG2	2	0.64
(2,208)	1:12:A:LEU:HD23	1:13:A:LYS:HG2	2	0.64
(2,59)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	7	0.64
(2,59)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	7	0.64
(2,59)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	10	0.64
(2,59)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	10	0.64
(1,215)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HE2	10	0.64
(1,215)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HE2	10	0.64
(1,215)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HE2	10	0.64
(1,198)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA3	7	0.64
(1,198)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA3	7	0.64
(1,198)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA3	7	0.64
(1,139)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HG13	7	0.64
(1,139)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HG13	7	0.64
(1,129)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD11	1	0.64
(1,129)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD12	1	0.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,129)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD13	1	0.64
(1,110)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	6	0.64
(1,110)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	6	0.64
(1,110)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	6	0.64
(1,90)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:H	1	0.64
(1,90)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:H	1	0.64
(1,90)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:H	1	0.64
(1,52)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HB3	5	0.64
(1,52)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HB3	10	0.64
(1,41)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HG3	5	0.64
(1,34)	1:24:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HG3	5	0.64
(1,34)	1:24:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HG3	7	0.64
(1,34)	1:24:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HG3	8	0.64
(1,22)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HB3	7	0.64
(1,22)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HB3	8	0.64
(1,22)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HB3	9	0.64
(4,8)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	3	0.63
(4,8)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	3	0.63
(4,8)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	6	0.63
(4,8)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	6	0.63
(4,8)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	8	0.63
(4,8)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	8	0.63
(3,158)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HE2	7	0.63
(3,158)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HE2	7	0.63
(3,158)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HE2	7	0.63
(3,13)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD2	6	0.63
(2,188)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HE2	7	0.63
(2,188)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HE2	7	0.63
(2,188)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HE2	7	0.63
(2,59)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	3	0.63
(2,59)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	3	0.63
(2,59)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	6	0.63
(2,59)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	6	0.63
(2,59)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	8	0.63
(2,59)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	8	0.63
(2,16)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD2	6	0.63
(1,110)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	4	0.63
(1,110)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	4	0.63
(1,110)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	4	0.63
(1,110)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	5	0.63
(1,110)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	5	0.63
(1,110)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	5	0.63

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,54)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HB2	1	0.63
(1,22)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HB3	3	0.63
(1,22)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HB3	5	0.63
(4,38)	1:12:A:LEU:HD11	1:13:A:LYS:HG2	8	0.62
(4,38)	1:12:A:LEU:HD12	1:13:A:LYS:HG2	8	0.62
(4,38)	1:12:A:LEU:HD13	1:13:A:LYS:HG2	8	0.62
(4,8)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	4	0.62
(4,8)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	4	0.62
(2,207)	1:12:A:LEU:HD11	1:13:A:LYS:HG2	8	0.62
(2,207)	1:12:A:LEU:HD12	1:13:A:LYS:HG2	8	0.62
(2,207)	1:12:A:LEU:HD13	1:13:A:LYS:HG2	8	0.62
(2,59)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	4	0.62
(2,59)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	4	0.62
(1,201)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	8	0.62
(1,201)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	8	0.62
(1,201)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	8	0.62
(1,201)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG3	8	0.62
(1,201)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG3	8	0.62
(1,201)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG3	8	0.62
(1,54)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HB2	10	0.62
(4,17)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG12	3	0.61
(4,17)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG12	3	0.61
(4,8)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	9	0.61
(4,8)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	9	0.61
(2,138)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG12	3	0.61
(2,138)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG12	3	0.61
(2,59)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	9	0.61
(2,59)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	9	0.61
(1,186)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:HB3	10	0.61
(1,186)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:HB3	10	0.61
(1,186)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:HB3	10	0.61
(1,186)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HB3	10	0.61
(1,186)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HB3	10	0.61
(1,186)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HB3	10	0.61
(1,182)	1:6:A:ARG:HG2	1:7:A:LEU:HB2	3	0.61
(1,168)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG2	8	0.61
(1,168)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG3	8	0.61
(1,150)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HD2	1	0.61
(1,150)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HD3	1	0.61
(1,65)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HG2	10	0.61
(1,188)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HE2	6	0.6
(1,188)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HE2	6	0.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,188)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HE2	6	0.6
(1,54)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HB2	6	0.6
(1,34)	1:24:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HG3	3	0.6
(1,34)	1:24:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HG3	9	0.6
(3,157)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG11	5	0.59
(3,157)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG12	5	0.59
(3,157)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG13	5	0.59
(3,157)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	5	0.59
(3,157)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	5	0.59
(3,157)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	5	0.59
(3,157)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG11	5	0.59
(3,157)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG12	5	0.59
(3,157)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG13	5	0.59
(2,187)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG11	5	0.59
(2,187)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG12	5	0.59
(2,187)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG13	5	0.59
(2,187)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	5	0.59
(2,187)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	5	0.59
(2,187)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	5	0.59
(2,187)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG11	5	0.59
(2,187)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG12	5	0.59
(2,187)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG13	5	0.59
(1,150)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HD2	4	0.59
(1,150)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HD3	4	0.59
(1,127)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	1	0.59
(1,127)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	1	0.59
(1,127)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	1	0.59
(1,127)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	1	0.59
(1,127)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	1	0.59
(1,127)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	1	0.59
(1,65)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HG2	7	0.59
(1,52)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HB3	9	0.59
(3,157)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG11	4	0.58
(3,157)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG12	4	0.58
(3,157)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG13	4	0.58
(3,157)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	4	0.58
(3,157)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	4	0.58
(3,157)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	4	0.58
(3,157)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG11	4	0.58
(3,157)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG12	4	0.58
(3,157)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG13	4	0.58
(2,187)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG11	4	0.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,187)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG12	4	0.58
(2,187)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG13	4	0.58
(2,187)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	4	0.58
(2,187)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	4	0.58
(2,187)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	4	0.58
(2,187)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG11	4	0.58
(2,187)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG12	4	0.58
(2,187)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG13	4	0.58
(1,182)	1:6:A:ARG:HG2	1:7:A:LEU:HB2	6	0.58
(1,168)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG2	3	0.58
(1,168)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG3	3	0.58
(1,131)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD11	5	0.58
(1,131)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD12	5	0.58
(1,131)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD13	5	0.58
(1,87)	1:18:A:SER:HA	1:18:A:SER:HB2	5	0.58
(1,87)	1:18:A:SER:HA	1:18:A:SER:HB3	5	0.58
(1,65)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HG2	4	0.58
(1,42)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB3	2	0.58
(1,42)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB3	9	0.58
(1,15)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HB2	7	0.58
(1,185)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG13	2	0.57
(1,185)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG13	2	0.57
(1,185)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG13	2	0.57
(1,185)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG13	2	0.57
(1,185)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG13	2	0.57
(1,185)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG13	2	0.57
(1,168)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG2	2	0.57
(1,168)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG3	2	0.57
(1,168)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG2	10	0.57
(1,168)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG3	10	0.57
(1,87)	1:18:A:SER:HA	1:18:A:SER:HB2	1	0.57
(1,87)	1:18:A:SER:HA	1:18:A:SER:HB3	1	0.57
(1,87)	1:18:A:SER:HA	1:18:A:SER:HB2	7	0.57
(1,87)	1:18:A:SER:HA	1:18:A:SER:HB3	7	0.57
(1,70)	1:13:A:LYS:HE2	1:13:A:LYS:HG3	5	0.57
(1,65)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HG2	2	0.57
(1,47)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	2	0.57
(1,47)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	2	0.57
(1,47)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	2	0.57
(1,47)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG21	2	0.57
(1,47)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG22	2	0.57
(1,47)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG23	2	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,47)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	5	0.57
(1,47)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	5	0.57
(1,47)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	5	0.57
(1,47)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG21	5	0.57
(1,47)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG22	5	0.57
(1,47)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG23	5	0.57
(1,41)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HG3	1	0.57
(4,31)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG11	4	0.56
(4,31)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG12	4	0.56
(4,31)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG13	4	0.56
(4,31)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG21	4	0.56
(4,31)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG22	4	0.56
(4,31)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG23	4	0.56
(4,13)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HG	2	0.56
(4,8)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	5	0.56
(4,8)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	5	0.56
(3,104)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG2	5	0.56
(3,14)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	9	0.56
(2,190)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG11	4	0.56
(2,190)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG12	4	0.56
(2,190)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG13	4	0.56
(2,190)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG21	4	0.56
(2,190)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG22	4	0.56
(2,190)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG23	4	0.56
(2,117)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG2	5	0.56
(2,112)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HG	2	0.56
(2,59)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	5	0.56
(2,59)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	5	0.56
(2,17)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	9	0.56
(1,189)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	2	0.56
(1,189)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	2	0.56
(1,189)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	2	0.56
(1,189)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HB2	2	0.56
(1,189)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HB2	2	0.56
(1,189)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HB2	2	0.56
(1,170)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HD2	2	0.56
(1,169)	1:21:A:ARG:HG2	1:22:A:PRO:HD2	6	0.56
(1,92)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	3	0.56
(1,92)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	3	0.56
(1,70)	1:13:A:LYS:HE2	1:13:A:LYS:HG3	10	0.56
(1,52)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HB3	3	0.56
(1,41)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HG3	8	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,17)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG12	8	0.55
(4,17)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG12	8	0.55
(2,138)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG12	8	0.55
(2,138)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG12	8	0.55
(1,47)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	10	0.55
(1,47)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	10	0.55
(1,47)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	10	0.55
(1,47)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG21	10	0.55
(1,47)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG22	10	0.55
(1,47)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG23	10	0.55
(3,75)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD2	2	0.54
(3,75)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD2	10	0.54
(3,13)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD2	9	0.54
(2,84)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD2	2	0.54
(2,84)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD2	10	0.54
(2,16)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD2	9	0.54
(1,198)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA3	3	0.54
(1,198)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA3	3	0.54
(1,198)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA3	3	0.54
(1,92)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	2	0.54
(1,92)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	2	0.54
(1,47)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	4	0.54
(1,47)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	4	0.54
(1,47)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	4	0.54
(1,47)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG21	4	0.54
(1,47)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG22	4	0.54
(1,47)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG23	4	0.54
(1,47)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	9	0.54
(1,47)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	9	0.54
(1,47)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	9	0.54
(1,47)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG21	9	0.54
(1,47)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG22	9	0.54
(1,47)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG23	9	0.54
(1,42)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB3	3	0.54
(1,42)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB3	4	0.54
(1,41)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HG3	4	0.54
(4,8)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	1	0.53
(4,8)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	1	0.53
(3,75)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD2	3	0.53
(3,14)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	6	0.53
(3,14)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	8	0.53
(3,13)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD2	1	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,13)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD2	8	0.53
(2,84)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD2	3	0.53
(2,59)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	1	0.53
(2,59)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	1	0.53
(2,17)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	6	0.53
(2,17)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	8	0.53
(2,16)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD2	1	0.53
(2,16)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD2	8	0.53
(1,178)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	4	0.53
(1,178)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	4	0.53
(1,178)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	4	0.53
(1,178)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB1	4	0.53
(1,178)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB2	4	0.53
(1,178)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB3	4	0.53
(1,168)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG2	1	0.53
(1,168)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG3	1	0.53
(1,168)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG2	4	0.53
(1,168)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG3	4	0.53
(1,168)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG2	7	0.53
(1,168)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG3	7	0.53
(1,168)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG2	9	0.53
(1,168)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG3	9	0.53
(1,156)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HB2	5	0.53
(1,139)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HG13	4	0.53
(1,139)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HG13	4	0.53
(1,107)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HB3	5	0.53
(1,92)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	1	0.53
(1,92)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	1	0.53
(1,91)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG11	7	0.53
(1,91)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG12	7	0.53
(1,91)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG13	7	0.53
(1,91)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	7	0.53
(1,91)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	7	0.53
(1,91)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	7	0.53
(1,64)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD2	5	0.53
(1,64)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD3	5	0.53
(1,57)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HD1	1	0.53
(1,57)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HD2	1	0.53
(1,41)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HG3	2	0.53
(4,38)	1:12:A:LEU:HD11	1:13:A:LYS:HG2	1	0.52
(4,38)	1:12:A:LEU:HD12	1:13:A:LYS:HG2	1	0.52
(4,38)	1:12:A:LEU:HD13	1:13:A:LYS:HG2	1	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,17)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG12	6	0.52
(4,17)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG12	6	0.52
(4,5)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	4	0.52
(3,123)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG13	6	0.52
(3,123)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG13	6	0.52
(3,105)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HD2	1	0.52
(3,105)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HD2	3	0.52
(2,207)	1:12:A:LEU:HD11	1:13:A:LYS:HG2	1	0.52
(2,207)	1:12:A:LEU:HD12	1:13:A:LYS:HG2	1	0.52
(2,207)	1:12:A:LEU:HD13	1:13:A:LYS:HG2	1	0.52
(2,140)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG13	6	0.52
(2,140)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG13	6	0.52
(2,138)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG12	6	0.52
(2,138)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG12	6	0.52
(2,119)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HD2	1	0.52
(2,119)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HD2	3	0.52
(2,29)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	4	0.52
(1,200)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD21	4	0.52
(1,200)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD22	4	0.52
(1,200)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD23	4	0.52
(1,200)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD21	4	0.52
(1,200)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD22	4	0.52
(1,200)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD23	4	0.52
(1,182)	1:6:A:ARG:HG2	1:7:A:LEU:HB2	2	0.52
(1,182)	1:6:A:ARG:HG2	1:7:A:LEU:HB2	9	0.52
(1,168)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG2	5	0.52
(1,168)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG3	5	0.52
(1,168)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG2	6	0.52
(1,168)	1:17:A:PRO:HD3	1:17:A:PRO:HG3	6	0.52
(1,161)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	9	0.52
(1,107)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HB3	9	0.52
(1,56)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HD1	10	0.52
(1,56)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HD2	10	0.52
(1,47)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	1	0.52
(1,47)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	1	0.52
(1,47)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	1	0.52
(1,47)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG21	1	0.52
(1,47)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG22	1	0.52
(1,47)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG23	1	0.52
(1,47)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	3	0.52
(1,47)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	3	0.52
(1,47)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	3	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,47)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG21	3	0.52
(1,47)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG22	3	0.52
(1,47)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG23	3	0.52
(1,47)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	6	0.52
(1,47)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	6	0.52
(1,47)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	6	0.52
(1,47)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG21	6	0.52
(1,47)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG22	6	0.52
(1,47)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG23	6	0.52
(1,47)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	7	0.52
(1,47)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	7	0.52
(1,47)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	7	0.52
(1,47)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG21	7	0.52
(1,47)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG22	7	0.52
(1,47)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG23	7	0.52
(4,34)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:HB2	8	0.51
(4,34)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:HB2	8	0.51
(4,34)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:HB2	8	0.51
(4,17)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG12	1	0.51
(4,17)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG12	1	0.51
(4,5)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	1	0.51
(4,5)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	10	0.51
(3,170)	1:12:A:LEU:HD21	1:13:A:LYS:HG2	1	0.51
(3,170)	1:12:A:LEU:HD22	1:13:A:LYS:HG2	1	0.51
(3,170)	1:12:A:LEU:HD23	1:13:A:LYS:HG2	1	0.51
(3,83)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG12	2	0.51
(3,83)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG12	7	0.51
(2,208)	1:12:A:LEU:HD21	1:13:A:LYS:HG2	1	0.51
(2,208)	1:12:A:LEU:HD22	1:13:A:LYS:HG2	1	0.51
(2,208)	1:12:A:LEU:HD23	1:13:A:LYS:HG2	1	0.51
(2,196)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:HB2	8	0.51
(2,196)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:HB2	8	0.51
(2,196)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:HB2	8	0.51
(2,138)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG12	1	0.51
(2,138)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG12	1	0.51
(2,94)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG12	2	0.51
(2,94)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG12	7	0.51
(2,29)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	1	0.51
(2,29)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	10	0.51
(1,197)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD21	3	0.51
(1,197)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD22	3	0.51
(1,197)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD23	3	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,197)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD21	9	0.51
(1,197)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD22	9	0.51
(1,197)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD23	9	0.51
(1,182)	1:6:A:ARG:HG2	1:7:A:LEU:HB2	7	0.51
(1,107)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HB3	4	0.51
(1,92)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	4	0.51
(1,92)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	4	0.51
(1,65)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HG2	8	0.51
(1,57)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HD1	5	0.51
(1,57)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HD2	5	0.51
(1,42)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB3	1	0.51
(1,41)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HG3	10	0.51
(1,26)	1:23:A:PRO:HD2	1:23:A:PRO:HG2	6	0.51
(4,31)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG11	6	0.5
(4,31)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG12	6	0.5
(4,31)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG13	6	0.5
(4,31)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG21	6	0.5
(4,31)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG22	6	0.5
(4,31)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG23	6	0.5
(3,176)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HE2	3	0.5
(3,176)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HE2	3	0.5
(3,176)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HE2	3	0.5
(3,164)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA3	4	0.5
(3,164)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA3	4	0.5
(3,164)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA3	4	0.5
(3,105)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HD2	6	0.5
(3,83)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG12	5	0.5
(3,83)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG12	8	0.5
(3,83)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG12	10	0.5
(3,45)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	1	0.5
(2,215)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HE2	3	0.5
(2,215)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HE2	3	0.5
(2,215)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HE2	3	0.5
(2,198)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA3	4	0.5
(2,198)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA3	4	0.5
(2,198)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA3	4	0.5
(2,190)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG11	6	0.5
(2,190)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG12	6	0.5
(2,190)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG13	6	0.5
(2,190)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG21	6	0.5
(2,190)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG22	6	0.5
(2,190)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG23	6	0.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,119)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HD2	6	0.5
(2,94)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG12	5	0.5
(2,94)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG12	8	0.5
(2,94)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG12	10	0.5
(2,51)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	1	0.5
(1,209)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD21	3	0.5
(1,209)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD22	3	0.5
(1,209)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD23	3	0.5
(1,189)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	3	0.5
(1,189)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	3	0.5
(1,189)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	3	0.5
(1,189)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HB2	3	0.5
(1,189)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HB2	3	0.5
(1,189)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HB2	3	0.5
(1,182)	1:6:A:ARG:HG2	1:7:A:LEU:HB2	1	0.5
(1,180)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	10	0.5
(1,180)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	10	0.5
(1,180)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	10	0.5
(1,180)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB1	10	0.5
(1,180)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB2	10	0.5
(1,180)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB3	10	0.5
(1,139)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HG13	10	0.5
(1,139)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HG13	10	0.5
(1,107)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HB3	3	0.5
(1,93)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	1	0.5
(1,93)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	1	0.5
(1,93)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	1	0.5
(1,91)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG11	3	0.5
(1,91)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG12	3	0.5
(1,91)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG13	3	0.5
(1,91)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	3	0.5
(1,91)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	3	0.5
(1,91)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	3	0.5
(1,65)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HG2	9	0.5
(1,57)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HD1	9	0.5
(1,57)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HD2	9	0.5
(1,26)	1:23:A:PRO:HD2	1:23:A:PRO:HG2	5	0.5
(1,26)	1:23:A:PRO:HD2	1:23:A:PRO:HG2	8	0.5
(3,131)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG13	1	0.49
(3,105)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HD2	2	0.49
(3,83)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG12	4	0.49
(3,45)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	2	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,45)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	4	0.49
(3,45)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	7	0.49
(2,155)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG13	1	0.49
(2,119)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HD2	2	0.49
(2,94)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG12	4	0.49
(2,51)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	2	0.49
(2,51)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	4	0.49
(2,51)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	7	0.49
(1,193)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HA	7	0.49
(1,193)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HA	7	0.49
(1,193)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HA	7	0.49
(1,182)	1:6:A:ARG:HG2	1:7:A:LEU:HB2	10	0.49
(1,170)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HD2	4	0.49
(1,165)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HB3	8	0.49
(1,154)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HG3	9	0.49
(1,129)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD11	7	0.49
(1,129)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD12	7	0.49
(1,129)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD13	7	0.49
(1,116)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HB2	9	0.49
(1,116)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HB3	9	0.49
(1,115)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HD2	5	0.49
(1,115)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HD3	5	0.49
(1,91)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG11	9	0.49
(1,91)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG12	9	0.49
(1,91)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG13	9	0.49
(1,91)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	9	0.49
(1,91)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	9	0.49
(1,91)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	9	0.49
(1,48)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG11	5	0.49
(1,48)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG12	5	0.49
(1,48)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG13	5	0.49
(1,48)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG21	5	0.49
(1,48)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG22	5	0.49
(1,48)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG23	5	0.49
(1,48)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG11	6	0.49
(1,48)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG12	6	0.49
(1,48)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG13	6	0.49
(1,48)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG21	6	0.49
(1,48)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG22	6	0.49
(1,48)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG23	6	0.49
(1,47)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	8	0.49
(1,47)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	8	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,47)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	8	0.49
(1,47)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG21	8	0.49
(1,47)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG22	8	0.49
(1,47)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG23	8	0.49
(1,37)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HG2	2	0.49
(1,37)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HG2	4	0.49
(1,26)	1:23:A:PRO:HD2	1:23:A:PRO:HG2	3	0.49
(1,26)	1:23:A:PRO:HD2	1:23:A:PRO:HG2	9	0.49
(1,26)	1:23:A:PRO:HD2	1:23:A:PRO:HG2	10	0.49
(4,34)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:HB2	3	0.48
(4,34)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:HB2	3	0.48
(4,34)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:HB2	3	0.48
(4,24)	1:24:A:PRO:HG3	1:25:A:SER:H	7	0.48
(3,121)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB3	2	0.48
(3,121)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB3	2	0.48
(3,105)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HD2	4	0.48
(3,105)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HD2	7	0.48
(3,105)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HD2	8	0.48
(3,105)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HD2	9	0.48
(3,105)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HD2	10	0.48
(2,196)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:HB2	3	0.48
(2,196)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:HB2	3	0.48
(2,196)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:HB2	3	0.48
(2,151)	1:24:A:PRO:HG3	1:25:A:SER:H	7	0.48
(2,137)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB3	2	0.48
(2,137)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB3	2	0.48
(2,119)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HD2	4	0.48
(2,119)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HD2	7	0.48
(2,119)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HD2	8	0.48
(2,119)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HD2	9	0.48
(2,119)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HD2	10	0.48
(1,189)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	9	0.48
(1,189)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	9	0.48
(1,189)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	9	0.48
(1,189)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HB2	9	0.48
(1,189)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HB2	9	0.48
(1,189)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HB2	9	0.48
(1,170)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HD2	1	0.48
(1,170)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HD2	6	0.48
(1,165)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HB3	4	0.48
(1,147)	1:11:A:TRP:HE3	1:11:A:TRP:HZ3	3	0.48
(1,136)	1:8:A:TYR:HD1	1:23:A:PRO:HB3	3	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,136)	1:8:A:TYR:HD2	1:23:A:PRO:HB3	3	0.48
(1,116)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HB2	3	0.48
(1,116)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HB3	3	0.48
(1,116)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HB2	4	0.48
(1,116)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HB3	4	0.48
(1,116)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HB2	7	0.48
(1,116)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HB3	7	0.48
(1,116)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HB2	10	0.48
(1,116)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HB3	10	0.48
(1,104)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HG2	4	0.48
(1,48)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG11	2	0.48
(1,48)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG12	2	0.48
(1,48)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG13	2	0.48
(1,48)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG21	2	0.48
(1,48)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG22	2	0.48
(1,48)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG23	2	0.48
(1,48)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG11	3	0.48
(1,48)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG12	3	0.48
(1,48)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG13	3	0.48
(1,48)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG21	3	0.48
(1,48)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG22	3	0.48
(1,48)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG23	3	0.48
(1,48)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG11	4	0.48
(1,48)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG12	4	0.48
(1,48)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG13	4	0.48
(1,48)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG21	4	0.48
(1,48)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG22	4	0.48
(1,48)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG23	4	0.48
(1,26)	1:23:A:PRO:HD2	1:23:A:PRO:HG2	1	0.48
(1,26)	1:23:A:PRO:HD2	1:23:A:PRO:HG2	7	0.48
(4,31)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG11	5	0.47
(4,31)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG12	5	0.47
(4,31)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG13	5	0.47
(4,31)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG21	5	0.47
(4,31)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG22	5	0.47
(4,31)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG23	5	0.47
(4,31)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG11	7	0.47
(4,31)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG12	7	0.47
(4,31)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG13	7	0.47
(4,31)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG21	7	0.47
(4,31)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG22	7	0.47
(4,31)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG23	7	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,26)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	4	0.47
(4,26)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB3	4	0.47
(4,15)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	8	0.47
(4,15)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	8	0.47
(4,15)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	8	0.47
(4,15)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	8	0.47
(4,15)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	8	0.47
(4,15)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	8	0.47
(4,15)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE1	8	0.47
(4,15)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE2	8	0.47
(4,15)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE1	8	0.47
(4,15)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE2	8	0.47
(4,15)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE1	8	0.47
(4,15)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE2	8	0.47
(4,13)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HG	8	0.47
(4,5)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	3	0.47
(4,5)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	5	0.47
(4,5)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	7	0.47
(4,5)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	8	0.47
(4,5)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	9	0.47
(4,3)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG2	1	0.47
(4,3)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG3	1	0.47
(3,45)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	6	0.47
(2,190)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG11	5	0.47
(2,190)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG12	5	0.47
(2,190)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG13	5	0.47
(2,190)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG21	5	0.47
(2,190)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG22	5	0.47
(2,190)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG23	5	0.47
(2,190)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG11	7	0.47
(2,190)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG12	7	0.47
(2,190)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG13	7	0.47
(2,190)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG21	7	0.47
(2,190)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG22	7	0.47
(2,190)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG23	7	0.47
(2,162)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	4	0.47
(2,162)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB3	4	0.47
(2,123)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	8	0.47
(2,123)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	8	0.47
(2,123)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	8	0.47
(2,123)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	8	0.47
(2,123)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	8	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,123)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	8	0.47
(2,123)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE1	8	0.47
(2,123)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE2	8	0.47
(2,123)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE1	8	0.47
(2,123)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE2	8	0.47
(2,123)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE1	8	0.47
(2,123)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE2	8	0.47
(2,112)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HG	8	0.47
(2,51)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	6	0.47
(2,29)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	3	0.47
(2,29)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	5	0.47
(2,29)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	7	0.47
(2,29)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	8	0.47
(2,29)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	9	0.47
(2,14)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG2	1	0.47
(2,14)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG3	1	0.47
(1,208)	1:12:A:LEU:HD21	1:13:A:LYS:HG2	6	0.47
(1,208)	1:12:A:LEU:HD22	1:13:A:LYS:HG2	6	0.47
(1,208)	1:12:A:LEU:HD23	1:13:A:LYS:HG2	6	0.47
(1,200)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD21	8	0.47
(1,200)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD22	8	0.47
(1,200)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD23	8	0.47
(1,200)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD21	8	0.47
(1,200)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD22	8	0.47
(1,200)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD23	8	0.47
(1,147)	1:11:A:TRP:HE3	1:11:A:TRP:HZ3	9	0.47
(1,116)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HB2	2	0.47
(1,116)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HB3	2	0.47
(1,116)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HB2	6	0.47
(1,116)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HB3	6	0.47
(1,116)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HB2	8	0.47
(1,116)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HB3	8	0.47
(1,104)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HG2	3	0.47
(1,70)	1:13:A:LYS:HE2	1:13:A:LYS:HG3	4	0.47
(1,63)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HB2	3	0.47
(1,63)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HB3	3	0.47
(1,48)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG11	7	0.47
(1,48)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG12	7	0.47
(1,48)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG13	7	0.47
(1,48)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG21	7	0.47
(1,48)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG22	7	0.47
(1,48)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG23	7	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,48)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG11	8	0.47
(1,48)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG12	8	0.47
(1,48)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG13	8	0.47
(1,48)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG21	8	0.47
(1,48)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG22	8	0.47
(1,48)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG23	8	0.47
(1,48)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG11	9	0.47
(1,48)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG12	9	0.47
(1,48)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG13	9	0.47
(1,48)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG21	9	0.47
(1,48)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG22	9	0.47
(1,48)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG23	9	0.47
(1,48)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG11	10	0.47
(1,48)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG12	10	0.47
(1,48)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG13	10	0.47
(1,48)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG21	10	0.47
(1,48)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG22	10	0.47
(1,48)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG23	10	0.47
(1,26)	1:23:A:PRO:HD2	1:23:A:PRO:HG2	2	0.47
(4,35)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD21	7	0.46
(4,35)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD22	7	0.46
(4,35)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD23	7	0.46
(4,35)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD21	7	0.46
(4,35)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD22	7	0.46
(4,35)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD23	7	0.46
(4,3)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG2	2	0.46
(4,3)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG3	2	0.46
(4,2)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD2	7	0.46
(2,200)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD21	7	0.46
(2,200)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD22	7	0.46
(2,200)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD23	7	0.46
(2,200)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD21	7	0.46
(2,200)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD22	7	0.46
(2,200)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD23	7	0.46
(2,14)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG2	2	0.46
(2,14)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG3	2	0.46
(2,7)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD2	7	0.46
(1,187)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG11	8	0.46
(1,187)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG12	8	0.46
(1,187)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG13	8	0.46
(1,187)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	8	0.46
(1,187)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	8	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,187)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	8	0.46
(1,187)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG11	8	0.46
(1,187)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG12	8	0.46
(1,187)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG13	8	0.46
(1,187)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG21	8	0.46
(1,187)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG22	8	0.46
(1,187)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG23	8	0.46
(1,170)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HD2	5	0.46
(1,147)	1:11:A:TRP:HE3	1:11:A:TRP:HZ3	6	0.46
(1,147)	1:11:A:TRP:HE3	1:11:A:TRP:HZ3	7	0.46
(1,116)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HB2	1	0.46
(1,116)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HB3	1	0.46
(1,107)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HB3	10	0.46
(1,57)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HD1	4	0.46
(1,57)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HD2	4	0.46
(1,56)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HD1	6	0.46
(1,56)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HD2	6	0.46
(1,56)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HD1	8	0.46
(1,56)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HD2	8	0.46
(1,48)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG11	1	0.46
(1,48)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG12	1	0.46
(1,48)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG13	1	0.46
(1,48)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG21	1	0.46
(1,48)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG22	1	0.46
(1,48)	1:5:A:VAL:HB	1:5:A:VAL:HG23	1	0.46
(1,26)	1:23:A:PRO:HD2	1:23:A:PRO:HG2	4	0.46
(4,31)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG11	9	0.45
(4,31)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG12	9	0.45
(4,31)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG13	9	0.45
(4,31)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG21	9	0.45
(4,31)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG22	9	0.45
(4,31)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG23	9	0.45
(4,21)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HA	4	0.45
(4,21)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HA	4	0.45
(4,13)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HG	10	0.45
(4,6)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG2	9	0.45
(4,3)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG2	4	0.45
(4,3)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG3	4	0.45
(3,158)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HE2	3	0.45
(3,158)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HE2	3	0.45
(3,158)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HE2	3	0.45
(3,83)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG12	9	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,190)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG11	9	0.45
(2,190)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG12	9	0.45
(2,190)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG13	9	0.45
(2,190)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG21	9	0.45
(2,190)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG22	9	0.45
(2,190)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG23	9	0.45
(2,188)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HE2	3	0.45
(2,188)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HE2	3	0.45
(2,188)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HE2	3	0.45
(2,146)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HA	4	0.45
(2,146)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HA	4	0.45
(2,112)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HG	10	0.45
(2,94)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG12	9	0.45
(2,32)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG2	9	0.45
(2,14)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG2	4	0.45
(2,14)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG3	4	0.45
(1,165)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HB3	7	0.45
(1,147)	1:11:A:TRP:HE3	1:11:A:TRP:HZ3	1	0.45
(1,147)	1:11:A:TRP:HE3	1:11:A:TRP:HZ3	2	0.45
(1,147)	1:11:A:TRP:HE3	1:11:A:TRP:HZ3	4	0.45
(1,87)	1:18:A:SER:HA	1:18:A:SER:HB2	8	0.45
(1,87)	1:18:A:SER:HA	1:18:A:SER:HB3	8	0.45
(1,37)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HG2	10	0.45
(1,21)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HB2	5	0.45
(1,21)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HB2	10	0.45
(4,31)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG11	2	0.44
(4,31)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG12	2	0.44
(4,31)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG13	2	0.44
(4,31)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG21	2	0.44
(4,31)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG22	2	0.44
(4,31)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG23	2	0.44
(4,26)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	2	0.44
(4,26)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB3	2	0.44
(4,24)	1:24:A:PRO:HG3	1:25:A:SER:H	8	0.44
(4,17)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG12	9	0.44
(4,17)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG12	9	0.44
(4,15)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	1	0.44
(4,15)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	1	0.44
(4,15)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	1	0.44
(4,15)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	1	0.44
(4,15)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	1	0.44
(4,15)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	1	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,15)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE1	1	0.44
(4,15)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE2	1	0.44
(4,15)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE1	1	0.44
(4,15)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE2	1	0.44
(4,15)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE1	1	0.44
(4,15)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE2	1	0.44
(4,6)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG2	3	0.44
(4,6)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG2	5	0.44
(4,1)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD2	3	0.44
(3,131)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG13	6	0.44
(3,14)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	5	0.44
(2,190)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG11	2	0.44
(2,190)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG12	2	0.44
(2,190)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG13	2	0.44
(2,190)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG21	2	0.44
(2,190)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG22	2	0.44
(2,190)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG23	2	0.44
(2,162)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	2	0.44
(2,162)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB3	2	0.44
(2,155)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG13	6	0.44
(2,151)	1:24:A:PRO:HG3	1:25:A:SER:H	8	0.44
(2,138)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG12	9	0.44
(2,138)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG12	9	0.44
(2,123)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	1	0.44
(2,123)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	1	0.44
(2,123)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	1	0.44
(2,123)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	1	0.44
(2,123)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	1	0.44
(2,123)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	1	0.44
(2,123)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE1	1	0.44
(2,123)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE2	1	0.44
(2,123)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE1	1	0.44
(2,123)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE2	1	0.44
(2,123)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE1	1	0.44
(2,123)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE2	1	0.44
(2,32)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG2	3	0.44
(2,32)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG2	5	0.44
(2,17)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	5	0.44
(2,4)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD2	3	0.44
(1,201)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG2	7	0.44
(1,201)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG2	7	0.44
(1,201)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG2	7	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,201)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:HG3	7	0.44
(1,201)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:HG3	7	0.44
(1,201)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:HG3	7	0.44
(1,189)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	4	0.44
(1,189)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	4	0.44
(1,189)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	4	0.44
(1,189)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HB2	4	0.44
(1,189)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HB2	4	0.44
(1,189)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HB2	4	0.44
(1,182)	1:6:A:ARG:HG2	1:7:A:LEU:HB2	8	0.44
(1,157)	1:4:A:ALA:H	1:4:A:ALA:HB1	10	0.44
(1,157)	1:4:A:ALA:H	1:4:A:ALA:HB2	10	0.44
(1,157)	1:4:A:ALA:H	1:4:A:ALA:HB3	10	0.44
(1,147)	1:11:A:TRP:HE3	1:11:A:TRP:HZ3	10	0.44
(1,139)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HG13	2	0.44
(1,139)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HG13	2	0.44
(1,105)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HG3	7	0.44
(1,87)	1:18:A:SER:HA	1:18:A:SER:HB2	3	0.44
(1,87)	1:18:A:SER:HA	1:18:A:SER:HB3	3	0.44
(1,87)	1:18:A:SER:HA	1:18:A:SER:HB2	10	0.44
(1,87)	1:18:A:SER:HA	1:18:A:SER:HB3	10	0.44
(1,81)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HA	1	0.44
(1,81)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HA	3	0.44
(1,81)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HA	7	0.44
(1,81)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HA	9	0.44
(1,57)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HD1	3	0.44
(1,57)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HD2	3	0.44
(1,37)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HG2	6	0.44
(1,21)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HB2	3	0.44
(1,21)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HB2	8	0.44
(1,21)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HB2	9	0.44
(4,29)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	2	0.43
(4,29)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	2	0.43
(4,29)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	2	0.43
(4,29)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB1	2	0.43
(4,29)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB2	2	0.43
(4,29)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB3	2	0.43
(4,29)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	4	0.43
(4,29)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	4	0.43
(4,29)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	4	0.43
(4,29)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB1	4	0.43
(4,29)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB2	4	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,29)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB3	4	0.43
(4,6)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG2	8	0.43
(4,3)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG2	8	0.43
(4,3)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG3	8	0.43
(2,180)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	2	0.43
(2,180)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	2	0.43
(2,180)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	2	0.43
(2,180)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB1	2	0.43
(2,180)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB2	2	0.43
(2,180)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB3	2	0.43
(2,180)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	4	0.43
(2,180)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	4	0.43
(2,180)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	4	0.43
(2,180)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB1	4	0.43
(2,180)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB2	4	0.43
(2,180)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB3	4	0.43
(2,32)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG2	8	0.43
(2,14)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG2	8	0.43
(2,14)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG3	8	0.43
(1,215)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HE2	7	0.43
(1,215)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HE2	7	0.43
(1,215)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HE2	7	0.43
(1,200)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD21	2	0.43
(1,200)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD22	2	0.43
(1,200)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD23	2	0.43
(1,200)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD21	2	0.43
(1,200)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD22	2	0.43
(1,200)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD23	2	0.43
(1,165)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HB3	2	0.43
(1,161)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	5	0.43
(1,147)	1:11:A:TRP:HE3	1:11:A:TRP:HZ3	5	0.43
(1,147)	1:11:A:TRP:HE3	1:11:A:TRP:HZ3	8	0.43
(1,116)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HB2	5	0.43
(1,116)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HB3	5	0.43
(1,92)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	5	0.43
(1,92)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	5	0.43
(1,87)	1:18:A:SER:HA	1:18:A:SER:HB2	2	0.43
(1,87)	1:18:A:SER:HA	1:18:A:SER:HB3	2	0.43
(1,87)	1:18:A:SER:HA	1:18:A:SER:HB2	6	0.43
(1,87)	1:18:A:SER:HA	1:18:A:SER:HB3	6	0.43
(1,81)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HA	4	0.43
(1,81)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HA	5	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,81)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HA	10	0.43
(1,21)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HB2	7	0.43
(4,21)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HA	2	0.42
(4,21)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HA	2	0.42
(4,20)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG2	5	0.42
(4,20)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG2	5	0.42
(3,132)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HB2	3	0.42
(3,75)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD2	8	0.42
(2,156)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HB2	3	0.42
(2,146)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HA	2	0.42
(2,146)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HA	2	0.42
(2,144)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG2	5	0.42
(2,144)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG2	5	0.42
(2,84)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD2	8	0.42
(1,165)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HB3	1	0.42
(1,165)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HB3	5	0.42
(1,156)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HB2	10	0.42
(1,81)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HA	8	0.42
(1,57)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HD1	7	0.42
(1,57)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HD2	7	0.42
(1,37)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HG2	1	0.42
(1,21)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HB2	1	0.42
(4,24)	1:24:A:PRO:HG3	1:25:A:SER:H	3	0.41
(3,14)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	2	0.41
(3,13)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD2	5	0.41
(2,151)	1:24:A:PRO:HG3	1:25:A:SER:H	3	0.41
(2,17)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	2	0.41
(2,16)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD2	5	0.41
(1,215)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HE2	8	0.41
(1,215)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HE2	8	0.41
(1,215)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HE2	8	0.41
(1,213)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB2	8	0.41
(1,213)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB2	8	0.41
(1,213)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB2	8	0.41
(1,213)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB3	8	0.41
(1,213)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB3	8	0.41
(1,213)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB3	8	0.41
(1,209)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD21	1	0.41
(1,209)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD22	1	0.41
(1,209)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD23	1	0.41
(1,106)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HB2	1	0.41
(1,104)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HG2	5	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,91)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG11	5	0.41
(1,91)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG12	5	0.41
(1,91)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG13	5	0.41
(1,91)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	5	0.41
(1,91)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	5	0.41
(1,91)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	5	0.41
(1,78)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HB3	8	0.41
(1,57)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HD1	6	0.41
(1,57)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HD2	6	0.41
(1,57)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HD1	8	0.41
(1,57)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HD2	8	0.41
(1,56)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HD1	2	0.41
(1,56)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HD2	2	0.41
(4,37)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD21	2	0.4
(4,37)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD22	2	0.4
(4,37)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD23	2	0.4
(4,37)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD21	7	0.4
(4,37)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD22	7	0.4
(4,37)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD23	7	0.4
(4,31)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG11	3	0.4
(4,31)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG12	3	0.4
(4,31)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG13	3	0.4
(4,31)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG21	3	0.4
(4,31)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG22	3	0.4
(4,31)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG23	3	0.4
(4,24)	1:24:A:PRO:HG3	1:25:A:SER:H	5	0.4
(4,17)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG12	2	0.4
(4,17)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG12	2	0.4
(4,16)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	9	0.4
(4,16)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	9	0.4
(4,16)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	9	0.4
(4,16)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	9	0.4
(4,16)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	9	0.4
(4,16)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	9	0.4
(4,15)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	3	0.4
(4,15)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	3	0.4
(4,15)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	3	0.4
(4,15)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	3	0.4
(4,15)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	3	0.4
(4,15)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	3	0.4
(4,15)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE1	3	0.4
(4,15)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE2	3	0.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,15)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE1	3	0.4
(4,15)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE2	3	0.4
(4,15)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE1	3	0.4
(4,15)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE2	3	0.4
(4,13)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HG	9	0.4
(4,6)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG2	7	0.4
(2,205)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD21	2	0.4
(2,205)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD22	2	0.4
(2,205)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD23	2	0.4
(2,205)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD21	7	0.4
(2,205)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD22	7	0.4
(2,205)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD23	7	0.4
(2,190)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG11	3	0.4
(2,190)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG12	3	0.4
(2,190)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG13	3	0.4
(2,190)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG21	3	0.4
(2,190)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG22	3	0.4
(2,190)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG23	3	0.4
(2,151)	1:24:A:PRO:HG3	1:25:A:SER:H	5	0.4
(2,138)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG12	2	0.4
(2,138)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG12	2	0.4
(2,127)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	9	0.4
(2,127)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	9	0.4
(2,127)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	9	0.4
(2,127)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	9	0.4
(2,127)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	9	0.4
(2,127)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	9	0.4
(2,123)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	3	0.4
(2,123)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	3	0.4
(2,123)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	3	0.4
(2,123)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	3	0.4
(2,123)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	3	0.4
(2,123)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	3	0.4
(2,123)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE1	3	0.4
(2,123)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE2	3	0.4
(2,123)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE1	3	0.4
(2,123)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE2	3	0.4
(2,123)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE1	3	0.4
(2,123)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE2	3	0.4
(2,112)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HG	9	0.4
(2,32)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG2	7	0.4
(1,203)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB2	8	0.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,203)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB2	8	0.4
(1,203)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB2	8	0.4
(1,203)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB3	8	0.4
(1,203)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB3	8	0.4
(1,203)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB3	8	0.4
(1,165)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HB3	6	0.4
(1,127)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	10	0.4
(1,127)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	10	0.4
(1,127)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	10	0.4
(1,127)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	10	0.4
(1,127)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	10	0.4
(1,127)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	10	0.4
(1,55)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HD1	9	0.4
(1,55)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HD2	9	0.4
(1,37)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HG2	8	0.4
(4,33)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HA	9	0.39
(4,33)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HA	9	0.39
(4,33)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HA	9	0.39
(4,23)	1:11:A:TRP:HD1	1:23:A:PRO:HA	5	0.39
(4,20)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG2	6	0.39
(4,20)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG2	6	0.39
(4,17)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG12	4	0.39
(4,17)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG12	4	0.39
(4,17)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG12	5	0.39
(4,17)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG12	5	0.39
(4,6)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG2	1	0.39
(4,6)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG2	6	0.39
(4,3)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG2	5	0.39
(4,3)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG3	5	0.39
(4,2)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD2	6	0.39
(3,110)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD11	8	0.39
(3,110)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD12	8	0.39
(3,110)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD13	8	0.39
(3,110)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD11	8	0.39
(3,110)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD12	8	0.39
(3,110)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD13	8	0.39
(3,14)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	10	0.39
(2,193)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HA	9	0.39
(2,193)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HA	9	0.39
(2,193)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HA	9	0.39
(2,149)	1:11:A:TRP:HD1	1:23:A:PRO:HA	5	0.39
(2,144)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG2	6	0.39

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,144)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG2	6	0.39
(2,138)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG12	4	0.39
(2,138)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG12	4	0.39
(2,138)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG12	5	0.39
(2,138)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG12	5	0.39
(2,125)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD11	8	0.39
(2,125)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD12	8	0.39
(2,125)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD13	8	0.39
(2,125)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD11	8	0.39
(2,125)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD12	8	0.39
(2,125)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD13	8	0.39
(2,32)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG2	1	0.39
(2,32)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG2	6	0.39
(2,17)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	10	0.39
(2,14)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG2	5	0.39
(2,14)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG3	5	0.39
(2,7)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD2	6	0.39
(1,170)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HD2	3	0.39
(1,100)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HG2	5	0.39
(1,100)	1:21:A:ARG:HD3	1:21:A:ARG:HG2	5	0.39
(1,93)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	6	0.39
(1,93)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	6	0.39
(1,93)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	6	0.39
(1,56)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HD1	3	0.39
(1,56)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HD2	3	0.39
(1,56)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HD1	7	0.39
(1,56)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HD2	7	0.39
(4,31)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG11	8	0.38
(4,31)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG12	8	0.38
(4,31)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG13	8	0.38
(4,31)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG21	8	0.38
(4,31)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG22	8	0.38
(4,31)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG23	8	0.38
(4,29)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	1	0.38
(4,29)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	1	0.38
(4,29)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	1	0.38
(4,29)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB1	1	0.38
(4,29)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB2	1	0.38
(4,29)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB3	1	0.38
(4,28)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	6	0.38
(4,28)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	6	0.38
(4,28)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	6	0.38

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,28)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB1	6	0.38
(4,28)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB2	6	0.38
(4,28)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB3	6	0.38
(4,26)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	1	0.38
(4,26)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB3	1	0.38
(4,20)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG2	7	0.38
(4,20)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG2	7	0.38
(4,6)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG2	10	0.38
(3,123)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG13	8	0.38
(3,123)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG13	8	0.38
(3,61)	1:13:A:LYS:HE2	1:13:A:LYS:HG3	3	0.38
(2,190)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG11	8	0.38
(2,190)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG12	8	0.38
(2,190)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG13	8	0.38
(2,190)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG21	8	0.38
(2,190)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG22	8	0.38
(2,190)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG23	8	0.38
(2,180)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	1	0.38
(2,180)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	1	0.38
(2,180)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	1	0.38
(2,180)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB1	1	0.38
(2,180)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB2	1	0.38
(2,180)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB3	1	0.38
(2,178)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	6	0.38
(2,178)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	6	0.38
(2,178)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	6	0.38
(2,178)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB1	6	0.38
(2,178)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB2	6	0.38
(2,178)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB3	6	0.38
(2,162)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	1	0.38
(2,162)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB3	1	0.38
(2,144)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG2	7	0.38
(2,144)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG2	7	0.38
(2,140)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG13	8	0.38
(2,140)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG13	8	0.38
(2,70)	1:13:A:LYS:HE2	1:13:A:LYS:HG3	3	0.38
(2,32)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG2	10	0.38
(1,180)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	7	0.38
(1,180)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	7	0.38
(1,180)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	7	0.38
(1,180)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB1	7	0.38
(1,180)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB2	7	0.38

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,180)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB3	7	0.38
(1,106)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HB2	8	0.38
(1,91)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG11	2	0.38
(1,91)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG12	2	0.38
(1,91)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG13	2	0.38
(1,91)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	2	0.38
(1,91)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	2	0.38
(1,91)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	2	0.38
(1,65)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HG2	5	0.38
(1,39)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HE1	5	0.38
(1,39)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HE1	8	0.38
(1,37)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HG2	5	0.38
(1,21)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HB2	6	0.38
(4,37)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD21	8	0.37
(4,37)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD22	8	0.37
(4,37)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD23	8	0.37
(4,35)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD21	10	0.37
(4,35)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD22	10	0.37
(4,35)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD23	10	0.37
(4,35)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD21	10	0.37
(4,35)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD22	10	0.37
(4,35)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD23	10	0.37
(4,31)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG11	1	0.37
(4,31)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG12	1	0.37
(4,31)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG13	1	0.37
(4,31)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG21	1	0.37
(4,31)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG22	1	0.37
(4,31)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG23	1	0.37
(3,156)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG13	1	0.37
(3,156)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG13	1	0.37
(3,156)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG13	1	0.37
(3,156)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG13	1	0.37
(3,156)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG13	1	0.37
(3,156)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG13	1	0.37
(3,67)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG2	7	0.37
(3,67)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG3	7	0.37
(3,67)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG2	10	0.37
(3,67)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG3	10	0.37
(2,205)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD21	8	0.37
(2,205)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD22	8	0.37
(2,205)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD23	8	0.37
(2,200)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD21	10	0.37

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,200)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD22	10	0.37
(2,200)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD23	10	0.37
(2,200)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD21	10	0.37
(2,200)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD22	10	0.37
(2,200)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD23	10	0.37
(2,190)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG11	1	0.37
(2,190)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG12	1	0.37
(2,190)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG13	1	0.37
(2,190)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG21	1	0.37
(2,190)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG22	1	0.37
(2,190)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG23	1	0.37
(2,185)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG13	1	0.37
(2,185)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG13	1	0.37
(2,185)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG13	1	0.37
(2,185)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG13	1	0.37
(2,185)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG13	1	0.37
(2,185)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG13	1	0.37
(2,76)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG2	7	0.37
(2,76)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG3	7	0.37
(2,76)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG2	10	0.37
(2,76)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG3	10	0.37
(1,208)	1:12:A:LEU:HD21	1:13:A:LYS:HG2	7	0.37
(1,208)	1:12:A:LEU:HD22	1:13:A:LYS:HG2	7	0.37
(1,208)	1:12:A:LEU:HD23	1:13:A:LYS:HG2	7	0.37
(1,189)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	7	0.37
(1,189)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	7	0.37
(1,189)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	7	0.37
(1,189)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HB2	7	0.37
(1,189)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HB2	7	0.37
(1,189)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HB2	7	0.37
(1,165)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HB3	10	0.37
(1,91)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG11	6	0.37
(1,91)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG12	6	0.37
(1,91)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG13	6	0.37
(1,91)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	6	0.37
(1,91)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	6	0.37
(1,91)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	6	0.37
(1,78)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HB3	7	0.37
(1,63)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HB2	9	0.37
(1,63)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HB3	9	0.37
(1,57)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HD1	2	0.37
(1,57)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HD2	2	0.37

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,37)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HG2	7	0.37
(1,4)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD2	8	0.37
(1,4)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD2	9	0.37
(1,4)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD2	10	0.37
(4,39)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG21	9	0.36
(4,39)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG22	9	0.36
(4,39)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG23	9	0.36
(4,39)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG21	9	0.36
(4,39)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG22	9	0.36
(4,39)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG23	9	0.36
(4,39)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG21	9	0.36
(4,39)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG22	9	0.36
(4,39)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG23	9	0.36
(4,39)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG21	9	0.36
(4,39)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG22	9	0.36
(4,39)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG23	9	0.36
(4,39)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG21	9	0.36
(4,39)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG22	9	0.36
(4,39)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG23	9	0.36
(4,39)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG21	9	0.36
(4,39)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG22	9	0.36
(4,39)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG23	9	0.36
(4,37)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD21	9	0.36
(4,37)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD22	9	0.36
(4,37)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD23	9	0.36
(4,37)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD21	10	0.36
(4,37)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD22	10	0.36
(4,37)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD23	10	0.36
(4,29)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	5	0.36
(4,29)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	5	0.36
(4,29)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	5	0.36
(4,29)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB1	5	0.36
(4,29)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB2	5	0.36
(4,29)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB3	5	0.36
(4,29)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	6	0.36
(4,29)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	6	0.36
(4,29)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	6	0.36
(4,29)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB1	6	0.36
(4,29)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB2	6	0.36
(4,29)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB3	6	0.36
(4,20)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG2	1	0.36
(4,20)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG2	1	0.36

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,13)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HG	1	0.36
(4,9)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD11	9	0.36
(4,9)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD12	9	0.36
(4,9)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD13	9	0.36
(4,6)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG2	2	0.36
(3,130)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HG3	1	0.36
(3,67)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG2	5	0.36
(3,67)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG3	5	0.36
(3,56)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HG2	3	0.36
(2,210)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG21	9	0.36
(2,210)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG22	9	0.36
(2,210)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG23	9	0.36
(2,210)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG21	9	0.36
(2,210)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG22	9	0.36
(2,210)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG23	9	0.36
(2,210)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG21	9	0.36
(2,210)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG22	9	0.36
(2,210)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG23	9	0.36
(2,210)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG21	9	0.36
(2,210)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG22	9	0.36
(2,210)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG23	9	0.36
(2,210)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG21	9	0.36
(2,210)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG22	9	0.36
(2,210)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG23	9	0.36
(2,210)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG21	9	0.36
(2,210)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG22	9	0.36
(2,210)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG23	9	0.36
(2,205)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD21	9	0.36
(2,205)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD22	9	0.36
(2,205)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD23	9	0.36
(2,205)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD21	10	0.36
(2,205)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD22	10	0.36
(2,205)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD23	10	0.36
(2,180)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	5	0.36
(2,180)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	5	0.36
(2,180)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	5	0.36
(2,180)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB1	5	0.36
(2,180)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB2	5	0.36
(2,180)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB3	5	0.36
(2,180)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	6	0.36
(2,180)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	6	0.36
(2,180)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	6	0.36

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,180)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB1	6	0.36
(2,180)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB2	6	0.36
(2,180)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB3	6	0.36
(2,154)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HG3	1	0.36
(2,144)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG2	1	0.36
(2,144)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG2	1	0.36
(2,112)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HG	1	0.36
(2,76)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG2	5	0.36
(2,76)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG3	5	0.36
(2,65)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HG2	3	0.36
(2,61)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD11	9	0.36
(2,61)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD12	9	0.36
(2,61)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD13	9	0.36
(2,32)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG2	2	0.36
(1,165)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HB3	3	0.36
(1,129)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD11	5	0.36
(1,129)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD12	5	0.36
(1,129)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD13	5	0.36
(1,111)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	3	0.36
(1,111)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	3	0.36
(1,111)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	3	0.36
(1,111)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	9	0.36
(1,111)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	9	0.36
(1,111)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	9	0.36
(1,110)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	1	0.36
(1,110)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	1	0.36
(1,110)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	1	0.36
(1,100)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HG2	8	0.36
(1,100)	1:21:A:ARG:HD3	1:21:A:ARG:HG2	8	0.36
(1,100)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HG2	10	0.36
(1,100)	1:21:A:ARG:HD3	1:21:A:ARG:HG2	10	0.36
(1,92)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	8	0.36
(1,92)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	8	0.36
(1,91)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG11	4	0.36
(1,91)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG12	4	0.36
(1,91)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG13	4	0.36
(1,91)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	4	0.36
(1,91)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	4	0.36
(1,91)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	4	0.36
(1,87)	1:18:A:SER:HA	1:18:A:SER:HB2	9	0.36
(1,87)	1:18:A:SER:HA	1:18:A:SER:HB3	9	0.36
(1,57)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HD1	10	0.36

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,57)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HD2	10	0.36
(1,56)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HD1	5	0.36
(1,56)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HD2	5	0.36
(1,39)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HE1	1	0.36
(1,39)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HE1	2	0.36
(1,39)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HE1	4	0.36
(1,39)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HE1	10	0.36
(1,27)	1:23:A:PRO:HD3	1:23:A:PRO:HG3	1	0.36
(4,32)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HA	2	0.35
(4,32)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HA	2	0.35
(4,32)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HA	2	0.35
(4,28)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	8	0.35
(4,28)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	8	0.35
(4,28)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	8	0.35
(4,28)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB1	8	0.35
(4,28)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB2	8	0.35
(4,28)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB3	8	0.35
(4,23)	1:11:A:TRP:HD1	1:23:A:PRO:HA	8	0.35
(4,17)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG12	7	0.35
(4,17)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG12	7	0.35
(4,16)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	3	0.35
(4,16)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	3	0.35
(4,16)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	3	0.35
(4,16)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	3	0.35
(4,16)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	3	0.35
(4,16)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	3	0.35
(3,75)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD2	7	0.35
(3,13)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD2	10	0.35
(3,2)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD3	7	0.35
(2,192)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HA	2	0.35
(2,192)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HA	2	0.35
(2,192)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HA	2	0.35
(2,178)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	8	0.35
(2,178)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	8	0.35
(2,178)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	8	0.35
(2,178)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB1	8	0.35
(2,178)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB2	8	0.35
(2,178)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB3	8	0.35
(2,149)	1:11:A:TRP:HD1	1:23:A:PRO:HA	8	0.35
(2,138)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG12	7	0.35
(2,138)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG12	7	0.35
(2,127)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	3	0.35

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,127)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	3	0.35
(2,127)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	3	0.35
(2,127)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	3	0.35
(2,127)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	3	0.35
(2,127)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	3	0.35
(2,84)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD2	7	0.35
(2,16)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD2	10	0.35
(2,2)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD3	7	0.35
(1,209)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD21	10	0.35
(1,209)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD22	10	0.35
(1,209)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD23	10	0.35
(1,180)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	9	0.35
(1,180)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	9	0.35
(1,180)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	9	0.35
(1,180)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB1	9	0.35
(1,180)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB2	9	0.35
(1,180)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB3	9	0.35
(1,174)	1:6:A:ARG:HD2	1:10:A:GLN:HB3	4	0.35
(1,174)	1:6:A:ARG:HD3	1:10:A:GLN:HB3	4	0.35
(1,156)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HB2	2	0.35
(1,156)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HB2	4	0.35
(1,136)	1:8:A:TYR:HD1	1:23:A:PRO:HB3	8	0.35
(1,136)	1:8:A:TYR:HD2	1:23:A:PRO:HB3	8	0.35
(1,110)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	3	0.35
(1,110)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	3	0.35
(1,110)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	3	0.35
(1,104)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HG2	9	0.35
(1,100)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HG2	9	0.35
(1,100)	1:21:A:ARG:HD3	1:21:A:ARG:HG2	9	0.35
(1,87)	1:18:A:SER:HA	1:18:A:SER:HB2	4	0.35
(1,87)	1:18:A:SER:HA	1:18:A:SER:HB3	4	0.35
(1,39)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HE1	3	0.35
(1,39)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HE1	6	0.35
(1,39)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HE1	9	0.35
(1,38)	1:25:A:SER:HA	1:25:A:SER:HB2	10	0.35
(1,38)	1:25:A:SER:HA	1:25:A:SER:HB3	10	0.35
(1,37)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HG2	3	0.35
(1,37)	1:24:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HG2	9	0.35
(1,27)	1:23:A:PRO:HD3	1:23:A:PRO:HG3	7	0.35
(1,21)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HB2	2	0.35
(4,31)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG11	10	0.34
(4,31)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG12	10	0.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,31)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG13	10	0.34
(4,31)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG21	10	0.34
(4,31)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG22	10	0.34
(4,31)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG23	10	0.34
(4,28)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	5	0.34
(4,28)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	5	0.34
(4,28)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	5	0.34
(4,28)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB1	5	0.34
(4,28)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB2	5	0.34
(4,28)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB3	5	0.34
(4,24)	1:24:A:PRO:HG3	1:25:A:SER:H	9	0.34
(4,15)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	6	0.34
(4,15)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	6	0.34
(4,15)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	6	0.34
(4,15)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	6	0.34
(4,15)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	6	0.34
(4,15)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	6	0.34
(4,15)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE1	6	0.34
(4,15)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE2	6	0.34
(4,15)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE1	6	0.34
(4,15)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE2	6	0.34
(4,15)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE1	6	0.34
(4,15)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE2	6	0.34
(2,190)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG11	10	0.34
(2,190)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG12	10	0.34
(2,190)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG13	10	0.34
(2,190)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG21	10	0.34
(2,190)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG22	10	0.34
(2,190)	1:4:A:ALA:HA	1:5:A:VAL:HG23	10	0.34
(2,178)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	5	0.34
(2,178)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	5	0.34
(2,178)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	5	0.34
(2,178)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB1	5	0.34
(2,178)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB2	5	0.34
(2,178)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB3	5	0.34
(2,151)	1:24:A:PRO:HG3	1:25:A:SER:H	9	0.34
(2,123)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	6	0.34
(2,123)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	6	0.34
(2,123)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	6	0.34
(2,123)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	6	0.34
(2,123)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	6	0.34
(2,123)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	6	0.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,123)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE1	6	0.34
(2,123)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE2	6	0.34
(2,123)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE1	6	0.34
(2,123)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE2	6	0.34
(2,123)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE1	6	0.34
(2,123)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE2	6	0.34
(1,185)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG13	5	0.34
(1,185)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG13	5	0.34
(1,185)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG13	5	0.34
(1,185)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG13	5	0.34
(1,185)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG13	5	0.34
(1,185)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG13	5	0.34
(1,184)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG11	3	0.34
(1,184)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG12	3	0.34
(1,184)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG13	3	0.34
(1,184)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG11	3	0.34
(1,184)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG12	3	0.34
(1,184)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG13	3	0.34
(1,184)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG11	3	0.34
(1,184)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG12	3	0.34
(1,184)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG13	3	0.34
(1,184)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	3	0.34
(1,184)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	3	0.34
(1,184)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	3	0.34
(1,184)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	3	0.34
(1,184)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	3	0.34
(1,184)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	3	0.34
(1,184)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	3	0.34
(1,184)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	3	0.34
(1,184)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	3	0.34
(1,178)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	2	0.34
(1,178)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	2	0.34
(1,178)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	2	0.34
(1,178)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB1	2	0.34
(1,178)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB2	2	0.34
(1,178)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB3	2	0.34
(1,161)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	2	0.34
(1,146)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HA	5	0.34
(1,146)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HA	5	0.34
(1,136)	1:8:A:TYR:HD1	1:23:A:PRO:HB3	1	0.34
(1,136)	1:8:A:TYR:HD2	1:23:A:PRO:HB3	1	0.34
(1,83)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG2	2	0.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,83)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG2	3	0.34
(1,83)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG2	10	0.34
(1,78)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HB3	10	0.34
(1,56)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HD1	4	0.34
(1,56)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HD2	4	0.34
(1,39)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HE1	7	0.34
(1,27)	1:23:A:PRO:HD3	1:23:A:PRO:HG3	3	0.34
(1,27)	1:23:A:PRO:HD3	1:23:A:PRO:HG3	5	0.34
(1,27)	1:23:A:PRO:HD3	1:23:A:PRO:HG3	6	0.34
(1,27)	1:23:A:PRO:HD3	1:23:A:PRO:HG3	8	0.34
(1,27)	1:23:A:PRO:HD3	1:23:A:PRO:HG3	9	0.34
(1,21)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HB2	4	0.34
(1,4)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD2	5	0.34
(4,37)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD21	1	0.33
(4,37)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD22	1	0.33
(4,37)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD23	1	0.33
(4,29)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	8	0.33
(4,29)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	8	0.33
(4,29)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	8	0.33
(4,29)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB1	8	0.33
(4,29)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB2	8	0.33
(4,29)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB3	8	0.33
(4,26)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	6	0.33
(4,26)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB3	6	0.33
(4,23)	1:11:A:TRP:HD1	1:23:A:PRO:HA	6	0.33
(4,20)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG2	8	0.33
(4,20)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG2	8	0.33
(3,180)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG21	6	0.33
(3,180)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG22	6	0.33
(3,180)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG23	6	0.33
(3,119)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HG12	3	0.33
(3,119)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HG12	3	0.33
(3,87)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD2	6	0.33
(3,87)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD3	6	0.33
(2,219)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG21	6	0.33
(2,219)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG22	6	0.33
(2,219)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG23	6	0.33
(2,205)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD21	1	0.33
(2,205)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD22	1	0.33
(2,205)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD23	1	0.33
(2,180)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	8	0.33
(2,180)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	8	0.33

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,180)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	8	0.33
(2,180)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB1	8	0.33
(2,180)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB2	8	0.33
(2,180)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB3	8	0.33
(2,162)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	6	0.33
(2,162)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB3	6	0.33
(2,149)	1:11:A:TRP:HD1	1:23:A:PRO:HA	6	0.33
(2,144)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG2	8	0.33
(2,144)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG2	8	0.33
(2,135)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HG12	3	0.33
(2,135)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HG12	3	0.33
(2,98)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD2	6	0.33
(2,98)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD3	6	0.33
(1,209)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD21	6	0.33
(1,209)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD22	6	0.33
(1,209)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD23	6	0.33
(1,170)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HD2	9	0.33
(1,161)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	10	0.33
(1,146)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HA	8	0.33
(1,146)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HA	8	0.33
(1,132)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD21	9	0.33
(1,132)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD22	9	0.33
(1,132)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD23	9	0.33
(1,109)	1:14:A:GLU:HB3	1:14:A:GLU:HG2	7	0.33
(1,100)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HG2	3	0.33
(1,100)	1:21:A:ARG:HD3	1:21:A:ARG:HG2	3	0.33
(1,100)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HG2	7	0.33
(1,100)	1:21:A:ARG:HD3	1:21:A:ARG:HG2	7	0.33
(1,70)	1:13:A:LYS:HE2	1:13:A:LYS:HG3	8	0.33
(1,27)	1:23:A:PRO:HD3	1:23:A:PRO:HG3	2	0.33
(1,27)	1:23:A:PRO:HD3	1:23:A:PRO:HG3	10	0.33
(1,20)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG3	5	0.33
(4,32)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HA	7	0.32
(4,32)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HA	7	0.32
(4,32)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HA	7	0.32
(4,28)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	1	0.32
(4,28)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	1	0.32
(4,28)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	1	0.32
(4,28)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB1	1	0.32
(4,28)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB2	1	0.32
(4,28)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB3	1	0.32
(4,26)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	5	0.32

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,26)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB3	5	0.32
(4,20)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG2	3	0.32
(4,20)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG2	3	0.32
(4,20)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG2	9	0.32
(4,20)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG2	9	0.32
(4,3)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG2	9	0.32
(4,3)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG3	9	0.32
(4,3)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG2	10	0.32
(4,3)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG3	10	0.32
(3,111)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD21	10	0.32
(3,111)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD22	10	0.32
(3,111)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD23	10	0.32
(3,111)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD21	10	0.32
(3,111)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD22	10	0.32
(3,111)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD23	10	0.32
(3,75)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD2	4	0.32
(3,75)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD2	9	0.32
(2,192)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HA	7	0.32
(2,192)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HA	7	0.32
(2,192)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HA	7	0.32
(2,178)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB1	1	0.32
(2,178)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB2	1	0.32
(2,178)	1:3:A:GLU:HG2	1:4:A:ALA:HB3	1	0.32
(2,178)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB1	1	0.32
(2,178)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB2	1	0.32
(2,178)	1:3:A:GLU:HG3	1:4:A:ALA:HB3	1	0.32
(2,162)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	5	0.32
(2,162)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB3	5	0.32
(2,144)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG2	3	0.32
(2,144)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG2	3	0.32
(2,144)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG2	9	0.32
(2,144)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG2	9	0.32
(2,126)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD21	10	0.32
(2,126)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD22	10	0.32
(2,126)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD23	10	0.32
(2,126)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD21	10	0.32
(2,126)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD22	10	0.32
(2,126)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD23	10	0.32
(2,84)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD2	4	0.32
(2,84)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD2	9	0.32
(2,14)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG2	9	0.32
(2,14)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG3	9	0.32

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,14)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG2	10	0.32
(2,14)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG3	10	0.32
(1,185)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG13	4	0.32
(1,185)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG13	4	0.32
(1,185)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG13	4	0.32
(1,185)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG13	4	0.32
(1,185)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG13	4	0.32
(1,185)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG13	4	0.32
(1,174)	1:6:A:ARG:HD2	1:10:A:GLN:HB3	6	0.32
(1,174)	1:6:A:ARG:HD3	1:10:A:GLN:HB3	6	0.32
(1,129)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD11	8	0.32
(1,129)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD12	8	0.32
(1,129)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD13	8	0.32
(1,109)	1:14:A:GLU:HB3	1:14:A:GLU:HG2	1	0.32
(1,109)	1:14:A:GLU:HB3	1:14:A:GLU:HG2	9	0.32
(1,106)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HB2	7	0.32
(1,105)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HG3	1	0.32
(1,105)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HG3	8	0.32
(1,92)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	9	0.32
(1,92)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	9	0.32
(1,91)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG11	8	0.32
(1,91)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG12	8	0.32
(1,91)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG13	8	0.32
(1,91)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	8	0.32
(1,91)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	8	0.32
(1,91)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	8	0.32
(1,83)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG2	8	0.32
(1,43)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB2	7	0.32
(1,20)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG3	3	0.32
(1,20)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG3	8	0.32
(1,20)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG3	9	0.32
(1,15)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HB2	10	0.32
(1,4)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD2	1	0.32
(4,37)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD21	3	0.31
(4,37)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD22	3	0.31
(4,37)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD23	3	0.31
(4,33)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HA	3	0.31
(4,33)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HA	3	0.31
(4,33)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HA	3	0.31
(4,21)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HA	6	0.31
(4,21)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HA	6	0.31
(4,2)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD2	1	0.31

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,2)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD2	2	0.31
(3,75)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD2	1	0.31
(3,20)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	6	0.31
(2,205)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD21	3	0.31
(2,205)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD22	3	0.31
(2,205)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD23	3	0.31
(2,193)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HA	3	0.31
(2,193)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HA	3	0.31
(2,193)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HA	3	0.31
(2,146)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HA	6	0.31
(2,146)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HA	6	0.31
(2,84)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD2	1	0.31
(2,24)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	6	0.31
(2,7)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD2	1	0.31
(2,7)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD2	2	0.31
(1,146)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HA	9	0.31
(1,146)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HA	9	0.31
(1,111)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	1	0.31
(1,111)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	1	0.31
(1,111)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	1	0.31
(1,111)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	2	0.31
(1,111)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	2	0.31
(1,111)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	2	0.31
(1,109)	1:14:A:GLU:HB3	1:14:A:GLU:HG2	6	0.31
(1,92)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	10	0.31
(1,92)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	10	0.31
(1,27)	1:23:A:PRO:HD3	1:23:A:PRO:HG3	4	0.31
(1,20)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG3	10	0.31
(1,15)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HB2	2	0.31
(1,13)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HB3	1	0.31
(1,13)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HB3	2	0.31
(1,13)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HB3	4	0.31
(1,13)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HB3	5	0.31
(1,13)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HB3	9	0.31
(1,13)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HB3	10	0.31
(4,15)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	7	0.3
(4,15)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	7	0.3
(4,15)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	7	0.3
(4,15)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	7	0.3
(4,15)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	7	0.3
(4,15)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	7	0.3
(4,15)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE1	7	0.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,15)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE2	7	0.3
(4,15)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE1	7	0.3
(4,15)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE2	7	0.3
(4,15)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE1	7	0.3
(4,15)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE2	7	0.3
(4,13)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HG	3	0.3
(4,6)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG2	4	0.3
(4,2)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD2	4	0.3
(4,2)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD2	5	0.3
(3,67)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG2	8	0.3
(3,67)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG3	8	0.3
(3,20)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	2	0.3
(3,13)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD2	2	0.3
(2,123)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	7	0.3
(2,123)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	7	0.3
(2,123)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	7	0.3
(2,123)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	7	0.3
(2,123)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	7	0.3
(2,123)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	7	0.3
(2,123)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE1	7	0.3
(2,123)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE2	7	0.3
(2,123)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE1	7	0.3
(2,123)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE2	7	0.3
(2,123)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE1	7	0.3
(2,123)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE2	7	0.3
(2,112)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HG	3	0.3
(2,76)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG2	8	0.3
(2,76)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG3	8	0.3
(2,32)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG2	4	0.3
(2,24)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	2	0.3
(2,16)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD2	2	0.3
(2,7)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD2	4	0.3
(2,7)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD2	5	0.3
(1,212)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG21	4	0.3
(1,212)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG22	4	0.3
(1,212)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG23	4	0.3
(1,182)	1:6:A:ARG:HG2	1:7:A:LEU:HB2	4	0.3
(1,110)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	2	0.3
(1,110)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	2	0.3
(1,110)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	2	0.3
(1,110)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	10	0.3
(1,110)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	10	0.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,110)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	10	0.3
(1,106)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HB2	6	0.3
(1,100)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HG2	1	0.3
(1,100)	1:21:A:ARG:HD3	1:21:A:ARG:HG2	1	0.3
(1,99)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD2	5	0.3
(1,99)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD3	5	0.3
(1,20)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG3	6	0.3
(1,20)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG3	7	0.3
(1,16)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD2	7	0.3
(1,15)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HB2	6	0.3
(1,13)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HB3	3	0.3
(1,13)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HB3	8	0.3
(1,4)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD2	2	0.3
(1,4)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD2	4	0.3
(4,39)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG21	10	0.29
(4,39)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG22	10	0.29
(4,39)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG23	10	0.29
(4,39)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG21	10	0.29
(4,39)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG22	10	0.29
(4,39)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG23	10	0.29
(4,39)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG21	10	0.29
(4,39)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG22	10	0.29
(4,39)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG23	10	0.29
(4,39)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG21	10	0.29
(4,39)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG22	10	0.29
(4,39)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG23	10	0.29
(4,39)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG21	10	0.29
(4,39)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG22	10	0.29
(4,39)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG23	10	0.29
(4,39)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG21	10	0.29
(4,39)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG22	10	0.29
(4,39)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG23	10	0.29
(4,19)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG2	10	0.29
(4,19)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG2	10	0.29
(4,2)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD2	8	0.29
(4,2)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD2	9	0.29
(4,2)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD2	10	0.29
(3,131)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG13	3	0.29
(3,75)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD2	5	0.29
(3,20)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	1	0.29
(3,20)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	4	0.29
(3,10)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG2	3	0.29

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,10)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG3	3	0.29
(2,210)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG21	10	0.29
(2,210)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG22	10	0.29
(2,210)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG23	10	0.29
(2,210)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG21	10	0.29
(2,210)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG22	10	0.29
(2,210)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG23	10	0.29
(2,210)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG21	10	0.29
(2,210)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG22	10	0.29
(2,210)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG23	10	0.29
(2,210)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG21	10	0.29
(2,210)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG22	10	0.29
(2,210)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG23	10	0.29
(2,210)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG21	10	0.29
(2,210)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG22	10	0.29
(2,210)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG23	10	0.29
(2,210)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG21	10	0.29
(2,210)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG22	10	0.29
(2,210)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG23	10	0.29
(2,155)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG13	3	0.29
(2,143)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG2	10	0.29
(2,143)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG2	10	0.29
(2,84)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD2	5	0.29
(2,24)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	1	0.29
(2,24)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	4	0.29
(2,12)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG2	3	0.29
(2,12)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG3	3	0.29
(2,7)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD2	8	0.29
(2,7)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD2	9	0.29
(2,7)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD2	10	0.29
(1,212)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG21	10	0.29
(1,212)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG22	10	0.29
(1,212)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG23	10	0.29
(1,161)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	7	0.29
(1,110)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	9	0.29
(1,110)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	9	0.29
(1,110)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	9	0.29
(1,109)	1:14:A:GLU:HB3	1:14:A:GLU:HG2	2	0.29
(1,109)	1:14:A:GLU:HB3	1:14:A:GLU:HG2	3	0.29
(1,109)	1:14:A:GLU:HB3	1:14:A:GLU:HG2	8	0.29
(1,91)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG11	10	0.29
(1,91)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG12	10	0.29

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,91)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG13	10	0.29
(1,91)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	10	0.29
(1,91)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	10	0.29
(1,91)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	10	0.29
(1,70)	1:13:A:LYS:HE2	1:13:A:LYS:HG3	2	0.29
(1,20)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG3	1	0.29
(1,15)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HB2	4	0.29
(1,15)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HB2	8	0.29
(4,38)	1:12:A:LEU:HD11	1:13:A:LYS:HG2	5	0.28
(4,38)	1:12:A:LEU:HD12	1:13:A:LYS:HG2	5	0.28
(4,38)	1:12:A:LEU:HD13	1:13:A:LYS:HG2	5	0.28
(4,32)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HA	9	0.28
(4,32)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HA	9	0.28
(4,32)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HA	9	0.28
(4,26)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	8	0.28
(4,26)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB3	8	0.28
(3,180)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG21	3	0.28
(3,180)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG22	3	0.28
(3,180)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG23	3	0.28
(3,75)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD2	6	0.28
(3,14)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	4	0.28
(2,219)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG21	3	0.28
(2,219)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG22	3	0.28
(2,219)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG23	3	0.28
(2,207)	1:12:A:LEU:HD11	1:13:A:LYS:HG2	5	0.28
(2,207)	1:12:A:LEU:HD12	1:13:A:LYS:HG2	5	0.28
(2,207)	1:12:A:LEU:HD13	1:13:A:LYS:HG2	5	0.28
(2,192)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HA	9	0.28
(2,192)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HA	9	0.28
(2,192)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HA	9	0.28
(2,162)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	8	0.28
(2,162)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB3	8	0.28
(2,84)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD2	6	0.28
(2,17)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	4	0.28
(1,200)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD21	3	0.28
(1,200)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD22	3	0.28
(1,200)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD23	3	0.28
(1,200)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD21	3	0.28
(1,200)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD22	3	0.28
(1,200)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD23	3	0.28
(1,200)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD21	9	0.28
(1,200)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD22	9	0.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,200)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD23	9	0.28
(1,200)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD21	9	0.28
(1,200)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD22	9	0.28
(1,200)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD23	9	0.28
(1,160)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG2	1	0.28
(1,160)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG3	1	0.28
(1,156)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HB2	7	0.28
(1,132)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD21	3	0.28
(1,132)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD22	3	0.28
(1,132)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD23	3	0.28
(1,109)	1:14:A:GLU:HB3	1:14:A:GLU:HG2	5	0.28
(1,100)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HG2	2	0.28
(1,100)	1:21:A:ARG:HD3	1:21:A:ARG:HG2	2	0.28
(1,100)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HG2	4	0.28
(1,100)	1:21:A:ARG:HD3	1:21:A:ARG:HG2	4	0.28
(1,4)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD2	6	0.28
(1,2)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD3	3	0.28
(4,39)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG21	5	0.27
(4,39)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG22	5	0.27
(4,39)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG23	5	0.27
(4,39)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG21	5	0.27
(4,39)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG22	5	0.27
(4,39)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG23	5	0.27
(4,39)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG21	5	0.27
(4,39)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG22	5	0.27
(4,39)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG23	5	0.27
(4,39)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG21	5	0.27
(4,39)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG22	5	0.27
(4,39)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG23	5	0.27
(4,39)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG21	5	0.27
(4,39)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG22	5	0.27
(4,39)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG23	5	0.27
(4,39)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG21	5	0.27
(4,39)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG22	5	0.27
(4,39)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG23	5	0.27
(4,9)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD11	3	0.27
(4,9)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD12	3	0.27
(4,9)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD13	3	0.27
(4,2)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD2	3	0.27
(3,156)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG13	6	0.27
(3,156)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG13	6	0.27
(3,156)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG13	6	0.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,156)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG13	6	0.27
(3,156)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG13	6	0.27
(3,156)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG13	6	0.27
(3,20)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	7	0.27
(2,210)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG21	5	0.27
(2,210)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG22	5	0.27
(2,210)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG23	5	0.27
(2,210)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG21	5	0.27
(2,210)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG22	5	0.27
(2,210)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG23	5	0.27
(2,210)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG21	5	0.27
(2,210)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG22	5	0.27
(2,210)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG23	5	0.27
(2,210)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG21	5	0.27
(2,210)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG22	5	0.27
(2,210)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG23	5	0.27
(2,210)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG21	5	0.27
(2,210)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG22	5	0.27
(2,210)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG23	5	0.27
(2,210)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG21	5	0.27
(2,210)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG22	5	0.27
(2,210)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG23	5	0.27
(2,185)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG13	6	0.27
(2,185)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG13	6	0.27
(2,185)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG13	6	0.27
(2,185)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG13	6	0.27
(2,185)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG13	6	0.27
(2,185)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG13	6	0.27
(2,61)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD11	3	0.27
(2,61)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD12	3	0.27
(2,61)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD13	3	0.27
(2,24)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	7	0.27
(2,7)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD2	3	0.27
(1,212)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG21	8	0.27
(1,212)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG22	8	0.27
(1,212)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG23	8	0.27
(1,184)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG11	1	0.27
(1,184)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG12	1	0.27
(1,184)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG13	1	0.27
(1,184)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG11	1	0.27
(1,184)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG12	1	0.27
(1,184)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG13	1	0.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,184)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG11	1	0.27
(1,184)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG12	1	0.27
(1,184)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG13	1	0.27
(1,184)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	1	0.27
(1,184)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	1	0.27
(1,184)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	1	0.27
(1,184)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	1	0.27
(1,184)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	1	0.27
(1,184)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	1	0.27
(1,184)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	1	0.27
(1,184)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	1	0.27
(1,184)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	1	0.27
(1,181)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HG3	1	0.27
(1,181)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HG3	1	0.27
(1,181)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HG3	5	0.27
(1,181)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HG3	5	0.27
(1,174)	1:6:A:ARG:HD2	1:10:A:GLN:HB3	2	0.27
(1,174)	1:6:A:ARG:HD3	1:10:A:GLN:HB3	2	0.27
(1,156)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HB2	8	0.27
(1,129)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD11	10	0.27
(1,129)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD12	10	0.27
(1,129)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD13	10	0.27
(1,100)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HG2	6	0.27
(1,100)	1:21:A:ARG:HD3	1:21:A:ARG:HG2	6	0.27
(1,83)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG2	7	0.27
(1,56)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HD1	1	0.27
(1,56)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HD2	1	0.27
(1,51)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	9	0.27
(1,15)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HB2	1	0.27
(1,13)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HB3	7	0.27
(4,39)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG21	2	0.26
(4,39)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG22	2	0.26
(4,39)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG23	2	0.26
(4,39)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG21	2	0.26
(4,39)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG22	2	0.26
(4,39)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG23	2	0.26
(4,39)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG21	2	0.26
(4,39)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG22	2	0.26
(4,39)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG23	2	0.26
(4,39)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG21	2	0.26
(4,39)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG22	2	0.26
(4,39)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG23	2	0.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,39)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG21	2	0.26
(4,39)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG22	2	0.26
(4,39)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG23	2	0.26
(4,39)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG21	2	0.26
(4,39)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG22	2	0.26
(4,39)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG23	2	0.26
(4,34)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:HB2	1	0.26
(4,34)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:HB2	1	0.26
(4,34)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:HB2	1	0.26
(4,10)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	6	0.26
(4,10)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	6	0.26
(3,164)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA3	9	0.26
(3,164)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA3	9	0.26
(3,164)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA3	9	0.26
(3,157)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG11	8	0.26
(3,157)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG12	8	0.26
(3,157)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG13	8	0.26
(3,157)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	8	0.26
(3,157)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	8	0.26
(3,157)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	8	0.26
(3,157)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG11	8	0.26
(3,157)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG12	8	0.26
(3,157)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG13	8	0.26
(3,44)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HD1	5	0.26
(3,44)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HD1	8	0.26
(3,20)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	3	0.26
(3,20)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	9	0.26
(3,20)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	10	0.26
(3,2)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD3	6	0.26
(2,210)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG21	2	0.26
(2,210)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG22	2	0.26
(2,210)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG23	2	0.26
(2,210)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG21	2	0.26
(2,210)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG22	2	0.26
(2,210)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG23	2	0.26
(2,210)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG21	2	0.26
(2,210)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG22	2	0.26
(2,210)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG23	2	0.26
(2,210)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG21	2	0.26
(2,210)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG22	2	0.26
(2,210)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG23	2	0.26
(2,210)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG21	2	0.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,210)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG22	2	0.26
(2,210)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG23	2	0.26
(2,210)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG21	2	0.26
(2,210)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG22	2	0.26
(2,210)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG23	2	0.26
(2,198)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA3	9	0.26
(2,198)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA3	9	0.26
(2,198)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA3	9	0.26
(2,196)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:HB2	1	0.26
(2,196)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:HB2	1	0.26
(2,196)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:HB2	1	0.26
(2,187)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG11	8	0.26
(2,187)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG12	8	0.26
(2,187)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG13	8	0.26
(2,187)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	8	0.26
(2,187)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	8	0.26
(2,187)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	8	0.26
(2,187)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG11	8	0.26
(2,187)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG12	8	0.26
(2,187)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG13	8	0.26
(2,92)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	6	0.26
(2,92)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	6	0.26
(2,50)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HD1	5	0.26
(2,50)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HD1	8	0.26
(2,24)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	3	0.26
(2,24)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	9	0.26
(2,24)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	10	0.26
(2,2)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD3	6	0.26
(1,209)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD21	4	0.26
(1,209)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD22	4	0.26
(1,209)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD23	4	0.26
(1,208)	1:12:A:LEU:HD21	1:13:A:LYS:HG2	8	0.26
(1,208)	1:12:A:LEU:HD22	1:13:A:LYS:HG2	8	0.26
(1,208)	1:12:A:LEU:HD23	1:13:A:LYS:HG2	8	0.26
(1,181)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HG3	9	0.26
(1,181)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HG3	9	0.26
(1,174)	1:6:A:ARG:HD2	1:10:A:GLN:HB3	1	0.26
(1,174)	1:6:A:ARG:HD3	1:10:A:GLN:HB3	1	0.26
(1,165)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HB3	9	0.26
(1,154)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HG3	10	0.26
(1,146)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HA	7	0.26
(1,146)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HA	7	0.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,136)	1:8:A:TYR:HD1	1:23:A:PRO:HB3	10	0.26
(1,136)	1:8:A:TYR:HD2	1:23:A:PRO:HB3	10	0.26
(1,78)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HB3	5	0.26
(4,39)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG21	8	0.25
(4,39)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG22	8	0.25
(4,39)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG23	8	0.25
(4,39)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG21	8	0.25
(4,39)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG22	8	0.25
(4,39)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG23	8	0.25
(4,39)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG21	8	0.25
(4,39)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG22	8	0.25
(4,39)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG23	8	0.25
(4,39)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG21	8	0.25
(4,39)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG22	8	0.25
(4,39)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG23	8	0.25
(4,39)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG21	8	0.25
(4,39)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG22	8	0.25
(4,39)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG23	8	0.25
(4,39)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG21	8	0.25
(4,39)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG22	8	0.25
(4,39)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG23	8	0.25
(4,20)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG2	2	0.25
(4,20)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG2	2	0.25
(3,94)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HG3	2	0.25
(3,44)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HD1	10	0.25
(3,20)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	8	0.25
(2,210)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG21	8	0.25
(2,210)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG22	8	0.25
(2,210)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG23	8	0.25
(2,210)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG21	8	0.25
(2,210)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG22	8	0.25
(2,210)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG23	8	0.25
(2,210)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG21	8	0.25
(2,210)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG22	8	0.25
(2,210)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG23	8	0.25
(2,210)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG21	8	0.25
(2,210)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG22	8	0.25
(2,210)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG23	8	0.25
(2,210)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG21	8	0.25
(2,210)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG22	8	0.25
(2,210)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG23	8	0.25
(2,210)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG21	8	0.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,210)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG22	8	0.25
(2,210)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG23	8	0.25
(2,144)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG2	2	0.25
(2,144)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG2	2	0.25
(2,105)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HG3	2	0.25
(2,50)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HD1	10	0.25
(2,24)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	8	0.25
(1,213)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB2	7	0.25
(1,213)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB2	7	0.25
(1,213)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB2	7	0.25
(1,213)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB3	7	0.25
(1,213)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB3	7	0.25
(1,213)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB3	7	0.25
(1,212)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG21	2	0.25
(1,212)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG22	2	0.25
(1,212)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG23	2	0.25
(1,212)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG21	7	0.25
(1,212)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG22	7	0.25
(1,212)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG23	7	0.25
(1,203)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB2	7	0.25
(1,203)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB2	7	0.25
(1,203)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB2	7	0.25
(1,203)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB3	7	0.25
(1,203)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB3	7	0.25
(1,203)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB3	7	0.25
(1,146)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HA	3	0.25
(1,146)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HA	3	0.25
(1,136)	1:8:A:TYR:HD1	1:23:A:PRO:HB3	9	0.25
(1,136)	1:8:A:TYR:HD2	1:23:A:PRO:HB3	9	0.25
(1,110)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	8	0.25
(1,110)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	8	0.25
(1,110)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	8	0.25
(1,109)	1:14:A:GLU:HB3	1:14:A:GLU:HG2	4	0.25
(1,106)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HB2	2	0.25
(1,83)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG2	1	0.25
(1,83)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG2	4	0.25
(1,83)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG2	9	0.25
(1,70)	1:13:A:LYS:HE2	1:13:A:LYS:HG3	7	0.25
(1,56)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HD1	9	0.25
(1,56)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HD2	9	0.25
(1,36)	1:24:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HG2	3	0.25
(4,39)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG21	4	0.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,39)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG22	4	0.24
(4,39)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG23	4	0.24
(4,39)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG21	4	0.24
(4,39)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG22	4	0.24
(4,39)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG23	4	0.24
(4,39)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG21	4	0.24
(4,39)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG22	4	0.24
(4,39)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG23	4	0.24
(4,39)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG21	4	0.24
(4,39)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG22	4	0.24
(4,39)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG23	4	0.24
(4,39)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG21	4	0.24
(4,39)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG22	4	0.24
(4,39)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG23	4	0.24
(4,39)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG21	4	0.24
(4,39)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG22	4	0.24
(4,39)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG23	4	0.24
(4,34)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:HB2	9	0.24
(4,34)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:HB2	9	0.24
(4,34)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:HB2	9	0.24
(3,170)	1:12:A:LEU:HD21	1:13:A:LYS:HG2	9	0.24
(3,170)	1:12:A:LEU:HD22	1:13:A:LYS:HG2	9	0.24
(3,170)	1:12:A:LEU:HD23	1:13:A:LYS:HG2	9	0.24
(3,156)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG13	3	0.24
(3,156)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG13	3	0.24
(3,156)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG13	3	0.24
(3,156)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG13	3	0.24
(3,156)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG13	3	0.24
(3,156)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG13	3	0.24
(3,37)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB2	1	0.24
(2,210)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG21	4	0.24
(2,210)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG22	4	0.24
(2,210)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG23	4	0.24
(2,210)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG21	4	0.24
(2,210)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG22	4	0.24
(2,210)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG23	4	0.24
(2,210)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG21	4	0.24
(2,210)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG22	4	0.24
(2,210)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG23	4	0.24
(2,210)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG21	4	0.24
(2,210)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG22	4	0.24
(2,210)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG23	4	0.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,210)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG21	4	0.24
(2,210)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG22	4	0.24
(2,210)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG23	4	0.24
(2,210)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG21	4	0.24
(2,210)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG22	4	0.24
(2,210)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG23	4	0.24
(2,208)	1:12:A:LEU:HD21	1:13:A:LYS:HG2	9	0.24
(2,208)	1:12:A:LEU:HD22	1:13:A:LYS:HG2	9	0.24
(2,208)	1:12:A:LEU:HD23	1:13:A:LYS:HG2	9	0.24
(2,196)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:HB2	9	0.24
(2,196)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:HB2	9	0.24
(2,196)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:HB2	9	0.24
(2,185)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG13	3	0.24
(2,185)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG13	3	0.24
(2,185)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG13	3	0.24
(2,185)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG13	3	0.24
(2,185)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG13	3	0.24
(2,185)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG13	3	0.24
(2,43)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB2	1	0.24
(1,213)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB2	3	0.24
(1,213)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB2	3	0.24
(1,213)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB2	3	0.24
(1,213)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB3	3	0.24
(1,213)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB3	3	0.24
(1,213)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB3	3	0.24
(1,124)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	9	0.24
(1,124)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	9	0.24
(1,124)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	9	0.24
(1,124)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	9	0.24
(1,124)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	9	0.24
(1,124)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	9	0.24
(1,124)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HD1	9	0.24
(1,124)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HD2	9	0.24
(1,124)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HD1	9	0.24
(1,124)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HD2	9	0.24
(1,124)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HD1	9	0.24
(1,124)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HD2	9	0.24
(1,110)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	7	0.24
(1,110)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	7	0.24
(1,110)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	7	0.24
(1,99)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD2	8	0.24
(1,99)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD3	8	0.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,83)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG2	5	0.24
(1,12)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG2	6	0.24
(1,12)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG3	6	0.24
(3,175)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HG21	10	0.23
(3,175)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HG22	10	0.23
(3,175)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HG23	10	0.23
(3,164)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA3	6	0.23
(3,164)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA3	6	0.23
(3,164)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA3	6	0.23
(3,55)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD2	3	0.23
(3,55)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD3	3	0.23
(3,20)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	5	0.23
(2,214)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HG21	10	0.23
(2,214)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HG22	10	0.23
(2,214)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HG23	10	0.23
(2,198)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA3	6	0.23
(2,198)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA3	6	0.23
(2,198)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA3	6	0.23
(2,64)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD2	3	0.23
(2,64)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD3	3	0.23
(2,24)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	5	0.23
(1,209)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD21	2	0.23
(1,209)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD22	2	0.23
(1,209)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD23	2	0.23
(1,207)	1:12:A:LEU:HD11	1:13:A:LYS:HG2	10	0.23
(1,207)	1:12:A:LEU:HD12	1:13:A:LYS:HG2	10	0.23
(1,207)	1:12:A:LEU:HD13	1:13:A:LYS:HG2	10	0.23
(1,203)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB2	3	0.23
(1,203)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB2	3	0.23
(1,203)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB2	3	0.23
(1,203)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB3	3	0.23
(1,203)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB3	3	0.23
(1,203)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB3	3	0.23
(1,180)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	3	0.23
(1,180)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	3	0.23
(1,180)	1:3:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	3	0.23
(1,180)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB1	3	0.23
(1,180)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB2	3	0.23
(1,180)	1:3:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB3	3	0.23
(1,134)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:H	1	0.23
(1,134)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:H	1	0.23
(1,134)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:H	1	0.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,134)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:H	1	0.23
(1,134)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:H	1	0.23
(1,134)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:H	1	0.23
(1,83)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG2	6	0.23
(1,51)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	3	0.23
(1,36)	1:24:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HG2	7	0.23
(1,36)	1:24:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HG2	9	0.23
(1,15)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HB2	5	0.23
(3,123)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG13	5	0.22
(3,123)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG13	5	0.22
(3,121)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB3	10	0.22
(3,121)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB3	10	0.22
(3,111)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD21	8	0.22
(3,111)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD22	8	0.22
(3,111)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD23	8	0.22
(3,111)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD21	8	0.22
(3,111)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD22	8	0.22
(3,111)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD23	8	0.22
(3,73)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HB2	1	0.22
(3,73)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HB3	1	0.22
(3,37)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB2	4	0.22
(2,140)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG13	5	0.22
(2,140)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG13	5	0.22
(2,137)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB3	10	0.22
(2,137)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB3	10	0.22
(2,126)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD21	8	0.22
(2,126)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD22	8	0.22
(2,126)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD23	8	0.22
(2,126)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD21	8	0.22
(2,126)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD22	8	0.22
(2,126)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD23	8	0.22
(2,82)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HB2	1	0.22
(2,82)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HB3	1	0.22
(2,43)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB2	4	0.22
(1,216)	1:9:A:ILE:HG12	1:9:A:ILE:HG21	9	0.22
(1,216)	1:9:A:ILE:HG12	1:9:A:ILE:HG22	9	0.22
(1,216)	1:9:A:ILE:HG12	1:9:A:ILE:HG23	9	0.22
(1,212)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG21	5	0.22
(1,212)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG22	5	0.22
(1,212)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG23	5	0.22
(1,209)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD21	5	0.22
(1,209)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD22	5	0.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,209)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD23	5	0.22
(1,193)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HA	8	0.22
(1,193)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HA	8	0.22
(1,193)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HA	8	0.22
(1,181)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HG3	6	0.22
(1,181)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HG3	6	0.22
(1,181)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HG3	8	0.22
(1,181)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HG3	8	0.22
(1,161)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	8	0.22
(1,120)	1:6:A:ARG:HD3	1:6:A:ARG:HG2	5	0.22
(1,63)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HB2	8	0.22
(1,63)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HB3	8	0.22
(1,36)	1:24:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HG2	5	0.22
(1,36)	1:24:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HG2	8	0.22
(1,15)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HB2	9	0.22
(1,13)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HB3	6	0.22
(4,15)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	5	0.21
(4,15)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	5	0.21
(4,15)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	5	0.21
(4,15)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	5	0.21
(4,15)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	5	0.21
(4,15)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	5	0.21
(4,15)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE1	5	0.21
(4,15)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE2	5	0.21
(4,15)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE1	5	0.21
(4,15)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE2	5	0.21
(4,15)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE1	5	0.21
(4,15)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE2	5	0.21
(3,172)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD11	7	0.21
(3,172)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD12	7	0.21
(3,172)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD13	7	0.21
(3,172)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD11	7	0.21
(3,172)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD12	7	0.21
(3,172)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD13	7	0.21
(3,172)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD11	7	0.21
(3,172)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD12	7	0.21
(3,172)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD13	7	0.21
(3,172)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HD11	7	0.21
(3,172)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HD12	7	0.21
(3,172)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HD13	7	0.21
(3,172)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HD11	7	0.21
(3,172)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HD12	7	0.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,172)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HD13	7	0.21
(3,172)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HD11	7	0.21
(3,172)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HD12	7	0.21
(3,172)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HD13	7	0.21
(3,162)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	5	0.21
(3,162)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	5	0.21
(3,162)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	5	0.21
(3,128)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:H	2	0.21
(3,57)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HG3	5	0.21
(3,13)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD2	4	0.21
(2,211)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD11	7	0.21
(2,211)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD12	7	0.21
(2,211)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD13	7	0.21
(2,211)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD11	7	0.21
(2,211)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD12	7	0.21
(2,211)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD13	7	0.21
(2,211)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD11	7	0.21
(2,211)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD12	7	0.21
(2,211)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD13	7	0.21
(2,211)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HD11	7	0.21
(2,211)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HD12	7	0.21
(2,211)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HD13	7	0.21
(2,211)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HD11	7	0.21
(2,211)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HD12	7	0.21
(2,211)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HD13	7	0.21
(2,211)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HD11	7	0.21
(2,211)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HD12	7	0.21
(2,211)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HD13	7	0.21
(2,195)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	5	0.21
(2,195)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	5	0.21
(2,195)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	5	0.21
(2,152)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:H	2	0.21
(2,123)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	5	0.21
(2,123)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	5	0.21
(2,123)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	5	0.21
(2,123)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	5	0.21
(2,123)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	5	0.21
(2,123)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	5	0.21
(2,123)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE1	5	0.21
(2,123)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE2	5	0.21
(2,123)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE1	5	0.21
(2,123)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE2	5	0.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,123)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE1	5	0.21
(2,123)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE2	5	0.21
(2,66)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HG3	5	0.21
(2,16)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD2	4	0.21
(1,208)	1:12:A:LEU:HD21	1:13:A:LYS:HG2	10	0.21
(1,208)	1:12:A:LEU:HD22	1:13:A:LYS:HG2	10	0.21
(1,208)	1:12:A:LEU:HD23	1:13:A:LYS:HG2	10	0.21
(1,111)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	8	0.21
(1,111)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	8	0.21
(1,111)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	8	0.21
(1,99)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD2	7	0.21
(1,99)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD3	7	0.21
(1,20)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG3	2	0.21
(4,32)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HA	3	0.2
(4,32)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HA	3	0.2
(4,32)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HA	3	0.2
(4,19)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG2	9	0.2
(4,19)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG2	9	0.2
(3,180)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG21	1	0.2
(3,180)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG22	1	0.2
(3,180)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG23	1	0.2
(3,164)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA3	5	0.2
(3,164)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA3	5	0.2
(3,164)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA3	5	0.2
(3,164)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA3	10	0.2
(3,164)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA3	10	0.2
(3,164)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA3	10	0.2
(3,163)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD21	8	0.2
(3,163)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD22	8	0.2
(3,163)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD23	8	0.2
(3,159)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	10	0.2
(3,159)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	10	0.2
(3,159)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	10	0.2
(3,159)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HB2	10	0.2
(3,159)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HB2	10	0.2
(3,159)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HB2	10	0.2
(3,157)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG11	9	0.2
(3,157)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG12	9	0.2
(3,157)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG13	9	0.2
(3,157)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	9	0.2
(3,157)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	9	0.2
(3,157)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	9	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,157)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG11	9	0.2
(3,157)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG12	9	0.2
(3,157)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG13	9	0.2
(3,143)	1:21:A:ARG:HG2	1:22:A:PRO:HD2	7	0.2
(3,123)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG13	2	0.2
(3,123)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG13	2	0.2
(3,123)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG13	4	0.2
(3,123)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG13	4	0.2
(3,123)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG13	7	0.2
(3,123)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG13	7	0.2
(3,114)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD21	3	0.2
(3,114)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD22	3	0.2
(3,114)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD23	3	0.2
(3,110)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD11	9	0.2
(3,110)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD12	9	0.2
(3,110)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD13	9	0.2
(3,110)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD11	9	0.2
(3,110)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD12	9	0.2
(3,110)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD13	9	0.2
(3,37)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB2	2	0.2
(2,219)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG21	1	0.2
(2,219)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG22	1	0.2
(2,219)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG23	1	0.2
(2,198)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA3	5	0.2
(2,198)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA3	5	0.2
(2,198)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA3	5	0.2
(2,198)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA3	10	0.2
(2,198)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA3	10	0.2
(2,198)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA3	10	0.2
(2,197)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD21	8	0.2
(2,197)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD22	8	0.2
(2,197)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HD23	8	0.2
(2,192)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HA	3	0.2
(2,192)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HA	3	0.2
(2,192)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HA	3	0.2
(2,189)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	10	0.2
(2,189)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	10	0.2
(2,189)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	10	0.2
(2,189)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HB2	10	0.2
(2,189)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HB2	10	0.2
(2,189)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HB2	10	0.2
(2,187)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG11	9	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,187)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG12	9	0.2
(2,187)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG13	9	0.2
(2,187)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	9	0.2
(2,187)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	9	0.2
(2,187)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	9	0.2
(2,187)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG11	9	0.2
(2,187)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG12	9	0.2
(2,187)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG13	9	0.2
(2,169)	1:21:A:ARG:HG2	1:22:A:PRO:HD2	7	0.2
(2,143)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG2	9	0.2
(2,143)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG2	9	0.2
(2,140)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG13	2	0.2
(2,140)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG13	2	0.2
(2,140)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG13	4	0.2
(2,140)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG13	4	0.2
(2,140)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG13	7	0.2
(2,140)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG13	7	0.2
(2,130)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD21	3	0.2
(2,130)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD22	3	0.2
(2,130)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD23	3	0.2
(2,125)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD11	9	0.2
(2,125)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD12	9	0.2
(2,125)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD13	9	0.2
(2,125)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD11	9	0.2
(2,125)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD12	9	0.2
(2,125)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD13	9	0.2
(2,43)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB2	2	0.2
(1,181)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HG3	7	0.2
(1,181)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HG3	7	0.2
(1,181)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HG3	10	0.2
(1,181)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HG3	10	0.2
(1,160)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG2	5	0.2
(1,160)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG3	5	0.2
(1,124)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	8	0.2
(1,124)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	8	0.2
(1,124)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	8	0.2
(1,124)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	8	0.2
(1,124)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	8	0.2
(1,124)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	8	0.2
(1,124)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HD1	8	0.2
(1,124)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HD2	8	0.2
(1,124)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HD1	8	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,124)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HD2	8	0.2
(1,124)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HD1	8	0.2
(1,124)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HD2	8	0.2
(1,111)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	5	0.2
(1,111)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	5	0.2
(1,111)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	5	0.2
(1,95)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HD11	9	0.2
(1,95)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HD12	9	0.2
(1,95)	1:9:A:ILE:HB	1:9:A:ILE:HD13	9	0.2
(1,91)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG11	1	0.2
(1,91)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG12	1	0.2
(1,91)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG13	1	0.2
(1,91)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	1	0.2
(1,91)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	1	0.2
(1,91)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	1	0.2
(1,63)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HB2	2	0.2
(1,63)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HB3	2	0.2
(1,63)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HB2	7	0.2
(1,63)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HB3	7	0.2
(1,36)	1:24:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HG2	1	0.2
(1,20)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HG3	4	0.2
(1,15)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HB2	3	0.2
(1,5)	1:22:A:PRO:HD2	1:22:A:PRO:HG2	3	0.2
(1,5)	1:22:A:PRO:HD2	1:22:A:PRO:HG3	3	0.2
(4,23)	1:11:A:TRP:HD1	1:23:A:PRO:HA	1	0.19
(3,172)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD11	8	0.19
(3,172)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD12	8	0.19
(3,172)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD13	8	0.19
(3,172)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD11	8	0.19
(3,172)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD12	8	0.19
(3,172)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD13	8	0.19
(3,172)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD11	8	0.19
(3,172)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD12	8	0.19
(3,172)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD13	8	0.19
(3,172)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HD11	8	0.19
(3,172)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HD12	8	0.19
(3,172)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HD13	8	0.19
(3,172)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HD11	8	0.19
(3,172)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HD12	8	0.19
(3,172)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HD13	8	0.19
(3,172)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HD11	8	0.19
(3,172)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HD12	8	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,172)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HD13	8	0.19
(3,172)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD11	10	0.19
(3,172)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD12	10	0.19
(3,172)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD13	10	0.19
(3,172)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD11	10	0.19
(3,172)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD12	10	0.19
(3,172)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD13	10	0.19
(3,172)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD11	10	0.19
(3,172)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD12	10	0.19
(3,172)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD13	10	0.19
(3,172)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HD11	10	0.19
(3,172)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HD12	10	0.19
(3,172)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HD13	10	0.19
(3,172)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HD11	10	0.19
(3,172)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HD12	10	0.19
(3,172)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HD13	10	0.19
(3,172)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HD11	10	0.19
(3,172)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HD12	10	0.19
(3,172)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HD13	10	0.19
(3,166)	1:7:A:LEU:HD21	1:10:A:GLN:HG2	2	0.19
(3,166)	1:7:A:LEU:HD22	1:10:A:GLN:HG2	2	0.19
(3,166)	1:7:A:LEU:HD23	1:10:A:GLN:HG2	2	0.19
(3,166)	1:7:A:LEU:HD21	1:10:A:GLN:HG3	2	0.19
(3,166)	1:7:A:LEU:HD22	1:10:A:GLN:HG3	2	0.19
(3,166)	1:7:A:LEU:HD23	1:10:A:GLN:HG3	2	0.19
(3,117)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD11	9	0.19
(3,117)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD12	9	0.19
(3,117)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD13	9	0.19
(3,112)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD21	5	0.19
(3,112)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD22	5	0.19
(3,112)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD23	5	0.19
(3,112)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD21	5	0.19
(3,112)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD22	5	0.19
(3,112)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD23	5	0.19
(3,111)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD21	5	0.19
(3,111)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD22	5	0.19
(3,111)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD23	5	0.19
(3,111)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD21	5	0.19
(3,111)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD22	5	0.19
(3,111)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD23	5	0.19
(3,73)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HB2	7	0.19
(3,73)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HB3	7	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,211)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD11	8	0.19
(2,211)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD12	8	0.19
(2,211)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD13	8	0.19
(2,211)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD11	8	0.19
(2,211)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD12	8	0.19
(2,211)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD13	8	0.19
(2,211)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD11	8	0.19
(2,211)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD12	8	0.19
(2,211)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD13	8	0.19
(2,211)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HD11	8	0.19
(2,211)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HD12	8	0.19
(2,211)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HD13	8	0.19
(2,211)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HD11	8	0.19
(2,211)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HD12	8	0.19
(2,211)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HD13	8	0.19
(2,211)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HD11	8	0.19
(2,211)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HD12	8	0.19
(2,211)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HD13	8	0.19
(2,211)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD11	10	0.19
(2,211)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD12	10	0.19
(2,211)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD13	10	0.19
(2,211)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD11	10	0.19
(2,211)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD12	10	0.19
(2,211)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD13	10	0.19
(2,211)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD11	10	0.19
(2,211)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD12	10	0.19
(2,211)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD13	10	0.19
(2,211)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HD11	10	0.19
(2,211)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HD12	10	0.19
(2,211)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HD13	10	0.19
(2,211)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HD11	10	0.19
(2,211)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HD12	10	0.19
(2,211)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HD13	10	0.19
(2,211)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HD11	10	0.19
(2,211)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HD12	10	0.19
(2,211)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HD13	10	0.19
(2,202)	1:7:A:LEU:HD21	1:10:A:GLN:HG2	2	0.19
(2,202)	1:7:A:LEU:HD22	1:10:A:GLN:HG2	2	0.19
(2,202)	1:7:A:LEU:HD23	1:10:A:GLN:HG2	2	0.19
(2,202)	1:7:A:LEU:HD21	1:10:A:GLN:HG3	2	0.19
(2,202)	1:7:A:LEU:HD22	1:10:A:GLN:HG3	2	0.19
(2,202)	1:7:A:LEU:HD23	1:10:A:GLN:HG3	2	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,149)	1:11:A:TRP:HD1	1:23:A:PRO:HA	1	0.19
(2,133)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD11	9	0.19
(2,133)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD12	9	0.19
(2,133)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD13	9	0.19
(2,128)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD21	5	0.19
(2,128)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD22	5	0.19
(2,128)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD23	5	0.19
(2,128)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD21	5	0.19
(2,128)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD22	5	0.19
(2,128)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD23	5	0.19
(2,126)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD21	5	0.19
(2,126)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD22	5	0.19
(2,126)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD23	5	0.19
(2,126)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD21	5	0.19
(2,126)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD22	5	0.19
(2,126)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD23	5	0.19
(2,82)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HB2	7	0.19
(2,82)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HB3	7	0.19
(1,207)	1:12:A:LEU:HD11	1:13:A:LYS:HG2	7	0.19
(1,207)	1:12:A:LEU:HD12	1:13:A:LYS:HG2	7	0.19
(1,207)	1:12:A:LEU:HD13	1:13:A:LYS:HG2	7	0.19
(1,187)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG11	6	0.19
(1,187)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG12	6	0.19
(1,187)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG13	6	0.19
(1,187)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	6	0.19
(1,187)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	6	0.19
(1,187)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	6	0.19
(1,187)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG11	6	0.19
(1,187)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG12	6	0.19
(1,187)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG13	6	0.19
(1,187)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG21	6	0.19
(1,187)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG22	6	0.19
(1,187)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:HG23	6	0.19
(1,181)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HG3	4	0.19
(1,181)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HG3	4	0.19
(1,160)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG2	4	0.19
(1,160)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG3	4	0.19
(1,134)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:H	10	0.19
(1,134)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:H	10	0.19
(1,134)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:H	10	0.19
(1,134)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:H	10	0.19
(1,134)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:H	10	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,134)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:H	10	0.19
(1,99)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD2	3	0.19
(1,99)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD3	3	0.19
(1,63)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HB2	4	0.19
(1,63)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HB3	4	0.19
(4,39)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG21	7	0.18
(4,39)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG22	7	0.18
(4,39)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG23	7	0.18
(4,39)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG21	7	0.18
(4,39)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG22	7	0.18
(4,39)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG23	7	0.18
(4,39)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG21	7	0.18
(4,39)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG22	7	0.18
(4,39)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG23	7	0.18
(4,39)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG21	7	0.18
(4,39)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG22	7	0.18
(4,39)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG23	7	0.18
(4,39)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG21	7	0.18
(4,39)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG22	7	0.18
(4,39)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG23	7	0.18
(4,39)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG21	7	0.18
(4,39)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG22	7	0.18
(4,39)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG23	7	0.18
(4,34)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:HB2	10	0.18
(4,34)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:HB2	10	0.18
(4,34)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:HB2	10	0.18
(3,172)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD11	9	0.18
(3,172)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD12	9	0.18
(3,172)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD13	9	0.18
(3,172)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD11	9	0.18
(3,172)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD12	9	0.18
(3,172)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD13	9	0.18
(3,172)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD11	9	0.18
(3,172)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD12	9	0.18
(3,172)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD13	9	0.18
(3,172)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HD11	9	0.18
(3,172)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HD12	9	0.18
(3,172)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HD13	9	0.18
(3,172)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HD11	9	0.18
(3,172)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HD12	9	0.18
(3,172)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HD13	9	0.18
(3,172)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HD11	9	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,172)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HD12	9	0.18
(3,172)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HD13	9	0.18
(3,162)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	10	0.18
(3,162)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	10	0.18
(3,162)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	10	0.18
(3,112)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD21	7	0.18
(3,112)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD22	7	0.18
(3,112)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD23	7	0.18
(3,112)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD21	7	0.18
(3,112)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD22	7	0.18
(3,112)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD23	7	0.18
(3,112)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD21	8	0.18
(3,112)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD22	8	0.18
(3,112)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD23	8	0.18
(3,112)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD21	8	0.18
(3,112)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD22	8	0.18
(3,112)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD23	8	0.18
(3,110)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD11	2	0.18
(3,110)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD12	2	0.18
(3,110)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD13	2	0.18
(3,110)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD11	2	0.18
(3,110)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD12	2	0.18
(3,110)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD13	2	0.18
(3,94)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HG3	10	0.18
(3,73)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HB2	3	0.18
(3,73)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HB3	3	0.18
(3,37)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB2	8	0.18
(3,36)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB3	7	0.18
(2,211)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD11	9	0.18
(2,211)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD12	9	0.18
(2,211)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD13	9	0.18
(2,211)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD11	9	0.18
(2,211)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD12	9	0.18
(2,211)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD13	9	0.18
(2,211)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD11	9	0.18
(2,211)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD12	9	0.18
(2,211)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD13	9	0.18
(2,211)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HD11	9	0.18
(2,211)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HD12	9	0.18
(2,211)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HD13	9	0.18
(2,211)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HD11	9	0.18
(2,211)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HD12	9	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,211)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HD13	9	0.18
(2,211)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HD11	9	0.18
(2,211)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HD12	9	0.18
(2,211)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HD13	9	0.18
(2,210)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG21	7	0.18
(2,210)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG22	7	0.18
(2,210)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG23	7	0.18
(2,210)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG21	7	0.18
(2,210)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG22	7	0.18
(2,210)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG23	7	0.18
(2,210)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG21	7	0.18
(2,210)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG22	7	0.18
(2,210)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG23	7	0.18
(2,210)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG21	7	0.18
(2,210)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG22	7	0.18
(2,210)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG23	7	0.18
(2,210)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG21	7	0.18
(2,210)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG22	7	0.18
(2,210)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG23	7	0.18
(2,210)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG21	7	0.18
(2,210)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG22	7	0.18
(2,210)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG23	7	0.18
(2,196)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:HB2	10	0.18
(2,196)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:HB2	10	0.18
(2,196)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:HB2	10	0.18
(2,195)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	10	0.18
(2,195)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	10	0.18
(2,195)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	10	0.18
(2,128)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD21	7	0.18
(2,128)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD22	7	0.18
(2,128)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD23	7	0.18
(2,128)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD21	7	0.18
(2,128)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD22	7	0.18
(2,128)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD23	7	0.18
(2,128)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD21	8	0.18
(2,128)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD22	8	0.18
(2,128)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD23	8	0.18
(2,128)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD21	8	0.18
(2,128)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD22	8	0.18
(2,128)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD23	8	0.18
(2,125)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD11	2	0.18
(2,125)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD12	2	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,125)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD13	2	0.18
(2,125)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD11	2	0.18
(2,125)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD12	2	0.18
(2,125)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD13	2	0.18
(2,105)	1:14:A:GLU:HA	1:14:A:GLU:HG3	10	0.18
(2,82)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HB2	3	0.18
(2,82)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HB3	3	0.18
(2,43)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB2	8	0.18
(2,42)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB3	7	0.18
(1,212)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG21	9	0.18
(1,212)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG22	9	0.18
(1,212)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG23	9	0.18
(1,209)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD21	8	0.18
(1,209)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD22	8	0.18
(1,209)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD23	8	0.18
(1,181)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HG3	2	0.18
(1,181)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HG3	2	0.18
(1,163)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG2	6	0.18
(1,163)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG3	6	0.18
(1,162)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	10	0.18
(1,162)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB3	10	0.18
(1,124)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	2	0.18
(1,124)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	2	0.18
(1,124)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	2	0.18
(1,124)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	2	0.18
(1,124)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	2	0.18
(1,124)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	2	0.18
(1,124)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HD1	2	0.18
(1,124)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HD2	2	0.18
(1,124)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HD1	2	0.18
(1,124)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HD2	2	0.18
(1,124)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HD1	2	0.18
(1,124)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HD2	2	0.18
(1,101)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HG3	10	0.18
(1,101)	1:21:A:ARG:HD3	1:21:A:ARG:HG3	10	0.18
(1,63)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HB2	10	0.18
(1,63)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HB3	10	0.18
(1,36)	1:24:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HG2	10	0.18
(4,39)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG21	3	0.17
(4,39)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG22	3	0.17
(4,39)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG23	3	0.17
(4,39)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG21	3	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(4,39)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG22	3	0.17
(4,39)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG23	3	0.17
(4,39)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG21	3	0.17
(4,39)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG22	3	0.17
(4,39)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG23	3	0.17
(4,39)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG21	3	0.17
(4,39)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG22	3	0.17
(4,39)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG23	3	0.17
(4,39)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG21	3	0.17
(4,39)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG22	3	0.17
(4,39)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG23	3	0.17
(4,39)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG21	3	0.17
(4,39)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG22	3	0.17
(4,39)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG23	3	0.17
(4,23)	1:11:A:TRP:HD1	1:23:A:PRO:HA	4	0.17
(4,15)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	9	0.17
(4,15)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	9	0.17
(4,15)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	9	0.17
(4,15)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	9	0.17
(4,15)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	9	0.17
(4,15)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	9	0.17
(4,15)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE1	9	0.17
(4,15)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE2	9	0.17
(4,15)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE1	9	0.17
(4,15)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE2	9	0.17
(4,15)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE1	9	0.17
(4,15)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE2	9	0.17
(3,160)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG11	1	0.17
(3,160)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG12	1	0.17
(3,160)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG13	1	0.17
(3,160)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	1	0.17
(3,160)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	1	0.17
(3,160)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	1	0.17
(3,160)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG11	4	0.17
(3,160)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG12	4	0.17
(3,160)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG13	4	0.17
(3,160)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	4	0.17
(3,160)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	4	0.17
(3,160)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	4	0.17
(3,122)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HG13	6	0.17
(3,122)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HG13	6	0.17
(3,114)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD21	6	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,114)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD22	6	0.17
(3,114)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD23	6	0.17
(3,114)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD21	9	0.17
(3,114)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD22	9	0.17
(3,114)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD23	9	0.17
(3,110)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD11	7	0.17
(3,110)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD12	7	0.17
(3,110)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD13	7	0.17
(3,110)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD11	7	0.17
(3,110)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD12	7	0.17
(3,110)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD13	7	0.17
(3,87)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD2	7	0.17
(3,87)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD3	7	0.17
(3,27)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG3	4	0.17
(3,1)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD2	7	0.17
(2,210)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG21	3	0.17
(2,210)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG22	3	0.17
(2,210)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG23	3	0.17
(2,210)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG21	3	0.17
(2,210)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG22	3	0.17
(2,210)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG23	3	0.17
(2,210)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG21	3	0.17
(2,210)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG22	3	0.17
(2,210)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG23	3	0.17
(2,210)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG21	3	0.17
(2,210)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG22	3	0.17
(2,210)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG23	3	0.17
(2,210)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG21	3	0.17
(2,210)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG22	3	0.17
(2,210)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG23	3	0.17
(2,210)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG21	3	0.17
(2,210)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG22	3	0.17
(2,210)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG23	3	0.17
(2,191)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG11	1	0.17
(2,191)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG12	1	0.17
(2,191)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG13	1	0.17
(2,191)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	1	0.17
(2,191)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	1	0.17
(2,191)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	1	0.17
(2,191)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG11	4	0.17
(2,191)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG12	4	0.17
(2,191)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG13	4	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,191)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	4	0.17
(2,191)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	4	0.17
(2,191)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	4	0.17
(2,149)	1:11:A:TRP:HD1	1:23:A:PRO:HA	4	0.17
(2,139)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HG13	6	0.17
(2,139)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HG13	6	0.17
(2,130)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD21	6	0.17
(2,130)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD22	6	0.17
(2,130)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD23	6	0.17
(2,130)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD21	9	0.17
(2,130)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD22	9	0.17
(2,130)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD23	9	0.17
(2,125)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD11	7	0.17
(2,125)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD12	7	0.17
(2,125)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD13	7	0.17
(2,125)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD11	7	0.17
(2,125)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD12	7	0.17
(2,125)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD13	7	0.17
(2,123)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	9	0.17
(2,123)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	9	0.17
(2,123)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	9	0.17
(2,123)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	9	0.17
(2,123)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	9	0.17
(2,123)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	9	0.17
(2,123)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE1	9	0.17
(2,123)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HE2	9	0.17
(2,123)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE1	9	0.17
(2,123)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HE2	9	0.17
(2,123)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE1	9	0.17
(2,123)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HE2	9	0.17
(2,98)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD2	7	0.17
(2,98)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD3	7	0.17
(2,33)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG3	4	0.17
(2,1)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD2	7	0.17
(1,163)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG2	9	0.17
(1,163)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG3	9	0.17
(1,150)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HD2	6	0.17
(1,150)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HD3	6	0.17
(1,111)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	10	0.17
(1,111)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	10	0.17
(1,111)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	10	0.17
(1,101)	1:21:A:ARG:HD2	1:21:A:ARG:HG3	9	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,101)	1:21:A:ARG:HD3	1:21:A:ARG:HG3	9	0.17
(1,99)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD2	1	0.17
(1,99)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD3	1	0.17
(1,93)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	9	0.17
(1,93)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	9	0.17
(1,93)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	9	0.17
(3,145)	1:23:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD2	3	0.16
(3,131)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG13	5	0.16
(3,110)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD11	10	0.16
(3,110)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD12	10	0.16
(3,110)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD13	10	0.16
(3,110)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD11	10	0.16
(3,110)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD12	10	0.16
(3,110)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD13	10	0.16
(3,37)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB2	5	0.16
(2,171)	1:23:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD2	3	0.16
(2,155)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG13	5	0.16
(2,125)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD11	10	0.16
(2,125)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD12	10	0.16
(2,125)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD13	10	0.16
(2,125)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD11	10	0.16
(2,125)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD12	10	0.16
(2,125)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD13	10	0.16
(2,43)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB2	5	0.16
(1,216)	1:9:A:ILE:HG12	1:9:A:ILE:HG21	8	0.16
(1,216)	1:9:A:ILE:HG12	1:9:A:ILE:HG22	8	0.16
(1,216)	1:9:A:ILE:HG12	1:9:A:ILE:HG23	8	0.16
(1,184)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG11	7	0.16
(1,184)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG12	7	0.16
(1,184)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG13	7	0.16
(1,184)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG11	7	0.16
(1,184)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG12	7	0.16
(1,184)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG13	7	0.16
(1,184)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG11	7	0.16
(1,184)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG12	7	0.16
(1,184)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG13	7	0.16
(1,184)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	7	0.16
(1,184)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	7	0.16
(1,184)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	7	0.16
(1,184)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	7	0.16
(1,184)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	7	0.16
(1,184)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	7	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,184)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	7	0.16
(1,184)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	7	0.16
(1,184)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	7	0.16
(1,184)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG11	9	0.16
(1,184)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG12	9	0.16
(1,184)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG13	9	0.16
(1,184)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG11	9	0.16
(1,184)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG12	9	0.16
(1,184)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG13	9	0.16
(1,184)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG11	9	0.16
(1,184)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG12	9	0.16
(1,184)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG13	9	0.16
(1,184)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	9	0.16
(1,184)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	9	0.16
(1,184)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	9	0.16
(1,184)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	9	0.16
(1,184)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	9	0.16
(1,184)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	9	0.16
(1,184)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	9	0.16
(1,184)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	9	0.16
(1,184)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	9	0.16
(1,99)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD2	4	0.16
(1,99)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD3	4	0.16
(1,93)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	10	0.16
(1,93)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	10	0.16
(1,93)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	10	0.16
(1,74)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HB3	8	0.16
(1,63)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HB2	5	0.16
(1,63)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HB3	5	0.16
(1,50)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HD1	6	0.16
(1,49)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HD1	1	0.16
(1,38)	1:25:A:SER:HA	1:25:A:SER:HB2	9	0.16
(1,38)	1:25:A:SER:HA	1:25:A:SER:HB3	9	0.16
(1,36)	1:24:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HG2	6	0.16
(4,20)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG2	4	0.15
(4,20)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG2	4	0.15
(3,169)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HG3	8	0.15
(3,169)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HG3	8	0.15
(3,169)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HG3	8	0.15
(3,169)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HG3	9	0.15
(3,169)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HG3	9	0.15
(3,169)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HG3	9	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,166)	1:7:A:LEU:HD21	1:10:A:GLN:HG2	9	0.15
(3,166)	1:7:A:LEU:HD22	1:10:A:GLN:HG2	9	0.15
(3,166)	1:7:A:LEU:HD23	1:10:A:GLN:HG2	9	0.15
(3,166)	1:7:A:LEU:HD21	1:10:A:GLN:HG3	9	0.15
(3,166)	1:7:A:LEU:HD22	1:10:A:GLN:HG3	9	0.15
(3,166)	1:7:A:LEU:HD23	1:10:A:GLN:HG3	9	0.15
(3,160)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG11	3	0.15
(3,160)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG12	3	0.15
(3,160)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG13	3	0.15
(3,160)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	3	0.15
(3,160)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	3	0.15
(3,160)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	3	0.15
(3,159)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	1	0.15
(3,159)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	1	0.15
(3,159)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	1	0.15
(3,159)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HB2	1	0.15
(3,159)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HB2	1	0.15
(3,159)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HB2	1	0.15
(3,131)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG13	9	0.15
(3,112)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD21	4	0.15
(3,112)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD22	4	0.15
(3,112)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD23	4	0.15
(3,112)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD21	4	0.15
(3,112)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD22	4	0.15
(3,112)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD23	4	0.15
(3,112)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD21	10	0.15
(3,112)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD22	10	0.15
(3,112)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD23	10	0.15
(3,112)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD21	10	0.15
(3,112)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD22	10	0.15
(3,112)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD23	10	0.15
(3,110)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD11	4	0.15
(3,110)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD12	4	0.15
(3,110)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD13	4	0.15
(3,110)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD11	4	0.15
(3,110)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD12	4	0.15
(3,110)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD13	4	0.15
(3,87)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD2	2	0.15
(3,87)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD3	2	0.15
(3,60)	1:13:A:LYS:HE2	1:13:A:LYS:HG2	6	0.15
(3,57)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HG3	9	0.15
(3,37)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB2	3	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,27)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG3	9	0.15
(2,206)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HG3	8	0.15
(2,206)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HG3	8	0.15
(2,206)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HG3	8	0.15
(2,206)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HG3	9	0.15
(2,206)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HG3	9	0.15
(2,206)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HG3	9	0.15
(2,202)	1:7:A:LEU:HD21	1:10:A:GLN:HG2	9	0.15
(2,202)	1:7:A:LEU:HD22	1:10:A:GLN:HG2	9	0.15
(2,202)	1:7:A:LEU:HD23	1:10:A:GLN:HG2	9	0.15
(2,202)	1:7:A:LEU:HD21	1:10:A:GLN:HG3	9	0.15
(2,202)	1:7:A:LEU:HD22	1:10:A:GLN:HG3	9	0.15
(2,202)	1:7:A:LEU:HD23	1:10:A:GLN:HG3	9	0.15
(2,191)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG11	3	0.15
(2,191)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG12	3	0.15
(2,191)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG13	3	0.15
(2,191)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	3	0.15
(2,191)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	3	0.15
(2,191)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	3	0.15
(2,189)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	1	0.15
(2,189)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	1	0.15
(2,189)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	1	0.15
(2,189)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HB2	1	0.15
(2,189)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HB2	1	0.15
(2,189)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HB2	1	0.15
(2,155)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG13	9	0.15
(2,144)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG2	4	0.15
(2,144)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG2	4	0.15
(2,128)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD21	4	0.15
(2,128)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD22	4	0.15
(2,128)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD23	4	0.15
(2,128)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD21	4	0.15
(2,128)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD22	4	0.15
(2,128)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD23	4	0.15
(2,128)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD21	10	0.15
(2,128)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD22	10	0.15
(2,128)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD23	10	0.15
(2,128)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD21	10	0.15
(2,128)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD22	10	0.15
(2,128)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD23	10	0.15
(2,125)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD11	4	0.15
(2,125)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD12	4	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,125)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD13	4	0.15
(2,125)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD11	4	0.15
(2,125)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD12	4	0.15
(2,125)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD13	4	0.15
(2,98)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD2	2	0.15
(2,98)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD3	2	0.15
(2,69)	1:13:A:LYS:HE2	1:13:A:LYS:HG2	6	0.15
(2,66)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HG3	9	0.15
(2,43)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB2	3	0.15
(2,33)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG3	9	0.15
(1,216)	1:9:A:ILE:HG12	1:9:A:ILE:HG21	7	0.15
(1,216)	1:9:A:ILE:HG12	1:9:A:ILE:HG22	7	0.15
(1,216)	1:9:A:ILE:HG12	1:9:A:ILE:HG23	7	0.15
(1,216)	1:9:A:ILE:HG12	1:9:A:ILE:HG21	10	0.15
(1,216)	1:9:A:ILE:HG12	1:9:A:ILE:HG22	10	0.15
(1,216)	1:9:A:ILE:HG12	1:9:A:ILE:HG23	10	0.15
(1,204)	1:7:A:LEU:HD21	1:7:A:LEU:HG	7	0.15
(1,204)	1:7:A:LEU:HD22	1:7:A:LEU:HG	7	0.15
(1,204)	1:7:A:LEU:HD23	1:7:A:LEU:HG	7	0.15
(1,189)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	5	0.15
(1,189)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	5	0.15
(1,189)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	5	0.15
(1,189)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HB2	5	0.15
(1,189)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HB2	5	0.15
(1,189)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HB2	5	0.15
(1,137)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB3	3	0.15
(1,137)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB3	3	0.15
(1,137)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB3	7	0.15
(1,137)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB3	7	0.15
(1,136)	1:8:A:TYR:HD1	1:23:A:PRO:HB3	5	0.15
(1,136)	1:8:A:TYR:HD2	1:23:A:PRO:HB3	5	0.15
(1,93)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	8	0.15
(1,93)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	8	0.15
(1,93)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	8	0.15
(1,77)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HB2	5	0.15
(1,38)	1:25:A:SER:HA	1:25:A:SER:HB2	4	0.15
(1,38)	1:25:A:SER:HA	1:25:A:SER:HB3	4	0.15
(3,169)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HG3	3	0.14
(3,169)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HG3	3	0.14
(3,169)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HG3	3	0.14
(3,169)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HG3	10	0.14
(3,169)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HG3	10	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,169)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HG3	10	0.14
(3,160)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG11	8	0.14
(3,160)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG12	8	0.14
(3,160)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG13	8	0.14
(3,160)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	8	0.14
(3,160)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	8	0.14
(3,160)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	8	0.14
(3,131)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG13	10	0.14
(3,128)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:H	8	0.14
(3,122)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HG13	1	0.14
(3,122)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HG13	1	0.14
(3,119)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HG12	1	0.14
(3,119)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HG12	1	0.14
(3,114)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD21	4	0.14
(3,114)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD22	4	0.14
(3,114)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD23	4	0.14
(3,114)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD21	7	0.14
(3,114)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD22	7	0.14
(3,114)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD23	7	0.14
(2,206)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HG3	3	0.14
(2,206)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HG3	3	0.14
(2,206)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HG3	3	0.14
(2,206)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HG3	10	0.14
(2,206)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HG3	10	0.14
(2,206)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HG3	10	0.14
(2,191)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG11	8	0.14
(2,191)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG12	8	0.14
(2,191)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG13	8	0.14
(2,191)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	8	0.14
(2,191)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	8	0.14
(2,191)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	8	0.14
(2,155)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG13	10	0.14
(2,152)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:H	8	0.14
(2,139)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HG13	1	0.14
(2,139)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HG13	1	0.14
(2,135)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HG12	1	0.14
(2,135)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HG12	1	0.14
(2,130)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD21	4	0.14
(2,130)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD22	4	0.14
(2,130)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD23	4	0.14
(2,130)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD21	7	0.14
(2,130)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD22	7	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,130)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD23	7	0.14
(1,184)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG11	10	0.14
(1,184)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG12	10	0.14
(1,184)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG13	10	0.14
(1,184)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG11	10	0.14
(1,184)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG12	10	0.14
(1,184)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG13	10	0.14
(1,184)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG11	10	0.14
(1,184)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG12	10	0.14
(1,184)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG13	10	0.14
(1,184)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	10	0.14
(1,184)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	10	0.14
(1,184)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	10	0.14
(1,184)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	10	0.14
(1,184)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	10	0.14
(1,184)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	10	0.14
(1,184)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	10	0.14
(1,184)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	10	0.14
(1,184)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	10	0.14
(1,170)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HD2	7	0.14
(1,154)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HG3	2	0.14
(1,126)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD21	6	0.14
(1,126)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD22	6	0.14
(1,126)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD23	6	0.14
(1,126)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD21	6	0.14
(1,126)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD22	6	0.14
(1,126)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD23	6	0.14
(1,124)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	7	0.14
(1,124)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	7	0.14
(1,124)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	7	0.14
(1,124)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	7	0.14
(1,124)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	7	0.14
(1,124)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	7	0.14
(1,124)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HD1	7	0.14
(1,124)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HD2	7	0.14
(1,124)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HD1	7	0.14
(1,124)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HD2	7	0.14
(1,124)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HD1	7	0.14
(1,124)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HD2	7	0.14
(1,70)	1:13:A:LYS:HE2	1:13:A:LYS:HG3	6	0.14
(1,61)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD11	2	0.14
(1,61)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD12	2	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,61)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD13	2	0.14
(1,61)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD11	8	0.14
(1,61)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD12	8	0.14
(1,61)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD13	8	0.14
(4,39)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG21	1	0.13
(4,39)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG22	1	0.13
(4,39)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG23	1	0.13
(4,39)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG21	1	0.13
(4,39)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG22	1	0.13
(4,39)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG23	1	0.13
(4,39)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG21	1	0.13
(4,39)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG22	1	0.13
(4,39)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG23	1	0.13
(4,39)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG21	1	0.13
(4,39)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG22	1	0.13
(4,39)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG23	1	0.13
(4,39)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG21	1	0.13
(4,39)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG22	1	0.13
(4,39)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG23	1	0.13
(4,39)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG21	1	0.13
(4,39)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG22	1	0.13
(4,39)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG23	1	0.13
(4,5)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	2	0.13
(4,4)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD3	4	0.13
(3,175)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HG21	1	0.13
(3,175)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HG22	1	0.13
(3,175)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HG23	1	0.13
(3,175)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HG21	8	0.13
(3,175)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HG22	8	0.13
(3,175)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HG23	8	0.13
(3,169)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HG3	7	0.13
(3,169)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HG3	7	0.13
(3,169)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HG3	7	0.13
(3,167)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB2	1	0.13
(3,167)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB2	1	0.13
(3,167)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB2	1	0.13
(3,166)	1:7:A:LEU:HD21	1:10:A:GLN:HG2	3	0.13
(3,166)	1:7:A:LEU:HD22	1:10:A:GLN:HG2	3	0.13
(3,166)	1:7:A:LEU:HD23	1:10:A:GLN:HG2	3	0.13
(3,166)	1:7:A:LEU:HD21	1:10:A:GLN:HG3	3	0.13
(3,166)	1:7:A:LEU:HD22	1:10:A:GLN:HG3	3	0.13
(3,166)	1:7:A:LEU:HD23	1:10:A:GLN:HG3	3	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,147)	1:6:A:ARG:HD2	1:10:A:GLN:HG2	5	0.13
(3,147)	1:6:A:ARG:HD2	1:10:A:GLN:HG3	5	0.13
(3,145)	1:23:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD2	9	0.13
(3,131)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG13	8	0.13
(3,125)	1:8:A:TYR:HE1	1:25:A:SER:HA	2	0.13
(3,125)	1:8:A:TYR:HE2	1:25:A:SER:HA	2	0.13
(3,87)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD2	4	0.13
(3,87)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD3	4	0.13
(3,67)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG2	3	0.13
(3,67)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG3	3	0.13
(3,64)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG2	8	0.13
(3,64)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG3	8	0.13
(3,64)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG2	10	0.13
(3,64)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG3	10	0.13
(3,57)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HG3	8	0.13
(3,55)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD2	9	0.13
(3,55)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD3	9	0.13
(3,53)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD21	1	0.13
(3,53)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD22	1	0.13
(3,53)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD23	1	0.13
(3,27)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG3	2	0.13
(2,214)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HG21	1	0.13
(2,214)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HG22	1	0.13
(2,214)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HG23	1	0.13
(2,214)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HG21	8	0.13
(2,214)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HG22	8	0.13
(2,214)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HG23	8	0.13
(2,210)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG21	1	0.13
(2,210)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG22	1	0.13
(2,210)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG23	1	0.13
(2,210)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG21	1	0.13
(2,210)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG22	1	0.13
(2,210)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG23	1	0.13
(2,210)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG21	1	0.13
(2,210)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG22	1	0.13
(2,210)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG23	1	0.13
(2,210)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG21	1	0.13
(2,210)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG22	1	0.13
(2,210)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG23	1	0.13
(2,210)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG21	1	0.13
(2,210)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG22	1	0.13
(2,210)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG23	1	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,210)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG21	1	0.13
(2,210)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG22	1	0.13
(2,210)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG23	1	0.13
(2,206)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HG3	7	0.13
(2,206)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HG3	7	0.13
(2,206)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HG3	7	0.13
(2,203)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB2	1	0.13
(2,203)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB2	1	0.13
(2,203)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB2	1	0.13
(2,202)	1:7:A:LEU:HD21	1:10:A:GLN:HG2	3	0.13
(2,202)	1:7:A:LEU:HD22	1:10:A:GLN:HG2	3	0.13
(2,202)	1:7:A:LEU:HD23	1:10:A:GLN:HG2	3	0.13
(2,202)	1:7:A:LEU:HD21	1:10:A:GLN:HG3	3	0.13
(2,202)	1:7:A:LEU:HD22	1:10:A:GLN:HG3	3	0.13
(2,202)	1:7:A:LEU:HD23	1:10:A:GLN:HG3	3	0.13
(2,173)	1:6:A:ARG:HD2	1:10:A:GLN:HG2	5	0.13
(2,173)	1:6:A:ARG:HD2	1:10:A:GLN:HG3	5	0.13
(2,171)	1:23:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD2	9	0.13
(2,155)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG13	8	0.13
(2,145)	1:8:A:TYR:HE1	1:25:A:SER:HA	2	0.13
(2,145)	1:8:A:TYR:HE2	1:25:A:SER:HA	2	0.13
(2,98)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD2	4	0.13
(2,98)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD3	4	0.13
(2,76)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG2	3	0.13
(2,76)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG3	3	0.13
(2,73)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG2	8	0.13
(2,73)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG3	8	0.13
(2,73)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG2	10	0.13
(2,73)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG3	10	0.13
(2,66)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HG3	8	0.13
(2,64)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD2	9	0.13
(2,64)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD3	9	0.13
(2,62)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD21	1	0.13
(2,62)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD22	1	0.13
(2,62)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD23	1	0.13
(2,33)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG3	2	0.13
(2,29)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	2	0.13
(2,23)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD3	4	0.13
(1,204)	1:7:A:LEU:HD21	1:7:A:LEU:HG	2	0.13
(1,204)	1:7:A:LEU:HD22	1:7:A:LEU:HG	2	0.13
(1,204)	1:7:A:LEU:HD23	1:7:A:LEU:HG	2	0.13
(1,164)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HB2	8	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,161)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	1	0.13
(1,93)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	7	0.13
(1,93)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	7	0.13
(1,93)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	7	0.13
(1,74)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HB3	3	0.13
(1,74)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HB3	5	0.13
(1,74)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HB3	6	0.13
(1,74)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HB3	9	0.13
(1,74)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HB3	10	0.13
(1,68)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HE2	3	0.13
(1,68)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HE2	3	0.13
(1,61)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD11	4	0.13
(1,61)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD12	4	0.13
(1,61)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD13	4	0.13
(1,38)	1:25:A:SER:HA	1:25:A:SER:HB2	1	0.13
(1,38)	1:25:A:SER:HA	1:25:A:SER:HB3	1	0.13
(1,38)	1:25:A:SER:HA	1:25:A:SER:HB2	5	0.13
(1,38)	1:25:A:SER:HA	1:25:A:SER:HB3	5	0.13
(1,6)	1:22:A:PRO:HD3	1:22:A:PRO:HG2	1	0.13
(1,6)	1:22:A:PRO:HD3	1:22:A:PRO:HG3	1	0.13
(1,6)	1:22:A:PRO:HD3	1:22:A:PRO:HG2	2	0.13
(1,6)	1:22:A:PRO:HD3	1:22:A:PRO:HG3	2	0.13
(4,37)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD21	5	0.12
(4,37)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD22	5	0.12
(4,37)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD23	5	0.12
(4,32)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HA	5	0.12
(4,32)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HA	5	0.12
(4,32)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HA	5	0.12
(4,32)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HA	8	0.12
(4,32)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HA	8	0.12
(4,32)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HA	8	0.12
(4,19)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG2	3	0.12
(4,19)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG2	3	0.12
(3,174)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB2	1	0.12
(3,174)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB2	1	0.12
(3,174)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB2	1	0.12
(3,160)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG11	6	0.12
(3,160)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG12	6	0.12
(3,160)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG13	6	0.12
(3,160)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	6	0.12
(3,160)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	6	0.12
(3,160)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	6	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,160)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG11	10	0.12
(3,160)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG12	10	0.12
(3,160)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG13	10	0.12
(3,160)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	10	0.12
(3,160)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	10	0.12
(3,160)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	10	0.12
(3,137)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG2	8	0.12
(3,137)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG3	8	0.12
(3,128)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:H	4	0.12
(3,123)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG13	1	0.12
(3,123)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG13	1	0.12
(3,123)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG13	3	0.12
(3,123)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG13	3	0.12
(3,122)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HG13	3	0.12
(3,122)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HG13	3	0.12
(3,114)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD21	2	0.12
(3,114)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD22	2	0.12
(3,114)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD23	2	0.12
(3,87)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD2	1	0.12
(3,87)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD3	1	0.12
(3,67)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG2	6	0.12
(3,67)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG3	6	0.12
(3,64)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG2	3	0.12
(3,64)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG3	3	0.12
(3,36)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB3	6	0.12
(2,213)	1:9:A:ILE:HD11	1:13:A:LYS:HB2	1	0.12
(2,213)	1:9:A:ILE:HD12	1:13:A:LYS:HB2	1	0.12
(2,213)	1:9:A:ILE:HD13	1:13:A:LYS:HB2	1	0.12
(2,205)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD21	5	0.12
(2,205)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD22	5	0.12
(2,205)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD23	5	0.12
(2,192)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HA	5	0.12
(2,192)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HA	5	0.12
(2,192)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HA	5	0.12
(2,192)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HA	8	0.12
(2,192)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HA	8	0.12
(2,192)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HA	8	0.12
(2,191)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG11	6	0.12
(2,191)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG12	6	0.12
(2,191)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG13	6	0.12
(2,191)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	6	0.12
(2,191)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	6	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,191)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	6	0.12
(2,191)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG11	10	0.12
(2,191)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG12	10	0.12
(2,191)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG13	10	0.12
(2,191)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	10	0.12
(2,191)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	10	0.12
(2,191)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	10	0.12
(2,163)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG2	8	0.12
(2,163)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG3	8	0.12
(2,152)	1:24:A:PRO:HB2	1:25:A:SER:H	4	0.12
(2,143)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG2	3	0.12
(2,143)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG2	3	0.12
(2,140)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG13	1	0.12
(2,140)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG13	1	0.12
(2,140)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG13	3	0.12
(2,140)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG13	3	0.12
(2,139)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HG13	3	0.12
(2,139)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HG13	3	0.12
(2,130)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD21	2	0.12
(2,130)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD22	2	0.12
(2,130)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD23	2	0.12
(2,98)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD2	1	0.12
(2,98)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD3	1	0.12
(2,76)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG2	6	0.12
(2,76)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG3	6	0.12
(2,73)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG2	3	0.12
(2,73)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG3	3	0.12
(2,42)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB3	6	0.12
(1,204)	1:7:A:LEU:HD21	1:7:A:LEU:HG	10	0.12
(1,204)	1:7:A:LEU:HD22	1:7:A:LEU:HG	10	0.12
(1,204)	1:7:A:LEU:HD23	1:7:A:LEU:HG	10	0.12
(1,164)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HB2	4	0.12
(1,134)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:H	8	0.12
(1,134)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:H	8	0.12
(1,134)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:H	8	0.12
(1,134)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:H	8	0.12
(1,134)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:H	8	0.12
(1,134)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:H	8	0.12
(1,126)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD21	3	0.12
(1,126)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD22	3	0.12
(1,126)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD23	3	0.12
(1,126)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD21	3	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,126)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD22	3	0.12
(1,126)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD23	3	0.12
(1,74)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HB3	1	0.12
(1,74)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HB3	2	0.12
(1,74)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HB3	4	0.12
(1,74)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HB3	7	0.12
(1,63)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HB2	6	0.12
(1,63)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HB3	6	0.12
(1,61)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD11	7	0.12
(1,61)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD12	7	0.12
(1,61)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD13	7	0.12
(1,38)	1:25:A:SER:HA	1:25:A:SER:HB2	2	0.12
(1,38)	1:25:A:SER:HA	1:25:A:SER:HB3	2	0.12
(1,17)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	7	0.12
(1,8)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD3	3	0.12
(1,6)	1:22:A:PRO:HD3	1:22:A:PRO:HG2	4	0.12
(1,6)	1:22:A:PRO:HD3	1:22:A:PRO:HG3	4	0.12
(1,6)	1:22:A:PRO:HD3	1:22:A:PRO:HG2	5	0.12
(1,6)	1:22:A:PRO:HD3	1:22:A:PRO:HG3	5	0.12
(1,6)	1:22:A:PRO:HD3	1:22:A:PRO:HG2	8	0.12
(1,6)	1:22:A:PRO:HD3	1:22:A:PRO:HG3	8	0.12
(1,6)	1:22:A:PRO:HD3	1:22:A:PRO:HG2	9	0.12
(1,6)	1:22:A:PRO:HD3	1:22:A:PRO:HG3	9	0.12
(1,4)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD2	7	0.12
(4,19)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG2	7	0.11
(4,19)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG2	7	0.11
(4,19)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG2	8	0.11
(4,19)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG2	8	0.11
(3,175)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HG21	2	0.11
(3,175)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HG22	2	0.11
(3,175)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HG23	2	0.11
(3,175)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HG21	7	0.11
(3,175)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HG22	7	0.11
(3,175)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HG23	7	0.11
(3,175)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HG21	9	0.11
(3,175)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HG22	9	0.11
(3,175)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HG23	9	0.11
(3,172)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD11	2	0.11
(3,172)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD12	2	0.11
(3,172)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD13	2	0.11
(3,172)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD11	2	0.11
(3,172)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD12	2	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,172)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD13	2	0.11
(3,172)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD11	2	0.11
(3,172)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD12	2	0.11
(3,172)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD13	2	0.11
(3,172)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HD11	2	0.11
(3,172)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HD12	2	0.11
(3,172)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HD13	2	0.11
(3,172)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HD11	2	0.11
(3,172)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HD12	2	0.11
(3,172)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HD13	2	0.11
(3,172)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HD11	2	0.11
(3,172)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HD12	2	0.11
(3,172)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HD13	2	0.11
(3,160)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG11	5	0.11
(3,160)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG12	5	0.11
(3,160)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG13	5	0.11
(3,160)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	5	0.11
(3,160)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	5	0.11
(3,160)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	5	0.11
(3,160)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG11	9	0.11
(3,160)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG12	9	0.11
(3,160)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG13	9	0.11
(3,160)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	9	0.11
(3,160)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	9	0.11
(3,160)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	9	0.11
(3,151)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	8	0.11
(3,151)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	8	0.11
(3,151)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	8	0.11
(3,137)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG2	4	0.11
(3,137)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG3	4	0.11
(3,114)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD21	1	0.11
(3,114)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD22	1	0.11
(3,114)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD23	1	0.11
(3,110)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD11	3	0.11
(3,110)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD12	3	0.11
(3,110)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD13	3	0.11
(3,110)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD11	3	0.11
(3,110)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD12	3	0.11
(3,110)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD13	3	0.11
(3,64)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG2	2	0.11
(3,64)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG3	2	0.11
(3,64)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG2	6	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,64)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG3	6	0.11
(3,53)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD21	5	0.11
(3,53)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD22	5	0.11
(3,53)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD23	5	0.11
(3,53)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD21	8	0.11
(3,53)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD22	8	0.11
(3,53)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD23	8	0.11
(3,53)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD21	10	0.11
(3,53)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD22	10	0.11
(3,53)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD23	10	0.11
(3,39)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HG3	5	0.11
(3,27)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG3	5	0.11
(2,214)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HG21	2	0.11
(2,214)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HG22	2	0.11
(2,214)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HG23	2	0.11
(2,214)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HG21	7	0.11
(2,214)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HG22	7	0.11
(2,214)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HG23	7	0.11
(2,214)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HG21	9	0.11
(2,214)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HG22	9	0.11
(2,214)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HG23	9	0.11
(2,211)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD11	2	0.11
(2,211)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD12	2	0.11
(2,211)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HD13	2	0.11
(2,211)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD11	2	0.11
(2,211)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD12	2	0.11
(2,211)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HD13	2	0.11
(2,211)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD11	2	0.11
(2,211)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD12	2	0.11
(2,211)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HD13	2	0.11
(2,211)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HD11	2	0.11
(2,211)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HD12	2	0.11
(2,211)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HD13	2	0.11
(2,211)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HD11	2	0.11
(2,211)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HD12	2	0.11
(2,211)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HD13	2	0.11
(2,211)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HD11	2	0.11
(2,211)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HD12	2	0.11
(2,211)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HD13	2	0.11
(2,191)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG11	5	0.11
(2,191)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG12	5	0.11
(2,191)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG13	5	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,191)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	5	0.11
(2,191)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	5	0.11
(2,191)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	5	0.11
(2,191)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG11	9	0.11
(2,191)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG12	9	0.11
(2,191)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG13	9	0.11
(2,191)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	9	0.11
(2,191)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	9	0.11
(2,191)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	9	0.11
(2,179)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB1	8	0.11
(2,179)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB2	8	0.11
(2,179)	1:2:A:GLU:HB2	1:4:A:ALA:HB3	8	0.11
(2,163)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG2	4	0.11
(2,163)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG3	4	0.11
(2,143)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG2	7	0.11
(2,143)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG2	7	0.11
(2,143)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG2	8	0.11
(2,143)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG2	8	0.11
(2,130)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD21	1	0.11
(2,130)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD22	1	0.11
(2,130)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HD23	1	0.11
(2,125)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD11	3	0.11
(2,125)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD12	3	0.11
(2,125)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD13	3	0.11
(2,125)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD11	3	0.11
(2,125)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD12	3	0.11
(2,125)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD13	3	0.11
(2,73)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG2	2	0.11
(2,73)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG3	2	0.11
(2,73)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG2	6	0.11
(2,73)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG3	6	0.11
(2,62)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD21	5	0.11
(2,62)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD22	5	0.11
(2,62)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD23	5	0.11
(2,62)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD21	8	0.11
(2,62)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD22	8	0.11
(2,62)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD23	8	0.11
(2,62)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD21	10	0.11
(2,62)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD22	10	0.11
(2,62)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD23	10	0.11
(2,45)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HG3	5	0.11
(2,33)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG3	5	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,204)	1:7:A:LEU:HD21	1:7:A:LEU:HG	8	0.11
(1,204)	1:7:A:LEU:HD22	1:7:A:LEU:HG	8	0.11
(1,204)	1:7:A:LEU:HD23	1:7:A:LEU:HG	8	0.11
(1,204)	1:7:A:LEU:HD21	1:7:A:LEU:HG	9	0.11
(1,204)	1:7:A:LEU:HD22	1:7:A:LEU:HG	9	0.11
(1,204)	1:7:A:LEU:HD23	1:7:A:LEU:HG	9	0.11
(1,189)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	6	0.11
(1,189)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	6	0.11
(1,189)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	6	0.11
(1,189)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HB2	6	0.11
(1,189)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HB2	6	0.11
(1,189)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HB2	6	0.11
(1,136)	1:8:A:TYR:HD1	1:23:A:PRO:HB3	2	0.11
(1,136)	1:8:A:TYR:HD2	1:23:A:PRO:HB3	2	0.11
(1,136)	1:8:A:TYR:HD1	1:23:A:PRO:HB3	6	0.11
(1,136)	1:8:A:TYR:HD2	1:23:A:PRO:HB3	6	0.11
(1,136)	1:8:A:TYR:HD1	1:23:A:PRO:HB3	7	0.11
(1,136)	1:8:A:TYR:HD2	1:23:A:PRO:HB3	7	0.11
(1,124)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	6	0.11
(1,124)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	6	0.11
(1,124)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	6	0.11
(1,124)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	6	0.11
(1,124)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	6	0.11
(1,124)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	6	0.11
(1,124)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HD1	6	0.11
(1,124)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HD2	6	0.11
(1,124)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HD1	6	0.11
(1,124)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HD2	6	0.11
(1,124)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HD1	6	0.11
(1,124)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HD2	6	0.11
(1,99)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD2	2	0.11
(1,99)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HD3	2	0.11
(1,80)	1:10:A:GLN:HB3	1:10:A:GLN:HG2	10	0.11
(1,80)	1:10:A:GLN:HB3	1:10:A:GLN:HG3	10	0.11
(1,61)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD11	6	0.11
(1,61)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD12	6	0.11
(1,61)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD13	6	0.11
(1,55)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HD1	3	0.11
(1,55)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HD2	3	0.11
(1,55)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HD1	5	0.11
(1,55)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HD2	5	0.11
(1,38)	1:25:A:SER:HA	1:25:A:SER:HB2	3	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,38)	1:25:A:SER:HA	1:25:A:SER:HB3	3	0.11
(1,38)	1:25:A:SER:HA	1:25:A:SER:HB2	6	0.11
(1,38)	1:25:A:SER:HA	1:25:A:SER:HB3	6	0.11
(1,38)	1:25:A:SER:HA	1:25:A:SER:HB2	7	0.11
(1,38)	1:25:A:SER:HA	1:25:A:SER:HB3	7	0.11
(1,6)	1:22:A:PRO:HD3	1:22:A:PRO:HG2	10	0.11
(1,6)	1:22:A:PRO:HD3	1:22:A:PRO:HG3	10	0.11
(4,23)	1:11:A:TRP:HD1	1:23:A:PRO:HA	2	0.1
(3,180)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG21	4	0.1
(3,180)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG22	4	0.1
(3,180)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG23	4	0.1
(3,176)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HE2	1	0.1
(3,176)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HE2	1	0.1
(3,176)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HE2	1	0.1
(3,176)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HE2	5	0.1
(3,176)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HE2	5	0.1
(3,176)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HE2	5	0.1
(3,173)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG21	1	0.1
(3,173)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG22	1	0.1
(3,173)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG23	1	0.1
(3,169)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HG3	4	0.1
(3,169)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HG3	4	0.1
(3,169)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HG3	4	0.1
(3,131)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG13	4	0.1
(3,67)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG2	2	0.1
(3,67)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG3	2	0.1
(3,55)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD2	10	0.1
(3,55)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD3	10	0.1
(2,219)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG21	4	0.1
(2,219)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG22	4	0.1
(2,219)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG23	4	0.1
(2,215)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HE2	1	0.1
(2,215)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HE2	1	0.1
(2,215)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HE2	1	0.1
(2,215)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HE2	5	0.1
(2,215)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HE2	5	0.1
(2,215)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HE2	5	0.1
(2,212)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG21	1	0.1
(2,212)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG22	1	0.1
(2,212)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HG23	1	0.1
(2,206)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HG3	4	0.1
(2,206)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HG3	4	0.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,206)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HG3	4	0.1
(2,155)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG13	4	0.1
(2,149)	1:11:A:TRP:HD1	1:23:A:PRO:HA	2	0.1
(2,76)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG2	2	0.1
(2,76)	1:10:A:GLN:HA	1:10:A:GLN:HG3	2	0.1
(2,64)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD2	10	0.1
(2,64)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD3	10	0.1
(1,204)	1:7:A:LEU:HD21	1:7:A:LEU:HG	1	0.1
(1,204)	1:7:A:LEU:HD22	1:7:A:LEU:HG	1	0.1
(1,204)	1:7:A:LEU:HD23	1:7:A:LEU:HG	1	0.1
(1,124)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	10	0.1
(1,124)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	10	0.1
(1,124)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	10	0.1
(1,124)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	10	0.1
(1,124)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	10	0.1
(1,124)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	10	0.1
(1,124)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HD1	10	0.1
(1,124)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HD2	10	0.1
(1,124)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HD1	10	0.1
(1,124)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HD2	10	0.1
(1,124)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HD1	10	0.1
(1,124)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HD2	10	0.1
(1,88)	1:8:A:TYR:HD1	1:8:A:TYR:HE1	5	0.1
(1,88)	1:8:A:TYR:HD1	1:8:A:TYR:HE2	5	0.1
(1,88)	1:8:A:TYR:HD2	1:8:A:TYR:HE1	5	0.1
(1,88)	1:8:A:TYR:HD2	1:8:A:TYR:HE2	5	0.1
(1,88)	1:8:A:TYR:HD1	1:8:A:TYR:HE1	10	0.1
(1,88)	1:8:A:TYR:HD1	1:8:A:TYR:HE2	10	0.1
(1,88)	1:8:A:TYR:HD2	1:8:A:TYR:HE1	10	0.1
(1,88)	1:8:A:TYR:HD2	1:8:A:TYR:HE2	10	0.1
(1,80)	1:10:A:GLN:HB3	1:10:A:GLN:HG2	8	0.1
(1,80)	1:10:A:GLN:HB3	1:10:A:GLN:HG3	8	0.1
(1,70)	1:13:A:LYS:HE2	1:13:A:LYS:HG3	1	0.1
(1,36)	1:24:A:PRO:HD3	1:24:A:PRO:HG2	2	0.1
(1,6)	1:22:A:PRO:HD3	1:22:A:PRO:HG2	7	0.1
(1,6)	1:22:A:PRO:HD3	1:22:A:PRO:HG3	7	0.1

10 Dihedral-angle violation analysis ⓘ

No dihedral-angle restraints found