



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 10, 2026 – 10:23 AM UTC

PDB ID : 9G31 / pdb_00009g31
BMRB ID : 34935
Title : Trp-cage fortified Tc5b-Exenatide chimera (Ex-4-Tc5bDR) at 310K
Authors : Horvath, D.
Deposited on : 2024-07-11

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

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

A user guide is available at

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

with specific help available everywhere you see the ⓘ 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

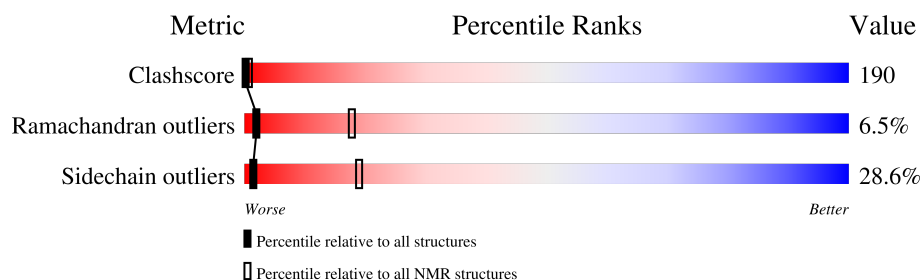
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment is 51%.

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	20% 36% 32% 12%

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: *closest to the average*.

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:1-A:25 (25)	0.34	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 1 clusters and 7 single-model clusters were found.

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

3 Entry composition

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

- Molecule 1 is a protein called Exendin-4.

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

There are 4 discrepancies between the modelled and reference sequences:

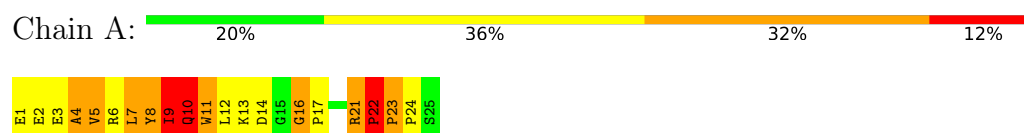
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	8	TYR	PHE	engineered mutation	UNP P26349
A	10	GLN	GLU	engineered mutation	UNP P26349
A	14	ASP	ASN	engineered mutation	UNP P26349
A	21	ARG	ALA	engineered mutation	UNP P26349

4 Residue-property plots [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

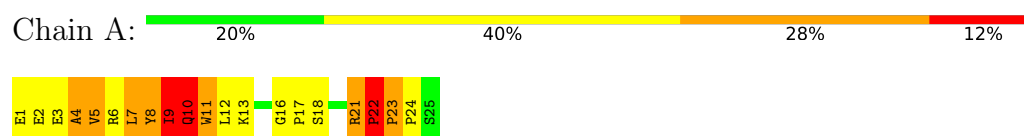


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

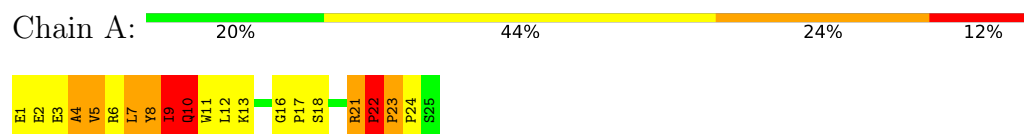
4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: Exendin-4



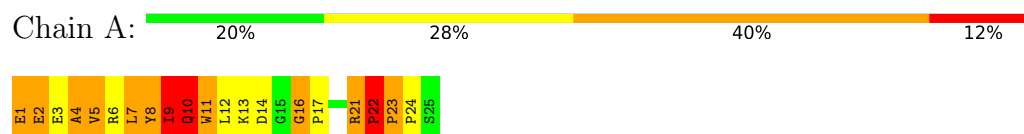
4.2.2 Score per residue for model 2 (medoid)

- Molecule 1: Exendin-4



4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Exendin-4



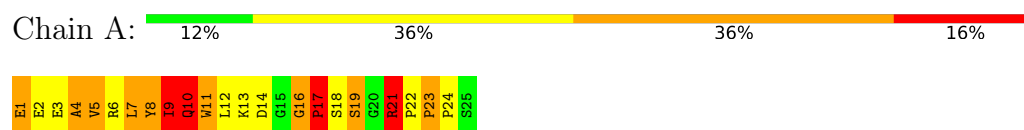
4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Exendin-4



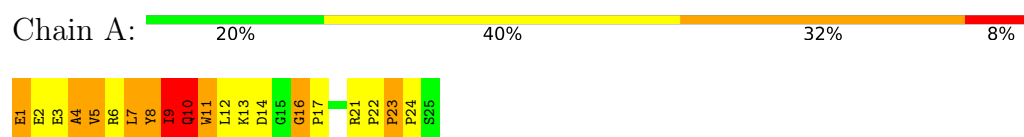
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Exendin-4



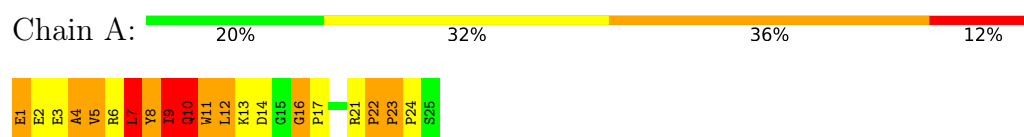
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Exendin-4



4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: Exendin-4



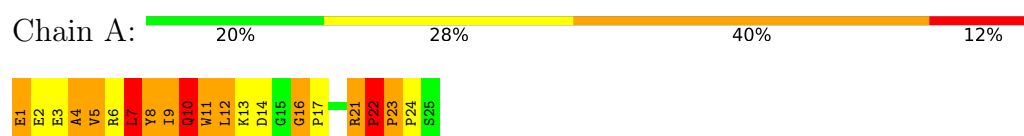
4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: Exendin-4



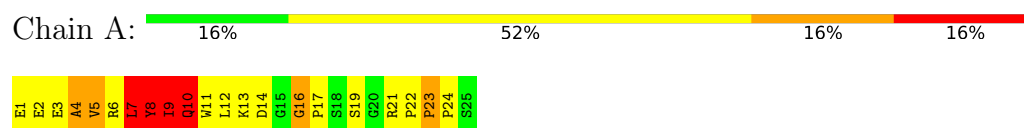
4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: Exendin-4



4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: Exendin-4



5 Refinement protocol and experimental data overview

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

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

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

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

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

Chemical shift file(s)	working_cs.cif
Number of chemical shift lists	1
Total number of shifts	167
Number of shifts mapped to atoms	167
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Assignment completeness (well-defined parts)	51%

6 Model quality i

6.1 Standard geometry i

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	#Z>5	RMSZ	#Z>5
1	A	2.12±0.11	7±1/202 (3.3± 0.6%)	2.23±0.08	15±3/273 (5.4± 1.0%)
All	All	2.12	66/2020 (3.3%)	2.24	148/2730 (5.4%)

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

Mol	Chain	Chirality	Planarity
1	A	0.0±0.0	0.1±0.3
All	All	0	1

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	CA-C	-13.34	1.43	1.52	8	10
1	A	8	TYR	CE1-CZ	10.47	1.63	1.38	4	3
1	A	8	TYR	CE2-CZ	-9.63	1.15	1.38	4	1
1	A	8	TYR	C-O	-8.48	1.13	1.24	10	10
1	A	9	ILE	CA-CB	-8.11	1.42	1.54	8	10
1	A	10	GLN	N-CA	-6.62	1.38	1.46	9	8
1	A	9	ILE	CA-C	-6.41	1.43	1.52	2	10
1	A	9	ILE	C-N	-5.76	1.26	1.33	10	3
1	A	11	TRP	CG-CD2	-5.38	1.34	1.43	9	2
1	A	9	ILE	N-CA	-5.36	1.39	1.46	6	2
1	A	8	TYR	N-CA	-5.34	1.40	1.46	8	1
1	A	22	PRO	CA-CB	-5.26	1.46	1.54	6	3
1	A	8	TYR	C-N	-5.24	1.27	1.33	6	2
1	A	16	GLY	C-N	-5.13	1.28	1.34	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	23	PRO	O-C-N	9.30	125.59	121.31	3	6
1	A	16	GLY	CA-C-N	8.92	131.00	119.84	5	4
1	A	16	GLY	C-N-CA	8.92	131.00	119.84	5	4
1	A	23	PRO	CA-C-N	8.65	128.24	119.24	5	10
1	A	23	PRO	C-N-CA	8.65	128.24	119.24	5	10
1	A	10	GLN	N-CA-CB	-7.46	99.25	110.07	9	10
1	A	9	ILE	O-C-N	7.36	129.30	121.87	9	9
1	A	4	ALA	N-CA-C	-7.09	104.44	113.23	4	10
1	A	22	PRO	CA-C-N	7.09	124.83	119.66	3	8
1	A	22	PRO	C-N-CA	7.09	124.83	119.66	3	8
1	A	21	ARG	CA-C-N	6.68	127.26	120.38	7	9
1	A	21	ARG	C-N-CA	6.68	127.26	120.38	7	9
1	A	23	PRO	N-CA-C	6.43	116.64	110.47	7	7
1	A	9	ILE	CA-C-N	6.38	129.12	120.44	9	6
1	A	9	ILE	C-N-CA	6.38	129.12	120.44	9	6
1	A	22	PRO	N-CA-CB	-6.23	97.04	103.08	4	7
1	A	9	ILE	N-CA-CB	-6.13	100.92	110.54	10	8
1	A	16	GLY	O-C-N	5.91	127.68	121.77	5	1
1	A	9	ILE	CA-CB-CG1	-5.86	100.45	110.40	8	4
1	A	11	TRP	N-CA-C	-5.84	105.05	111.82	6	5
1	A	8	TYR	OH-CZ-CE2	5.80	137.31	119.90	4	1
1	A	8	TYR	CE1-CZ-OH	-5.57	103.18	119.90	4	1
1	A	7	LEU	CA-C-O	5.43	124.88	118.90	10	4
1	A	7	LEU	N-CA-CB	-5.31	103.97	110.98	7	1

There are no chirality outliers.

All unique planar outliers are listed below.

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

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.

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
-----	-------	-------	----------	----------	---------

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	196	189	189	66±33
All	All	1960	1890	1512	661

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 190.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:7:LEU:HD13	1:A:24:PRO:HB3	0.93	1.40	1	8
1:A:11:TRP:CH2	1:A:17:PRO:HD3	0.91	2.01	5	8
1:A:12:LEU:HD23	1:A:16:GLY:CA	0.90	1.95	5	5
1:A:7:LEU:HD13	1:A:24:PRO:CB	0.85	2.01	10	8
1:A:9:ILE:O	1:A:13:LYS:HG3	0.85	1.71	7	7
1:A:5:VAL:HA	1:A:8:TYR:HB3	0.84	1.50	9	8
1:A:12:LEU:HD23	1:A:16:GLY:HA2	0.81	1.50	5	1
1:A:5:VAL:HG23	1:A:9:ILE:HD12	0.80	1.52	9	8
1:A:9:ILE:HA	1:A:12:LEU:HB2	0.80	1.54	10	8
1:A:11:TRP:CE3	1:A:12:LEU:HD22	0.79	2.11	10	3
1:A:5:VAL:CA	1:A:8:TYR:HB3	0.76	2.08	7	8
1:A:12:LEU:HD23	1:A:16:GLY:HA3	0.75	1.56	2	5
1:A:12:LEU:HA	1:A:16:GLY:N	0.75	1.97	3	8
1:A:3:GLU:O	1:A:7:LEU:HD21	0.74	1.83	7	8
1:A:5:VAL:HG23	1:A:9:ILE:CD1	0.74	2.13	10	8
1:A:4:ALA:HB3	1:A:5:VAL:HG12	0.72	1.59	2	8
1:A:8:TYR:C	1:A:12:LEU:HD23	0.72	2.08	10	3
1:A:9:ILE:CA	1:A:12:LEU:HB2	0.72	2.13	10	8
1:A:12:LEU:HD13	1:A:16:GLY:CA	0.72	2.14	9	3
1:A:7:LEU:HD12	1:A:7:LEU:H	0.71	1.46	3	8
1:A:9:ILE:C	1:A:12:LEU:HB2	0.71	2.10	10	8
1:A:8:TYR:CD2	1:A:24:PRO:HG3	0.71	2.21	9	8
1:A:11:TRP:CE3	1:A:12:LEU:HG	0.71	2.21	5	5
1:A:10:GLN:O	1:A:13:LYS:HB2	0.70	1.87	7	8
1:A:9:ILE:N	1:A:12:LEU:HD23	0.69	2.02	7	2
1:A:1:GLU:HB2	1:A:5:VAL:HG11	0.69	1.64	5	8
1:A:8:TYR:CB	1:A:24:PRO:HG3	0.68	2.17	10	8
1:A:3:GLU:HG2	1:A:7:LEU:CD2	0.68	2.19	10	3
1:A:11:TRP:CE3	1:A:12:LEU:CD2	0.68	2.77	10	3
1:A:11:TRP:CH2	1:A:17:PRO:CD	0.66	2.78	5	8
1:A:9:ILE:O	1:A:13:LYS:HD3	0.66	1.90	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:C	1:A:8:TYR:HB3	0.65	2.16	10	8
1:A:8:TYR:CE2	1:A:12:LEU:HD21	0.65	2.26	9	3
1:A:8:TYR:O	1:A:11:TRP:HB3	0.64	1.90	9	8
1:A:11:TRP:CZ2	1:A:17:PRO:HA	0.64	2.27	5	1
1:A:12:LEU:HD13	1:A:16:GLY:HA3	0.64	1.70	10	3
1:A:5:VAL:CG2	1:A:9:ILE:HD12	0.64	2.23	9	8
1:A:5:VAL:HG22	1:A:6:ARG:N	0.63	2.07	10	8
1:A:3:GLU:HG2	1:A:7:LEU:HG	0.63	1.71	10	8
1:A:11:TRP:HE3	1:A:12:LEU:HD22	0.62	1.54	7	3
1:A:5:VAL:HA	1:A:8:TYR:CB	0.62	2.24	6	8
1:A:7:LEU:HD12	1:A:8:TYR:N	0.62	2.09	9	8
1:A:8:TYR:O	1:A:12:LEU:N	0.62	2.31	10	8
1:A:12:LEU:HA	1:A:16:GLY:H	0.60	1.56	2	7
1:A:16:GLY:O	1:A:19:SER:HB2	0.60	1.97	10	1
1:A:12:LEU:CD1	1:A:16:GLY:HA3	0.58	2.28	9	2
1:A:8:TYR:O	1:A:12:LEU:HG	0.58	1.99	5	5
1:A:9:ILE:O	1:A:13:LYS:N	0.58	2.37	10	8
1:A:5:VAL:O	1:A:8:TYR:HB3	0.57	1.99	10	8
1:A:3:GLU:HG2	1:A:7:LEU:CG	0.57	2.28	10	8
1:A:11:TRP:CZ3	1:A:17:PRO:HD3	0.57	2.33	5	1
1:A:10:GLN:HE21	1:A:10:GLN:N	0.57	1.98	7	8
1:A:8:TYR:O	1:A:11:TRP:N	0.57	2.38	7	3
1:A:8:TYR:HB2	1:A:24:PRO:HG3	0.56	1.76	10	8
1:A:3:GLU:HG3	1:A:6:ARG:CB	0.56	2.30	9	6
1:A:8:TYR:O	1:A:12:LEU:HD22	0.56	2.01	9	2
1:A:7:LEU:H	1:A:7:LEU:CD1	0.56	2.12	10	8
1:A:8:TYR:C	1:A:12:LEU:CD2	0.56	2.79	7	3
1:A:12:LEU:CD2	1:A:16:GLY:HA3	0.56	2.30	6	2
1:A:10:GLN:HA	1:A:13:LYS:CD	0.56	2.30	7	7
1:A:11:TRP:CE2	1:A:23:PRO:HA	0.56	2.36	5	8
1:A:5:VAL:O	1:A:9:ILE:N	0.55	2.40	10	5
1:A:8:TYR:CA	1:A:24:PRO:HG3	0.55	2.32	6	8
1:A:4:ALA:C	1:A:7:LEU:HD11	0.54	2.28	6	6
1:A:10:GLN:HA	1:A:13:LYS:HD3	0.54	1.80	6	1
1:A:10:GLN:C	1:A:13:LYS:HB2	0.54	2.27	6	1
1:A:11:TRP:CZ2	1:A:23:PRO:CG	0.53	2.92	1	8
1:A:7:LEU:HD13	1:A:24:PRO:HB2	0.53	1.77	5	5
1:A:8:TYR:HD2	1:A:24:PRO:HG3	0.53	1.62	7	8
1:A:11:TRP:CZ2	1:A:23:PRO:HG3	0.53	2.38	1	5
1:A:5:VAL:HA	1:A:8:TYR:CD1	0.53	2.38	10	8
1:A:8:TYR:O	1:A:12:LEU:CD2	0.53	2.56	9	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:5:VAL:HG23	1:A:9:ILE:CG1	0.52	2.34	3	8
1:A:3:GLU:HG3	1:A:6:ARG:HB2	0.52	1.81	7	8
1:A:8:TYR:O	1:A:11:TRP:HE3	0.52	1.88	5	5
1:A:8:TYR:HA	1:A:24:PRO:HG3	0.52	1.81	9	8
1:A:7:LEU:O	1:A:11:TRP:HB2	0.52	2.04	3	6
1:A:11:TRP:CH2	1:A:23:PRO:HB3	0.51	2.41	9	4
1:A:9:ILE:CA	1:A:12:LEU:HD23	0.51	2.36	7	3
1:A:9:ILE:HA	1:A:12:LEU:HD23	0.51	1.82	9	1
1:A:7:LEU:CD1	1:A:24:PRO:HB3	0.51	2.29	7	3
1:A:8:TYR:CE2	1:A:12:LEU:HD11	0.51	2.41	2	5
1:A:8:TYR:O	1:A:12:LEU:CG	0.50	2.59	5	5
1:A:2:GLU:CG	1:A:4:ALA:HB2	0.50	2.36	10	8
1:A:11:TRP:HZ2	1:A:17:PRO:HA	0.50	1.66	5	1
1:A:8:TYR:C	1:A:10:GLN:N	0.50	2.66	7	3
1:A:9:ILE:O	1:A:12:LEU:HB2	0.50	2.07	10	7
1:A:8:TYR:C	1:A:12:LEU:HD12	0.50	2.32	2	5
1:A:8:TYR:CD2	1:A:24:PRO:CG	0.50	2.94	5	8
1:A:12:LEU:CD2	1:A:16:GLY:HA2	0.49	2.32	5	1
1:A:8:TYR:CD2	1:A:12:LEU:HD21	0.49	2.41	9	2
1:A:3:GLU:HA	1:A:6:ARG:HB2	0.49	1.83	5	6
1:A:8:TYR:HD2	1:A:24:PRO:CG	0.48	2.21	10	8
1:A:16:GLY:O	1:A:18:SER:N	0.48	2.45	5	1
1:A:9:ILE:O	1:A:13:LYS:CD	0.48	2.59	6	1
1:A:9:ILE:HA	1:A:12:LEU:HD12	0.48	1.84	5	4
1:A:10:GLN:NE2	1:A:13:LYS:HD2	0.48	2.24	2	5
1:A:8:TYR:CE2	1:A:11:TRP:HZ3	0.47	2.26	10	1
1:A:12:LEU:C	1:A:14:ASP:N	0.47	2.72	6	2
1:A:2:GLU:CD	1:A:4:ALA:HB2	0.47	2.34	2	4
1:A:11:TRP:CZ2	1:A:16:GLY:C	0.47	2.93	3	6
1:A:11:TRP:CD2	1:A:23:PRO:HA	0.47	2.45	1	7
1:A:16:GLY:C	1:A:18:SER:H	0.47	2.17	2	1
1:A:11:TRP:O	1:A:14:ASP:HB3	0.46	2.10	5	1
1:A:10:GLN:HA	1:A:13:LYS:HD2	0.46	1.87	1	7
1:A:1:GLU:CB	1:A:5:VAL:HG11	0.46	2.41	10	6
1:A:10:GLN:HA	1:A:13:LYS:HB2	0.46	1.87	6	2
1:A:12:LEU:HD13	1:A:16:GLY:HA2	0.46	1.84	9	2
1:A:11:TRP:CZ2	1:A:17:PRO:N	0.45	2.84	3	7
1:A:7:LEU:CD1	1:A:8:TYR:HB2	0.45	2.41	1	3
1:A:21:ARG:CB	1:A:22:PRO:CD	0.45	2.94	1	3
1:A:5:VAL:CG2	1:A:9:ILE:CD1	0.45	2.93	9	3
1:A:11:TRP:CE2	1:A:23:PRO:CA	0.44	3.00	6	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:3:GLU:HG2	1:A:7:LEU:HD23	0.44	1.89	10	2
1:A:8:TYR:CE2	1:A:11:TRP:CZ3	0.44	3.05	10	1
1:A:11:TRP:HE3	1:A:12:LEU:CD2	0.44	2.18	10	2
1:A:8:TYR:HA	1:A:24:PRO:CG	0.44	2.42	9	5
1:A:7:LEU:HD12	1:A:8:TYR:CB	0.44	2.42	7	3
1:A:10:GLN:HA	1:A:13:LYS:CG	0.44	2.42	2	7
1:A:11:TRP:CZ2	1:A:23:PRO:CD	0.44	3.01	7	4
1:A:9:ILE:HA	1:A:12:LEU:CB	0.44	2.35	10	1
1:A:11:TRP:CD1	1:A:21:ARG:HG2	0.43	2.48	5	1
1:A:14:ASP:HB3	1:A:19:SER:OG	0.43	2.13	10	1
1:A:7:LEU:HD12	1:A:8:TYR:HB2	0.43	1.91	1	2
1:A:1:GLU:HB2	1:A:5:VAL:CG1	0.43	2.40	5	3
1:A:16:GLY:C	1:A:18:SER:N	0.43	2.76	2	2
1:A:11:TRP:CD2	1:A:16:GLY:HA2	0.42	2.49	3	2
1:A:8:TYR:O	1:A:12:LEU:HD23	0.42	2.10	10	1
1:A:5:VAL:C	1:A:7:LEU:H	0.42	2.22	5	5
1:A:11:TRP:CH2	1:A:23:PRO:HG3	0.42	2.49	3	1
1:A:9:ILE:CA	1:A:12:LEU:HD12	0.42	2.44	5	1
1:A:8:TYR:HA	1:A:24:PRO:CD	0.42	2.45	3	1
1:A:8:TYR:CG	1:A:9:ILE:N	0.42	2.85	7	1
1:A:12:LEU:HD22	1:A:12:LEU:N	0.41	2.30	7	1
1:A:21:ARG:HB2	1:A:22:PRO:HD2	0.41	1.92	2	1
1:A:21:ARG:HB2	1:A:22:PRO:CD	0.41	2.45	2	2
1:A:3:GLU:CG	1:A:7:LEU:HG	0.41	2.42	9	1
1:A:8:TYR:CG	1:A:24:PRO:HG3	0.41	2.49	2	4
1:A:5:VAL:HA	1:A:8:TYR:HD1	0.41	1.76	10	2
1:A:9:ILE:C	1:A:13:LYS:HD3	0.41	2.41	6	1
1:A:8:TYR:CD2	1:A:12:LEU:CD2	0.41	3.03	9	1
1:A:21:ARG:HG3	1:A:22:PRO:N	0.41	2.29	9	1
1:A:1:GLU:O	1:A:2:GLU:HB3	0.40	2.16	3	1
1:A:11:TRP:NE1	1:A:22:PRO:C	0.40	2.79	1	2
1:A:12:LEU:HD21	1:A:17:PRO:HD3	0.40	1.92	6	1
1:A:5:VAL:HG22	1:A:6:ARG:HG2	0.40	1.93	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%)	17±1 (73±5%)	5±1 (21±5%)	2±1 (7±4%)	2	18
All	All	230/250 (92%)	167 (73%)	48 (21%)	15 (7%)	2	18

All 6 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	22	PRO	7
1	A	16	GLY	3
1	A	17	PRO	2
1	A	2	GLU	1
1	A	19	SER	1
1	A	9	ILE	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±1 (71±4%)	6±1 (29±4%)	1	19
All	All	210/210 (100%)	150 (71%)	60 (29%)	1	19

All 11 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	10	GLN	10
1	A	9	ILE	9
1	A	1	GLU	6
1	A	22	PRO	5
1	A	21	ARG	3
1	A	14	ASP	3
1	A	12	LEU	2
1	A	17	PRO	1
1	A	19	SER	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 51% for the well-defined parts and 51% for the entire structure.

7.1 Chemical shift list 1

File name: working_cs.cif

Chemical shift list name: *nef_chemical_shift_list_ShiftList_1*

7.1.1 Bookkeeping [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	167
Number of shifts mapped to atoms	167
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 51%, i.e. 167 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 329. 0 out of 3 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	¹ H	¹³ C	¹⁵ N
Backbone	46/120 (38%)	46/49 (94%)	0/50 (0%)	0/21 (0%)
Sidechain	111/188 (59%)	111/121 (92%)	0/59 (0%)	0/8 (0%)
Aromatic	10/21 (48%)	10/10 (100%)	0/10 (0%)	0/1 (0%)
Overall	167/329 (51%)	167/180 (93%)	0/119 (0%)	0/30 (0%)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 51%, i.e. 167 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 329. 0 out of 3 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	¹ H	¹³ C	¹⁵ N
Backbone	46/120 (38%)	46/49 (94%)	0/50 (0%)	0/21 (0%)
Sidechain	111/188 (59%)	111/121 (92%)	0/59 (0%)	0/8 (0%)
Aromatic	10/21 (48%)	10/10 (100%)	0/10 (0%)	0/1 (0%)
Overall	167/329 (51%)	167/180 (93%)	0/119 (0%)	0/30 (0%)

7.1.4 Statistically unusual chemical shifts [i](#)

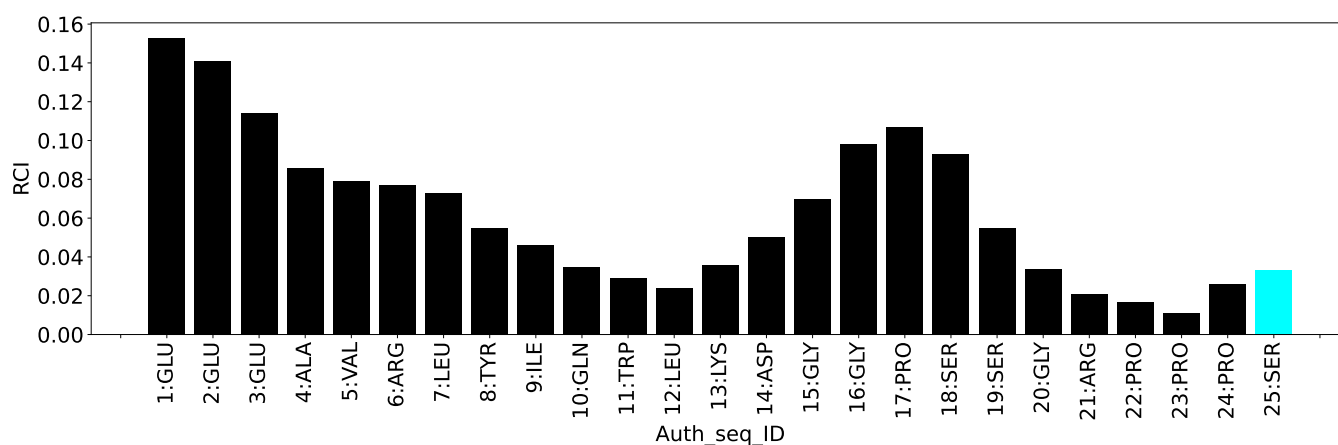
The following table lists the statistically unusual chemical shifts. These are statistical measures, and large deviations from the mean do not necessarily imply incorrect assignments. Molecules containing paramagnetic centres or hemes are expected to give rise to anomalous chemical shifts.

List Id	Chain	Res	Type	Atom	Shift, ppm	Expected range, ppm	Z-score
1	A	16	GLY	HA2	1.23	2.15 – 5.77	-7.5

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	1364
Intra-residue ($ i-j =0$)	572
Sequential ($ i-j =1$)	296
Medium range ($ i-j >1$ and $ i-j <5$)	318
Long range ($ i-j \geq 5$)	178
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	54.6
Number of long range restraints per residue ¹	7.1

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

8.2 Residual restraint violations

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

8.2.1 Average number of distance violations per model

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

Bins (Å)	Average number of violations per model	Max (Å)
0.1-0.2 (Small)	99.4	0.2
0.2-0.5 (Medium)	203.8	0.5
>0.5 (Large)	277.6	3.84

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 ⓘ

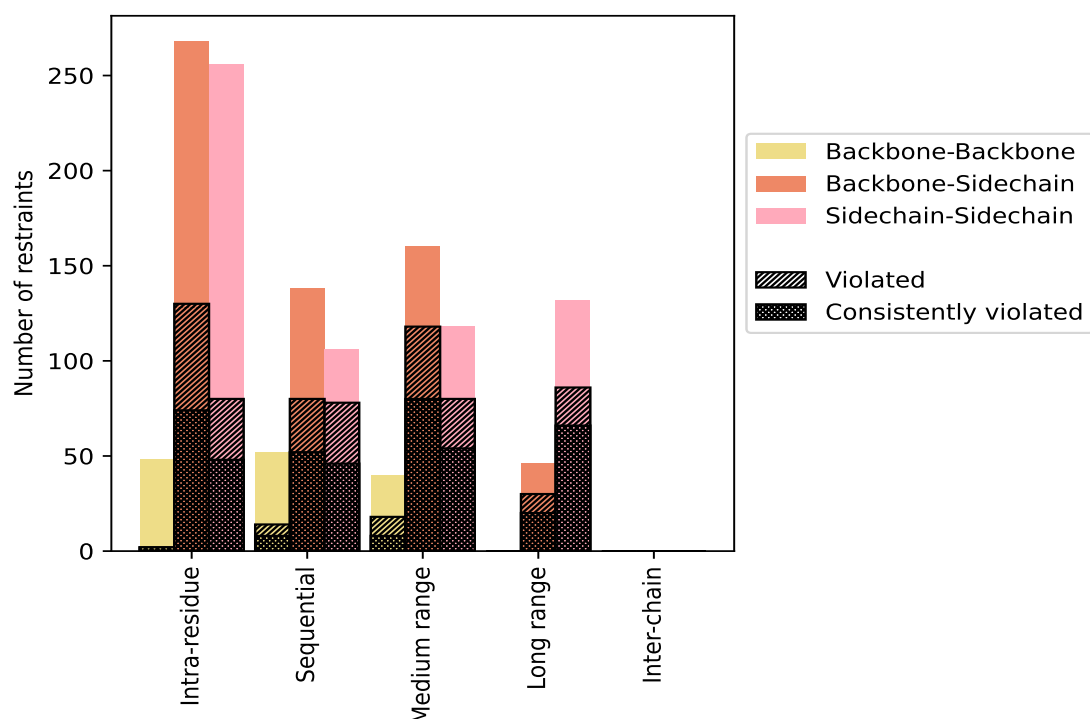
9.1 Summary of distance violations ⓘ

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.

Restraints type	Count	% ¹	Violated ³			Consistently Violated ⁴		
			Count	% ²	% ¹	Count	% ²	% ¹
Intra-residue (i-j =0)	572	41.9	212	37.1	15.5	124	21.7	9.1
Backbone-Backbone	48	3.5	2	4.2	0.1	2	4.2	0.1
Backbone-Sidechain	268	19.6	130	48.5	9.5	74	27.6	5.4
Sidechain-Sidechain	256	18.8	80	31.2	5.9	48	18.8	3.5
Sequential (i-j =1)	296	21.7	172	58.1	12.6	106	35.8	7.8
Backbone-Backbone	52	3.8	14	26.9	1.0	8	15.4	0.6
Backbone-Sidechain	138	10.1	80	58.0	5.9	52	37.7	3.8
Sidechain-Sidechain	106	7.8	78	73.6	5.7	46	43.4	3.4
Medium range (i-j >1 & i-j <5)	318	23.3	216	67.9	15.8	142	44.7	10.4
Backbone-Backbone	40	2.9	18	45.0	1.3	8	20.0	0.6
Backbone-Sidechain	160	11.7	118	73.8	8.7	80	50.0	5.9
Sidechain-Sidechain	118	8.7	80	67.8	5.9	54	45.8	4.0
Long range (i-j ≥5)	178	13.0	116	65.2	8.5	86	48.3	6.3
Backbone-Backbone	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	46	3.4	30	65.2	2.2	20	43.5	1.5
Sidechain-Sidechain	132	9.7	86	65.2	6.3	66	50.0	4.8
Inter-chain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Backbone	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Hydrogen bond	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	1364	100.0	716	52.5	52.5	458	33.6	33.6
Backbone-Backbone	140	10.3	34	24.3	2.5	18	12.9	1.3
Backbone-Sidechain	612	44.9	358	58.5	26.2	226	36.9	16.6
Sidechain-Sidechain	612	44.9	324	52.9	23.8	214	35.0	15.7

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

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



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

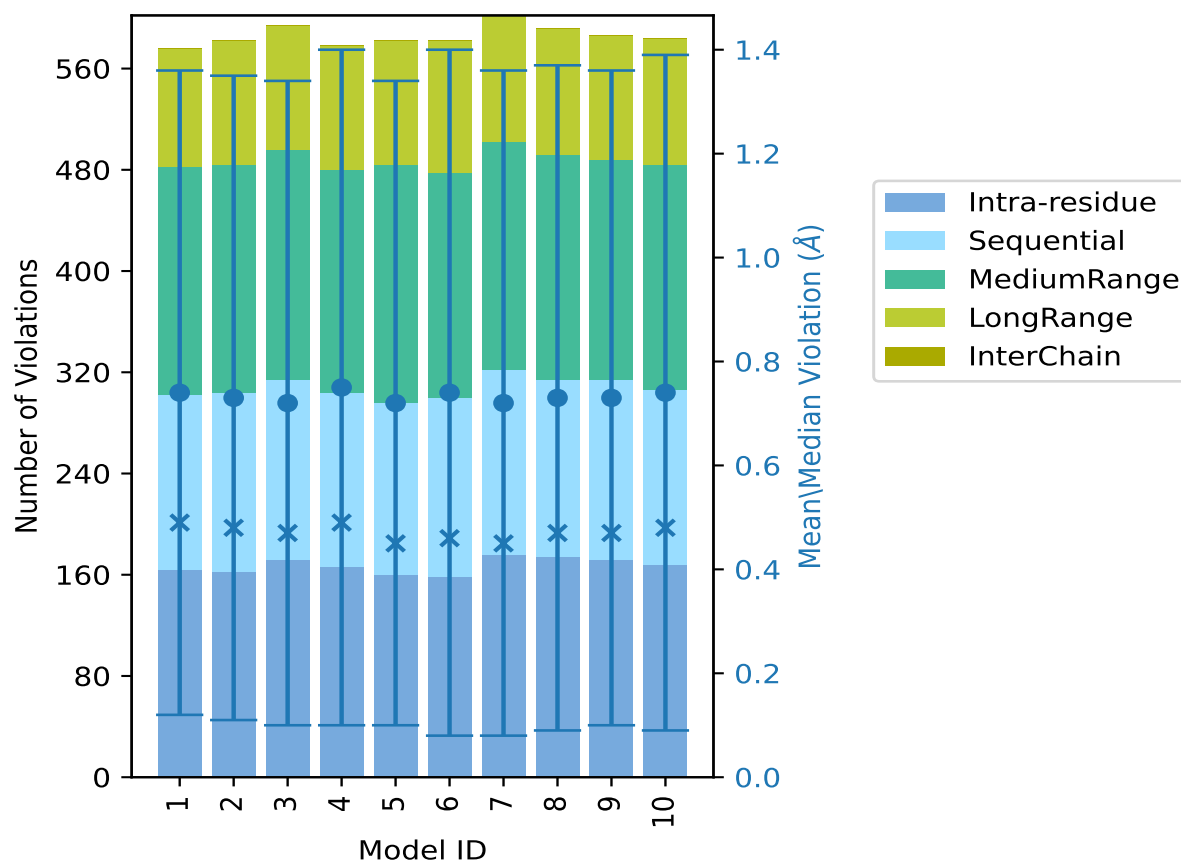
9.2 Distance violation statistics for each model [i](#)

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

Model ID	Number of violations						Mean (Å)	Max (Å)	SD ⁶ (Å)	Median (Å)
	IR ¹	SQ ²	MR ³	LR ⁴	IC ⁵	Total				
1	164	138	180	94	0	576	0.74	3.35	0.62	0.49
2	162	142	180	98	0	582	0.73	3.34	0.62	0.48
3	172	142	182	98	0	594	0.72	3.37	0.62	0.47
4	166	138	176	98	0	578	0.75	3.56	0.65	0.49
5	160	136	188	98	0	582	0.72	3.36	0.62	0.45
6	158	142	178	104	0	582	0.74	3.61	0.66	0.46
7	176	146	180	100	0	602	0.72	3.84	0.64	0.45
8	174	140	178	100	0	592	0.73	3.69	0.64	0.47
9	172	142	174	98	0	586	0.73	3.79	0.63	0.47
10	168	138	178	100	0	584	0.74	3.67	0.65	0.48

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 ⓘ



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

9.3 Distance violation statistics for the ensemble ⓘ

Violation analysis may find that some restraints are violated in few models and some are violated in most of models. The following table provides this information as number of violated restraints for a given fraction of the ensemble. In total, 648(IR:360, SQ:124, MR:102, LR:62, 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	%
6	6	8	8	0	28	1	10.0
14	2	0	4	0	20	2	20.0
12	10	10	0	0	32	3	30.0

Continued on next page...

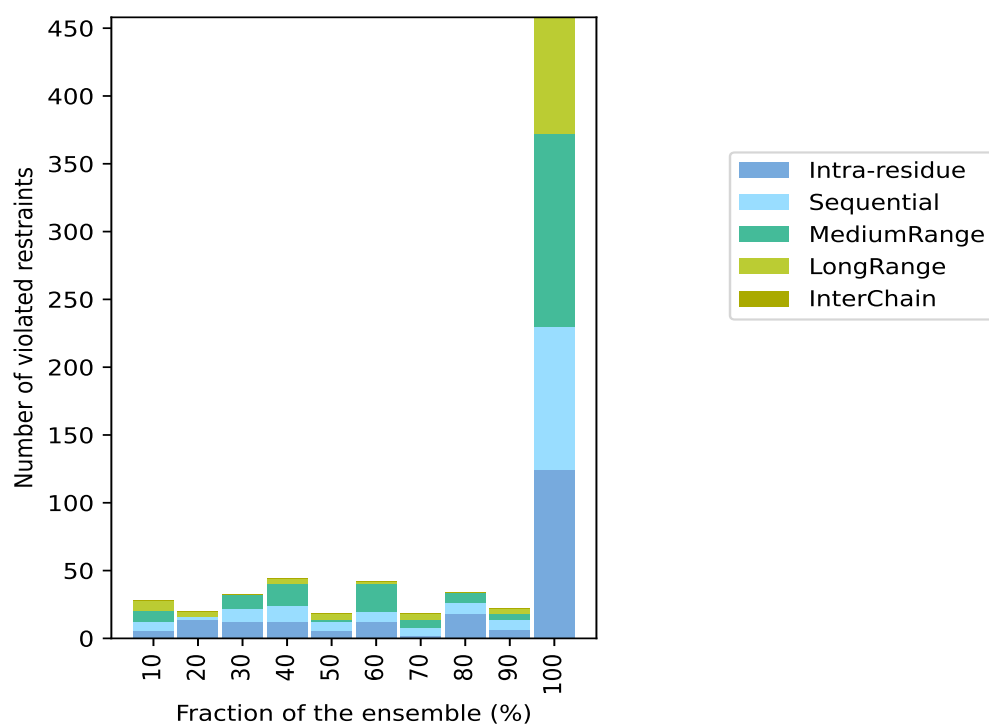
Continued from previous page...

Number of violated restraints						Fraction of the ensemble	
IR ¹	SQ ²	MR ³	LR ⁴	IC ⁵	Total	Count ⁶	%
12	12	16	4	0	44	4	40.0
6	6	2	4	0	18	5	50.0
12	8	20	2	0	42	6	60.0
2	6	6	4	0	18	7	70.0
18	8	8	0	0	34	8	80.0
6	8	4	4	0	22	9	90.0
124	106	142	86	0	458	10	100.0

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

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

9.3.1 Bar graph : Distance violation statistics for the ensemble ⓘ

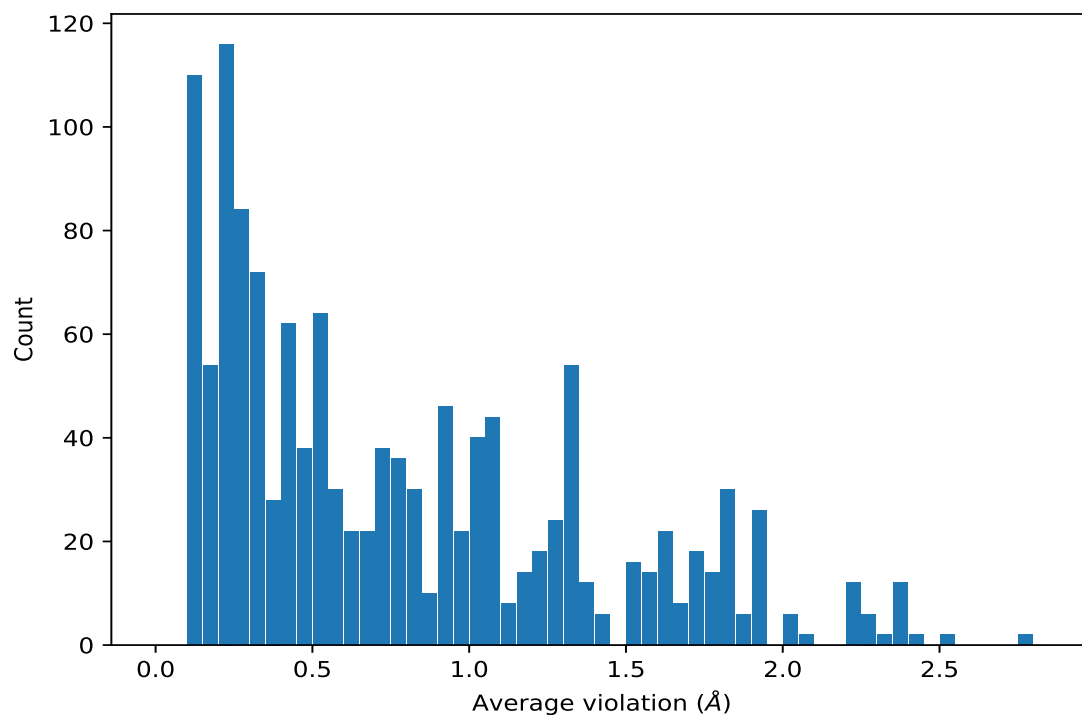


9.4 Most violated distance restraints in the ensemble ⓘ

9.4.1 Histogram : Distribution of mean distance violations ⓘ

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

in the ensemble



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

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

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,320)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG3	10	2.78	0.16	2.74
(3,72)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG3	10	2.78	0.16	2.74
(1,442)	1:21:A:ARG:HG2	1:23:A:PRO:HD3	10	2.52	0.42	2.7
(3,116)	1:21:A:ARG:HG2	1:23:A:PRO:HD3	10	2.52	0.42	2.7
(1,446)	1:23:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HD3	10	2.44	0.04	2.43
(3,118)	1:23:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HD3	10	2.44	0.04	2.43
(1,671)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD21	10	2.38	1.2	3.34
(1,671)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD22	10	2.38	1.2	3.34
(1,671)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD23	10	2.38	1.2	3.34
(3,202)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD21	10	2.38	1.2	3.34
(3,202)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD22	10	2.38	1.2	3.34
(3,202)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD23	10	2.38	1.2	3.34
(1,414)	1:24:A:PRO:HG3	1:25:A:SER:HA	10	2.37	0.34	2.33
(3,109)	1:24:A:PRO:HG3	1:25:A:SER:HA	10	2.37	0.34	2.33
(1,280)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HB2	10	2.36	0.1	2.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,280)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HB2	10	2.36	0.1	2.3
(3,58)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HB2	10	2.36	0.1	2.3
(3,58)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HB2	10	2.36	0.1	2.3
(1,332)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	10	2.34	0.06	2.36
(3,76)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	10	2.34	0.06	2.36
(1,596)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	10	2.3	0.11	2.28
(1,596)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	10	2.3	0.11	2.28
(1,596)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	10	2.3	0.11	2.28
(3,177)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	10	2.3	0.11	2.28
(3,177)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	10	2.3	0.11	2.28
(3,177)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	10	2.3	0.11	2.28
(1,670)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD11	10	2.24	1.23	1.25
(1,670)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD12	10	2.24	1.23	1.25
(1,670)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD13	10	2.24	1.23	1.25
(2,469)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD11	10	2.24	1.23	1.25
(2,469)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD12	10	2.24	1.23	1.25
(2,469)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD13	10	2.24	1.23	1.25
(1,573)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HA	10	2.22	0.79	2.58
(1,573)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HA	10	2.22	0.79	2.58
(1,573)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HA	10	2.22	0.79	2.58
(3,162)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HA	10	2.22	0.79	2.58
(3,162)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HA	10	2.22	0.79	2.58
(3,162)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HA	10	2.22	0.79	2.58
(1,495)	1:8:A:TYR:H	1:12:A:LEU:HD11	10	2.01	1.1	1.12
(1,495)	1:8:A:TYR:H	1:12:A:LEU:HD12	10	2.01	1.1	1.12
(1,495)	1:8:A:TYR:H	1:12:A:LEU:HD13	10	2.01	1.1	1.12
(3,136)	1:8:A:TYR:H	1:12:A:LEU:HD11	10	2.01	1.1	1.12
(3,136)	1:8:A:TYR:H	1:12:A:LEU:HD12	10	2.01	1.1	1.12
(3,136)	1:8:A:TYR:H	1:12:A:LEU:HD13	10	2.01	1.1	1.12
(1,604)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HB	10	1.95	0.04	1.96
(1,604)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HB	10	1.95	0.04	1.96
(1,604)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HB	10	1.95	0.04	1.96
(3,182)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HB	10	1.95	0.04	1.96
(3,182)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HB	10	1.95	0.04	1.96
(3,182)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HB	10	1.95	0.04	1.96
(1,673)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD21	10	1.95	0.05	1.94
(1,673)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD22	10	1.95	0.05	1.94
(1,673)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD23	10	1.95	0.05	1.94
(1,673)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD21	10	1.95	0.05	1.94
(1,673)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD22	10	1.95	0.05	1.94
(1,673)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD23	10	1.95	0.05	1.94
(1,673)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD21	10	1.95	0.05	1.94

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,673)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD22	10	1.95	0.05	1.94
(1,673)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD23	10	1.95	0.05	1.94
(3,204)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD21	10	1.95	0.05	1.94
(3,204)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD22	10	1.95	0.05	1.94
(3,204)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD23	10	1.95	0.05	1.94
(3,204)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD21	10	1.95	0.05	1.94
(3,204)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD22	10	1.95	0.05	1.94
(3,204)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD23	10	1.95	0.05	1.94
(3,204)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD21	10	1.95	0.05	1.94
(3,204)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD22	10	1.95	0.05	1.94
(3,204)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD23	10	1.95	0.05	1.94
(1,527)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HB	10	1.95	0.06	1.94
(3,146)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HB	10	1.95	0.06	1.94
(1,584)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	10	1.9	0.22	1.81
(1,584)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	10	1.9	0.22	1.81
(1,584)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	10	1.9	0.22	1.81
(3,170)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	10	1.9	0.22	1.81
(3,170)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	10	1.9	0.22	1.81
(3,170)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	10	1.9	0.22	1.81
(1,662)	1:16:A:GLY:HA2	1:19:A:SER:HB3	10	1.84	0.57	1.87
(3,200)	1:16:A:GLY:HA2	1:19:A:SER:HB3	10	1.84	0.57	1.87
(1,622)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HD11	10	1.84	0.02	1.84
(1,622)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HD12	10	1.84	0.02	1.84
(1,622)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HD13	10	1.84	0.02	1.84
(1,622)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HD11	10	1.84	0.02	1.84
(1,622)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HD12	10	1.84	0.02	1.84
(1,622)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HD13	10	1.84	0.02	1.84
(1,622)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HD11	10	1.84	0.02	1.84
(1,622)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HD12	10	1.84	0.02	1.84
(1,622)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HD13	10	1.84	0.02	1.84
(3,189)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HD11	10	1.84	0.02	1.84
(3,189)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HD12	10	1.84	0.02	1.84
(3,189)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HD13	10	1.84	0.02	1.84
(3,189)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HD11	10	1.84	0.02	1.84
(3,189)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HD12	10	1.84	0.02	1.84
(3,189)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HD13	10	1.84	0.02	1.84
(3,189)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HD11	10	1.84	0.02	1.84
(3,189)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HD12	10	1.84	0.02	1.84
(3,189)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HD13	10	1.84	0.02	1.84
(1,603)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:HD21	10	1.83	1.09	2.72
(1,603)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:HD22	10	1.83	1.09	2.72
(1,603)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:HD23	10	1.83	1.09	2.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(3,181)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:HD21	10	1.83	1.09	2.72
(3,181)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:HD22	10	1.83	1.09	2.72
(3,181)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:HD23	10	1.83	1.09	2.72
(1,661)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HG2	10	1.82	0.05	1.83
(2,462)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HG2	10	1.82	0.05	1.83
(1,464)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:H	10	1.8	0.05	1.81
(2,339)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:H	10	1.8	0.05	1.81
(1,46)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	10	1.79	0.02	1.79
(1,46)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	10	1.79	0.02	1.79
(1,46)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	10	1.79	0.02	1.79
(3,8)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	10	1.79	0.02	1.79
(3,8)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	10	1.79	0.02	1.79
(3,8)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	10	1.79	0.02	1.79
(1,631)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HZ2	10	1.78	0.02	1.78
(3,191)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HZ2	10	1.78	0.02	1.78
(1,365)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD11	10	1.74	0.61	2.19
(1,365)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD12	10	1.74	0.61	2.19
(1,365)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD13	10	1.74	0.61	2.19
(3,91)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD11	10	1.74	0.61	2.19
(3,91)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD12	10	1.74	0.61	2.19
(3,91)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD13	10	1.74	0.61	2.19
(1,609)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG12	10	1.72	0.05	1.69
(1,609)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG12	10	1.72	0.05	1.69
(1,609)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG12	10	1.72	0.05	1.69
(3,185)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG12	10	1.72	0.05	1.69
(3,185)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG12	10	1.72	0.05	1.69
(3,185)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG12	10	1.72	0.05	1.69
(1,488)	1:21:A:ARG:H	1:22:A:PRO:HD2	10	1.7	0.18	1.68
(3,134)	1:21:A:ARG:H	1:22:A:PRO:HD2	10	1.7	0.18	1.68
(1,266)	1:10:A:GLN:HE22	1:13:A:LYS:HB2	10	1.7	0.07	1.7
(1,266)	1:10:A:GLN:HE22	1:13:A:LYS:HB3	10	1.7	0.07	1.7
(3,50)	1:10:A:GLN:HE22	1:13:A:LYS:HB2	10	1.7	0.07	1.7
(3,50)	1:10:A:GLN:HE22	1:13:A:LYS:HB3	10	1.7	0.07	1.7
(1,363)	1:9:A:ILE:HG13	1:11:A:TRP:HE3	10	1.68	0.07	1.66
(3,90)	1:9:A:ILE:HG13	1:11:A:TRP:HE3	10	1.68	0.07	1.66
(1,564)	1:9:A:ILE:HB	1:13:A:LYS:HG3	10	1.64	0.97	1.16
(3,158)	1:9:A:ILE:HB	1:13:A:LYS:HG3	10	1.64	0.97	1.16
(1,499)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:H	10	1.63	0.03	1.62
(1,499)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:H	10	1.63	0.03	1.62
(1,499)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:H	10	1.63	0.03	1.62
(3,139)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:H	10	1.63	0.03	1.62
(3,139)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:H	10	1.63	0.03	1.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(3,139)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:H	10	1.63	0.03	1.62
(1,312)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	10	1.61	0.1	1.63
(1,312)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	10	1.61	0.1	1.63
(1,312)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	10	1.61	0.1	1.63
(1,312)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	10	1.61	0.1	1.63
(1,312)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	10	1.61	0.1	1.63
(1,312)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	10	1.61	0.1	1.63
(3,69)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	10	1.61	0.1	1.63
(3,69)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	10	1.61	0.1	1.63
(3,69)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	10	1.61	0.1	1.63
(3,69)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	10	1.61	0.1	1.63
(3,69)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	10	1.61	0.1	1.63
(3,69)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	10	1.61	0.1	1.63
(1,561)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HB2	10	1.6	0.02	1.6
(2,406)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HB2	10	1.6	0.02	1.6
(1,563)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB1	10	1.59	0.07	1.61
(1,563)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB2	10	1.59	0.07	1.61
(1,563)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB3	10	1.59	0.07	1.61
(3,157)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB1	10	1.59	0.07	1.61
(3,157)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB2	10	1.59	0.07	1.61
(3,157)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB3	10	1.59	0.07	1.61
(1,536)	1:1:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:H	10	1.55	0.02	1.55
(2,388)	1:1:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:H	10	1.55	0.02	1.55
(1,338)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HD2	10	1.54	0.04	1.52
(3,79)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HD2	10	1.54	0.04	1.52
(1,578)	1:6:A:ARG:HA	1:7:A:LEU:HD11	10	1.53	0.03	1.53
(1,578)	1:6:A:ARG:HA	1:7:A:LEU:HD12	10	1.53	0.03	1.53
(1,578)	1:6:A:ARG:HA	1:7:A:LEU:HD13	10	1.53	0.03	1.53
(3,165)	1:6:A:ARG:HA	1:7:A:LEU:HD11	10	1.53	0.03	1.53
(3,165)	1:6:A:ARG:HA	1:7:A:LEU:HD12	10	1.53	0.03	1.53
(3,165)	1:6:A:ARG:HA	1:7:A:LEU:HD13	10	1.53	0.03	1.53
(1,348)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HG2	10	1.52	0.05	1.5
(2,266)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HG2	10	1.52	0.05	1.5
(1,399)	1:11:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HD1	10	1.44	0.07	1.48
(3,101)	1:11:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HD1	10	1.44	0.07	1.48
(1,439)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD2	10	1.41	0.29	1.5
(3,113)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD2	10	1.41	0.29	1.5
(1,552)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HG3	10	1.41	0.24	1.42
(2,398)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HG3	10	1.41	0.24	1.42
(1,663)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HD2	10	1.4	0.09	1.4
(2,463)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HD2	10	1.4	0.09	1.4
(1,583)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD21	10	1.39	0.81	2.05

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,583)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD22	10	1.39	0.81	2.05
(1,583)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD23	10	1.39	0.81	2.05
(2,414)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD21	10	1.39	0.81	2.05
(2,414)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD22	10	1.39	0.81	2.05
(2,414)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD23	10	1.39	0.81	2.05
(1,350)	1:11:A:TRP:HE3	1:17:A:PRO:HG2	10	1.37	0.08	1.42
(1,350)	1:11:A:TRP:HE3	1:17:A:PRO:HG3	10	1.37	0.08	1.42
(3,84)	1:11:A:TRP:HE3	1:17:A:PRO:HG2	10	1.37	0.08	1.42
(3,84)	1:11:A:TRP:HE3	1:17:A:PRO:HG3	10	1.37	0.08	1.42
(1,672)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD11	10	1.34	0.02	1.35
(1,672)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD12	10	1.34	0.02	1.35
(1,672)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD13	10	1.34	0.02	1.35
(1,672)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD11	10	1.34	0.02	1.35
(1,672)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD12	10	1.34	0.02	1.35
(1,672)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD13	10	1.34	0.02	1.35
(1,672)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD11	10	1.34	0.02	1.35
(1,672)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD12	10	1.34	0.02	1.35
(1,672)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD13	10	1.34	0.02	1.35
(3,203)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD11	10	1.34	0.02	1.35
(3,203)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD12	10	1.34	0.02	1.35
(3,203)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD13	10	1.34	0.02	1.35
(3,203)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD11	10	1.34	0.02	1.35
(3,203)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD12	10	1.34	0.02	1.35
(3,203)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD13	10	1.34	0.02	1.35
(3,203)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD11	10	1.34	0.02	1.35
(3,203)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD12	10	1.34	0.02	1.35
(3,203)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD13	10	1.34	0.02	1.35
(1,597)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HG2	10	1.33	0.11	1.31
(1,597)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HG2	10	1.33	0.11	1.31
(1,597)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HG2	10	1.33	0.11	1.31
(1,597)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HG3	10	1.33	0.11	1.31
(1,597)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HG3	10	1.33	0.11	1.31
(1,597)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HG3	10	1.33	0.11	1.31
(3,178)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HG2	10	1.33	0.11	1.31
(3,178)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HG2	10	1.33	0.11	1.31
(3,178)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HG2	10	1.33	0.11	1.31
(3,178)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HG3	10	1.33	0.11	1.31
(3,178)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HG3	10	1.33	0.11	1.31
(3,178)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HG3	10	1.33	0.11	1.31
(1,411)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB1	10	1.32	0.03	1.32
(1,411)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB2	10	1.32	0.03	1.32
(1,411)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB3	10	1.32	0.03	1.32

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(3,108)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB1	10	1.32	0.03	1.32
(3,108)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB2	10	1.32	0.03	1.32
(3,108)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB3	10	1.32	0.03	1.32
(1,516)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:H	10	1.31	0.06	1.32
(3,145)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:H	10	1.31	0.06	1.32
(1,585)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HB2	10	1.31	0.03	1.3
(1,585)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HB2	10	1.31	0.03	1.3
(1,585)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HB2	10	1.31	0.03	1.3
(2,415)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HB2	10	1.31	0.03	1.3
(2,415)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HB2	10	1.31	0.03	1.3
(2,415)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HB2	10	1.31	0.03	1.3
(1,450)	1:16:A:GLY:H	1:18:A:SER:HB2	10	1.3	0.53	1.4
(1,450)	1:16:A:GLY:H	1:18:A:SER:HB3	10	1.3	0.53	1.4
(3,121)	1:16:A:GLY:H	1:18:A:SER:HB2	10	1.3	0.53	1.4
(3,121)	1:16:A:GLY:H	1:18:A:SER:HB3	10	1.3	0.53	1.4
(1,572)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HA	10	1.28	0.59	0.96
(1,572)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HA	10	1.28	0.59	0.96
(1,572)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HA	10	1.28	0.59	0.96
(3,161)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HA	10	1.28	0.59	0.96
(3,161)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HA	10	1.28	0.59	0.96
(3,161)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HA	10	1.28	0.59	0.96
(1,503)	1:6:A:ARG:H	1:9:A:ILE:HD11	10	1.27	0.03	1.28
(1,503)	1:6:A:ARG:H	1:9:A:ILE:HD12	10	1.27	0.03	1.28
(1,503)	1:6:A:ARG:H	1:9:A:ILE:HD13	10	1.27	0.03	1.28
(3,140)	1:6:A:ARG:H	1:9:A:ILE:HD11	10	1.27	0.03	1.28
(3,140)	1:6:A:ARG:H	1:9:A:ILE:HD12	10	1.27	0.03	1.28
(3,140)	1:6:A:ARG:H	1:9:A:ILE:HD13	10	1.27	0.03	1.28
(1,634)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD11	10	1.27	1.14	0.36
(1,634)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD12	10	1.27	1.14	0.36
(1,634)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD13	10	1.27	1.14	0.36
(2,441)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD11	10	1.27	1.14	0.36
(2,441)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD12	10	1.27	1.14	0.36
(2,441)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD13	10	1.27	1.14	0.36
(1,541)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HG3	10	1.26	0.4	1.07
(3,151)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HG3	10	1.26	0.4	1.07
(1,378)	1:11:A:TRP:HE1	1:24:A:PRO:HD2	10	1.25	0.08	1.27
(3,96)	1:11:A:TRP:HE1	1:24:A:PRO:HD2	10	1.25	0.08	1.27
(1,567)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG11	10	1.23	0.04	1.23
(1,567)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG12	10	1.23	0.04	1.23
(1,567)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG13	10	1.23	0.04	1.23
(3,159)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG11	10	1.23	0.04	1.23
(3,159)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG12	10	1.23	0.04	1.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(3,159)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG13	10	1.23	0.04	1.23
(1,675)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HG2	10	1.23	0.02	1.23
(1,675)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HG2	10	1.23	0.02	1.23
(1,675)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HG2	10	1.23	0.02	1.23
(3,205)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HG2	10	1.23	0.02	1.23
(3,205)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HG2	10	1.23	0.02	1.23
(3,205)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HG2	10	1.23	0.02	1.23
(1,510)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HB2	10	1.23	0.12	1.26
(1,510)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HB3	10	1.23	0.12	1.26
(3,143)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HB2	10	1.23	0.12	1.26
(3,143)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HB3	10	1.23	0.12	1.26
(1,404)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HB2	10	1.21	0.35	1.3
(2,301)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HB2	10	1.21	0.35	1.3
(1,507)	1:13:A:LYS:HD2	1:14:A:ASP:H	10	1.18	0.33	1.31
(1,507)	1:13:A:LYS:HD3	1:14:A:ASP:H	10	1.18	0.33	1.31
(3,142)	1:13:A:LYS:HD2	1:14:A:ASP:H	10	1.18	0.33	1.31
(3,142)	1:13:A:LYS:HD3	1:14:A:ASP:H	10	1.18	0.33	1.31
(1,367)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD21	10	1.17	0.25	1.08
(1,367)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD22	10	1.17	0.25	1.08
(1,367)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD23	10	1.17	0.25	1.08
(3,93)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD21	10	1.17	0.25	1.08
(3,93)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD22	10	1.17	0.25	1.08
(3,93)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD23	10	1.17	0.25	1.08
(1,292)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	10	1.16	0.01	1.16
(3,61)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	10	1.16	0.01	1.16
(1,382)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HE1	10	1.15	0.06	1.17
(3,98)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HE1	10	1.15	0.06	1.17
(1,376)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB2	10	1.15	0.08	1.18
(1,376)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB3	10	1.15	0.08	1.18
(3,95)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB2	10	1.15	0.08	1.18
(3,95)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB3	10	1.15	0.08	1.18
(1,326)	1:11:A:TRP:HZ3	1:17:A:PRO:HA	10	1.15	0.26	1.23
(3,73)	1:11:A:TRP:HZ3	1:17:A:PRO:HA	10	1.15	0.26	1.23
(1,617)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	10	1.09	0.03	1.08
(1,617)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	10	1.09	0.03	1.08
(1,617)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	10	1.09	0.03	1.08
(1,617)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	10	1.09	0.03	1.08
(1,617)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	10	1.09	0.03	1.08
(1,617)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	10	1.09	0.03	1.08
(1,617)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	10	1.09	0.03	1.08
(1,617)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	10	1.09	0.03	1.08
(1,617)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	10	1.09	0.03	1.08

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(3,186)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	10	1.09	0.03	1.08
(3,186)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	10	1.09	0.03	1.08
(3,186)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	10	1.09	0.03	1.08
(3,186)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	10	1.09	0.03	1.08
(3,186)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	10	1.09	0.03	1.08
(3,186)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	10	1.09	0.03	1.08
(3,186)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	10	1.09	0.03	1.08
(3,186)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	10	1.09	0.03	1.08
(3,186)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	10	1.09	0.03	1.08
(1,440)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	10	1.09	0.14	1.08
(1,440)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	10	1.09	0.14	1.08
(3,114)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	10	1.09	0.14	1.08
(3,114)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	10	1.09	0.14	1.08
(1,66)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	10	1.08	0.02	1.07
(1,66)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	10	1.08	0.02	1.07
(3,13)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	10	1.08	0.02	1.07
(3,13)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	10	1.08	0.02	1.07
(1,67)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	10	1.07	0.06	1.11
(1,67)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	10	1.07	0.06	1.11
(1,142)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HB3	10	1.07	0.05	1.1
(2,113)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HB3	10	1.07	0.05	1.1
(3,14)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	10	1.07	0.06	1.11
(3,14)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	10	1.07	0.06	1.11
(1,657)	1:19:A:SER:HB2	1:21:A:ARG:HG3	10	1.07	0.67	1.21
(3,198)	1:19:A:SER:HB2	1:21:A:ARG:HG3	10	1.07	0.67	1.21
(1,434)	1:21:A:ARG:HB3	1:22:A:PRO:HD2	10	1.05	0.35	1.07
(2,322)	1:21:A:ARG:HB3	1:22:A:PRO:HD2	10	1.05	0.35	1.07
(1,45)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	10	1.03	0.02	1.02
(1,45)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	10	1.03	0.02	1.02
(1,45)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	10	1.03	0.02	1.02
(3,7)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	10	1.03	0.02	1.02
(3,7)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	10	1.03	0.02	1.02
(3,7)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	10	1.03	0.02	1.02
(1,294)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HD3	10	1.02	0.13	0.94
(1,294)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HD3	10	1.02	0.13	0.94
(2,233)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HD3	10	1.02	0.13	0.94
(2,233)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HD3	10	1.02	0.13	0.94
(1,542)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HB2	10	1.02	0.04	1.02
(1,679)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD21	10	1.02	0.12	1.04
(1,679)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD22	10	1.02	0.12	1.04
(1,679)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD23	10	1.02	0.12	1.04
(2,391)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HB2	10	1.02	0.04	1.02

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(3,207)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD21	10	1.02	0.12	1.04
(3,207)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD22	10	1.02	0.12	1.04
(3,207)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD23	10	1.02	0.12	1.04
(1,319)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB2	10	1.01	0.2	1.03
(1,319)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB3	10	1.01	0.2	1.03
(3,71)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB2	10	1.01	0.2	1.03
(3,71)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB3	10	1.01	0.2	1.03
(1,676)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HG2	10	1.01	0.65	1.46
(1,676)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HG2	10	1.01	0.65	1.46
(1,676)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HG2	10	1.01	0.65	1.46
(1,676)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HG3	10	1.01	0.65	1.46
(1,676)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HG3	10	1.01	0.65	1.46
(1,676)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HG3	10	1.01	0.65	1.46
(3,206)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HG2	10	1.01	0.65	1.46
(3,206)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HG2	10	1.01	0.65	1.46
(3,206)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HG2	10	1.01	0.65	1.46
(3,206)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HG3	10	1.01	0.65	1.46
(3,206)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HG3	10	1.01	0.65	1.46
(3,206)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HG3	10	1.01	0.65	1.46
(1,469)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:H	10	0.97	0.09	1.0
(3,128)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:H	10	0.97	0.09	1.0
(1,635)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:H	10	0.96	0.05	0.98
(1,635)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:H	10	0.96	0.05	0.98
(1,635)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:H	10	0.96	0.05	0.98
(3,194)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:H	10	0.96	0.05	0.98
(3,194)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:H	10	0.96	0.05	0.98
(3,194)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:H	10	0.96	0.05	0.98
(1,655)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:HG	10	0.95	0.87	0.27
(2,458)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:HG	10	0.95	0.87	0.27
(1,649)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:HD1	10	0.93	0.02	0.93
(1,649)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:HD2	10	0.93	0.02	0.93
(1,649)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:HD1	10	0.93	0.02	0.93
(1,649)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:HD2	10	0.93	0.02	0.93
(1,649)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:HD1	10	0.93	0.02	0.93
(1,649)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:HD2	10	0.93	0.02	0.93
(3,196)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:HD1	10	0.93	0.02	0.93
(3,196)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:HD2	10	0.93	0.02	0.93
(3,196)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:HD1	10	0.93	0.02	0.93
(3,196)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:HD2	10	0.93	0.02	0.93
(3,196)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:HD1	10	0.93	0.02	0.93
(3,196)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:HD2	10	0.93	0.02	0.93
(1,53)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD11	10	0.92	0.0	0.92

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,53)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD12	10	0.92	0.0	0.92
(1,53)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD13	10	0.92	0.0	0.92
(2,43)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD11	10	0.92	0.0	0.92
(2,43)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD12	10	0.92	0.0	0.92
(2,43)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD13	10	0.92	0.0	0.92
(1,164)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG2	10	0.91	0.12	0.95
(2,133)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG2	10	0.91	0.12	0.95
(1,274)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE1	10	0.91	0.12	0.86
(1,274)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE2	10	0.91	0.12	0.86
(3,53)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE1	10	0.91	0.12	0.86
(3,53)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE2	10	0.91	0.12	0.86
(1,249)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	10	0.9	0.03	0.91
(3,44)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	10	0.9	0.03	0.91
(1,592)	1:7:A:LEU:HD21	1:8:A:TYR:HB2	10	0.9	0.02	0.9
(1,592)	1:7:A:LEU:HD22	1:8:A:TYR:HB2	10	0.9	0.02	0.9
(1,592)	1:7:A:LEU:HD23	1:8:A:TYR:HB2	10	0.9	0.02	0.9
(3,175)	1:7:A:LEU:HD21	1:8:A:TYR:HB2	10	0.9	0.02	0.9
(3,175)	1:7:A:LEU:HD22	1:8:A:TYR:HB2	10	0.9	0.02	0.9
(3,175)	1:7:A:LEU:HD23	1:8:A:TYR:HB2	10	0.9	0.02	0.9
(1,272)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HE3	10	0.89	0.08	0.92
(3,52)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HE3	10	0.89	0.08	0.92
(1,586)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	10	0.87	0.02	0.86
(1,586)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	10	0.87	0.02	0.86
(1,586)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	10	0.87	0.02	0.86
(3,171)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	10	0.87	0.02	0.86
(3,171)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	10	0.87	0.02	0.86
(3,171)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	10	0.87	0.02	0.86
(1,448)	1:14:A:ASP:HA	1:16:A:GLY:H	10	0.86	0.34	0.92
(3,119)	1:14:A:ASP:HA	1:16:A:GLY:H	10	0.86	0.34	0.92
(1,330)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	10	0.85	0.04	0.84
(3,75)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	10	0.85	0.04	0.84
(1,682)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:HB2	10	0.84	0.15	0.78
(1,682)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:HB2	10	0.84	0.15	0.78
(2,473)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:HB2	10	0.84	0.15	0.78
(2,473)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:HB2	10	0.84	0.15	0.78
(1,498)	1:12:A:LEU:HD21	1:14:A:ASP:H	10	0.8	0.28	0.74
(1,498)	1:12:A:LEU:HD22	1:14:A:ASP:H	10	0.8	0.28	0.74
(1,498)	1:12:A:LEU:HD23	1:14:A:ASP:H	10	0.8	0.28	0.74
(3,138)	1:12:A:LEU:HD21	1:14:A:ASP:H	10	0.8	0.28	0.74
(3,138)	1:12:A:LEU:HD22	1:14:A:ASP:H	10	0.8	0.28	0.74
(3,138)	1:12:A:LEU:HD23	1:14:A:ASP:H	10	0.8	0.28	0.74
(1,313)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	10	0.79	0.72	0.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,313)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	10	0.79	0.72	0.22
(1,313)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	10	0.79	0.72	0.22
(1,313)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	10	0.79	0.72	0.22
(1,313)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	10	0.79	0.72	0.22
(1,313)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	10	0.79	0.72	0.22
(2,244)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	10	0.79	0.72	0.22
(2,244)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	10	0.79	0.72	0.22
(2,244)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	10	0.79	0.72	0.22
(2,244)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	10	0.79	0.72	0.22
(2,244)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	10	0.79	0.72	0.22
(2,244)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	10	0.79	0.72	0.22
(1,476)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG21	10	0.79	0.05	0.78
(1,476)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG22	10	0.79	0.05	0.78
(1,476)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG23	10	0.79	0.05	0.78
(3,130)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG21	10	0.79	0.05	0.78
(3,130)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG22	10	0.79	0.05	0.78
(3,130)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG23	10	0.79	0.05	0.78
(1,168)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD2	10	0.78	0.04	0.78
(2,137)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD2	10	0.78	0.04	0.78
(1,351)	1:11:A:TRP:HZ3	1:17:A:PRO:HG2	10	0.76	0.09	0.76
(2,267)	1:11:A:TRP:HZ3	1:17:A:PRO:HG2	10	0.76	0.09	0.76
(1,102)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:H	10	0.76	0.05	0.74
(2,84)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:H	10	0.76	0.05	0.74
(1,73)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	10	0.76	0.04	0.76
(1,73)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	10	0.76	0.04	0.76
(1,73)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	10	0.76	0.04	0.76
(3,15)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	10	0.76	0.04	0.76
(3,15)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	10	0.76	0.04	0.76
(3,15)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	10	0.76	0.04	0.76
(1,513)	1:5:A:VAL:HB	1:6:A:ARG:H	10	0.73	0.02	0.73
(3,144)	1:5:A:VAL:HB	1:6:A:ARG:H	10	0.73	0.02	0.73
(1,403)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG2	10	0.73	0.31	0.69
(1,403)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG3	10	0.73	0.31	0.69
(3,103)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG2	10	0.73	0.31	0.69
(3,103)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG3	10	0.73	0.31	0.69
(1,346)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	10	0.72	0.06	0.7
(2,264)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	10	0.72	0.06	0.7
(1,405)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	10	0.72	0.12	0.76
(3,104)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	10	0.72	0.12	0.76
(1,19)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HB	10	0.72	0.04	0.74
(3,3)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HB	10	0.72	0.04	0.74
(1,331)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HE3	10	0.72	0.06	0.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(2,256)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HE3	10	0.72	0.06	0.72
(1,669)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HB3	10	0.72	0.05	0.71
(2,468)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HB3	10	0.72	0.05	0.71
(1,509)	1:9:A:ILE:HG12	1:10:A:GLN:H	10	0.68	0.02	0.68
(2,367)	1:9:A:ILE:HG12	1:10:A:GLN:H	10	0.68	0.02	0.68
(1,277)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HD2	10	0.68	0.57	0.43
(3,55)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HD2	10	0.68	0.57	0.43
(1,431)	1:21:A:ARG:HG2	1:22:A:PRO:HD3	10	0.67	0.24	0.68
(3,112)	1:21:A:ARG:HG2	1:22:A:PRO:HD3	10	0.67	0.24	0.68
(1,447)	1:22:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD3	10	0.65	0.16	0.68
(2,329)	1:22:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD3	10	0.65	0.16	0.68
(1,235)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD2	10	0.65	0.02	0.64
(2,195)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD2	10	0.65	0.02	0.64
(1,88)	1:10:A:GLN:HE22	1:10:A:GLN:HG2	10	0.63	0.01	0.63
(1,88)	1:10:A:GLN:HE22	1:10:A:GLN:HG3	10	0.63	0.01	0.63
(1,230)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HD2	10	0.63	0.01	0.63
(2,192)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HD2	10	0.63	0.01	0.63
(3,17)	1:10:A:GLN:HE22	1:10:A:GLN:HG2	10	0.63	0.01	0.63
(3,17)	1:10:A:GLN:HE22	1:10:A:GLN:HG3	10	0.63	0.01	0.63
(1,461)	1:9:A:ILE:H	1:10:A:GLN:HB3	10	0.62	0.28	0.46
(3,124)	1:9:A:ILE:H	1:10:A:GLN:HB3	10	0.62	0.28	0.46
(1,598)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD11	10	0.62	0.1	0.66
(1,598)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD12	10	0.62	0.1	0.66
(1,598)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD13	10	0.62	0.1	0.66
(1,598)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	10	0.62	0.1	0.66
(1,598)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	10	0.62	0.1	0.66
(1,598)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	10	0.62	0.1	0.66
(3,179)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD11	10	0.62	0.1	0.66
(3,179)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD12	10	0.62	0.1	0.66
(3,179)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD13	10	0.62	0.1	0.66
(3,179)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	10	0.62	0.1	0.66
(3,179)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	10	0.62	0.1	0.66
(3,179)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	10	0.62	0.1	0.66
(1,505)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HG3	10	0.59	0.91	0.14
(2,364)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HG3	10	0.59	0.91	0.14
(1,477)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD11	10	0.59	0.08	0.64
(1,477)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD12	10	0.59	0.08	0.64
(1,477)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD13	10	0.59	0.08	0.64
(3,131)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD11	10	0.59	0.08	0.64
(3,131)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD12	10	0.59	0.08	0.64
(3,131)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD13	10	0.59	0.08	0.64
(1,82)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG2	10	0.58	0.03	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,82)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	10	0.58	0.03	0.57
(3,16)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG2	10	0.58	0.03	0.57
(3,16)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	10	0.58	0.03	0.57
(1,504)	1:4:A:ALA:HB1	1:6:A:ARG:H	10	0.57	0.07	0.52
(1,504)	1:4:A:ALA:HB2	1:6:A:ARG:H	10	0.57	0.07	0.52
(1,504)	1:4:A:ALA:HB3	1:6:A:ARG:H	10	0.57	0.07	0.52
(3,141)	1:4:A:ALA:HB1	1:6:A:ARG:H	10	0.57	0.07	0.52
(3,141)	1:4:A:ALA:HB2	1:6:A:ARG:H	10	0.57	0.07	0.52
(3,141)	1:4:A:ALA:HB3	1:6:A:ARG:H	10	0.57	0.07	0.52
(1,369)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB2	10	0.57	0.09	0.55
(3,94)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB2	10	0.57	0.09	0.55
(1,126)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE2	10	0.56	0.17	0.55
(1,126)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE3	10	0.56	0.17	0.55
(3,26)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE2	10	0.56	0.17	0.55
(3,26)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE3	10	0.56	0.17	0.55
(1,220)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD2	10	0.55	0.09	0.58
(3,37)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD2	10	0.55	0.09	0.58
(1,468)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:H	10	0.55	0.03	0.55
(3,127)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:H	10	0.55	0.03	0.55
(1,618)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG13	10	0.54	0.04	0.52
(1,618)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG13	10	0.54	0.04	0.52
(1,618)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG13	10	0.54	0.04	0.52
(3,187)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG13	10	0.54	0.04	0.52
(3,187)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG13	10	0.54	0.04	0.52
(3,187)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG13	10	0.54	0.04	0.52
(1,311)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	10	0.54	0.12	0.5
(1,311)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	10	0.54	0.12	0.5
(1,311)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	10	0.54	0.12	0.5
(1,311)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	10	0.54	0.12	0.5
(1,311)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	10	0.54	0.12	0.5
(1,311)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	10	0.54	0.12	0.5
(3,68)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	10	0.54	0.12	0.5
(3,68)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	10	0.54	0.12	0.5
(3,68)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	10	0.54	0.12	0.5
(3,68)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	10	0.54	0.12	0.5
(3,68)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	10	0.54	0.12	0.5
(3,68)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	10	0.54	0.12	0.5
(1,59)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD21	10	0.54	0.02	0.53
(1,59)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD22	10	0.54	0.02	0.53
(1,59)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD23	10	0.54	0.02	0.53
(3,12)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD21	10	0.54	0.02	0.53
(3,12)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD22	10	0.54	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)
(3,12)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD23	10	0.54	0.02	0.53
(1,131)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HE2	10	0.54	0.03	0.54
(1,131)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HE3	10	0.54	0.03	0.54
(1,131)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HE3	10	0.54	0.03	0.54
(2,104)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HE2	10	0.54	0.03	0.54
(2,104)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HE3	10	0.54	0.03	0.54
(2,104)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HE3	10	0.54	0.03	0.54
(1,342)	1:11:A:TRP:HH2	1:16:A:GLY:HA2	10	0.53	0.41	0.28
(2,261)	1:11:A:TRP:HH2	1:16:A:GLY:HA2	10	0.53	0.41	0.28
(1,579)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HA	10	0.52	0.17	0.44
(1,579)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HA	10	0.52	0.17	0.44
(1,579)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HA	10	0.52	0.17	0.44
(3,166)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HA	10	0.52	0.17	0.44
(3,166)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HA	10	0.52	0.17	0.44
(3,166)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HA	10	0.52	0.17	0.44
(1,570)	1:23:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HD3	10	0.52	0.04	0.53
(2,410)	1:23:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HD3	10	0.52	0.04	0.53
(1,187)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD3	10	0.51	0.1	0.55
(2,154)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD3	10	0.51	0.1	0.55
(1,295)	1:11:A:TRP:HD1	1:24:A:PRO:HD3	10	0.51	0.11	0.52
(3,62)	1:11:A:TRP:HD1	1:24:A:PRO:HD3	10	0.51	0.11	0.52
(1,449)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:H	10	0.51	0.26	0.44
(3,120)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:H	10	0.51	0.26	0.44
(1,123)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD11	10	0.5	0.18	0.4
(1,123)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD12	10	0.5	0.18	0.4
(1,123)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD13	10	0.5	0.18	0.4
(3,24)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD11	10	0.5	0.18	0.4
(3,24)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD12	10	0.5	0.18	0.4
(3,24)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD13	10	0.5	0.18	0.4
(1,21)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	10	0.5	0.01	0.5
(1,21)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	10	0.5	0.01	0.5
(1,21)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	10	0.5	0.01	0.5
(3,4)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	10	0.5	0.01	0.5
(3,4)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	10	0.5	0.01	0.5
(3,4)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	10	0.5	0.01	0.5
(1,481)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:H	10	0.5	0.04	0.5
(3,133)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:H	10	0.5	0.04	0.5
(1,259)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG2	10	0.5	0.01	0.5
(3,46)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG2	10	0.5	0.01	0.5
(1,339)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HD3	10	0.49	0.07	0.46
(3,80)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HD3	10	0.49	0.07	0.46
(1,406)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG3	10	0.49	0.03	0.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(3,105)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG3	10	0.49	0.03	0.5
(1,380)	1:11:A:TRP:HE1	1:23:A:PRO:HD2	10	0.49	0.05	0.48
(2,283)	1:11:A:TRP:HE1	1:23:A:PRO:HD2	10	0.49	0.05	0.48
(1,466)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HB2	10	0.48	0.06	0.48
(3,126)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HB2	10	0.48	0.06	0.48
(1,493)	1:7:A:LEU:HB3	1:8:A:TYR:H	10	0.47	0.09	0.53
(2,358)	1:7:A:LEU:HB3	1:8:A:TYR:H	10	0.47	0.09	0.53
(1,680)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD11	10	0.47	0.03	0.47
(1,680)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD12	10	0.47	0.03	0.47
(1,680)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD13	10	0.47	0.03	0.47
(3,208)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD11	10	0.47	0.03	0.47
(3,208)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD12	10	0.47	0.03	0.47
(3,208)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD13	10	0.47	0.03	0.47
(1,291)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD2	10	0.46	0.01	0.46
(2,231)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD2	10	0.46	0.01	0.46
(1,402)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:HD1	10	0.46	0.04	0.45
(1,402)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:HD2	10	0.46	0.04	0.45
(3,102)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:HD1	10	0.46	0.04	0.45
(3,102)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:HD2	10	0.46	0.04	0.45
(1,344)	1:11:A:TRP:HZ3	1:16:A:GLY:HA2	10	0.46	0.43	0.2
(2,262)	1:11:A:TRP:HZ3	1:16:A:GLY:HA2	10	0.46	0.43	0.2
(1,122)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HB3	10	0.45	0.02	0.45
(3,23)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HB3	10	0.45	0.02	0.45
(1,44)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HG	10	0.45	0.01	0.45
(3,6)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HG	10	0.45	0.01	0.45
(1,35)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HD2	10	0.45	0.13	0.45
(2,31)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HD2	10	0.45	0.13	0.45
(1,341)	1:11:A:TRP:HZ2	1:16:A:GLY:HA2	10	0.44	0.13	0.38
(3,81)	1:11:A:TRP:HZ2	1:16:A:GLY:HA2	10	0.44	0.13	0.38
(1,336)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD2	10	0.44	0.05	0.46
(2,259)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD2	10	0.44	0.05	0.46
(1,55)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB2	10	0.44	0.02	0.45
(3,11)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB2	10	0.44	0.02	0.45
(1,269)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HE21	10	0.44	0.02	0.45
(1,269)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HE21	10	0.44	0.02	0.45
(1,269)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HE21	10	0.44	0.02	0.45
(3,51)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HE21	10	0.44	0.02	0.45
(3,51)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HE21	10	0.44	0.02	0.45
(3,51)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HE21	10	0.44	0.02	0.45
(1,234)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG3	10	0.44	0.02	0.44
(3,40)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG3	10	0.44	0.02	0.44
(1,410)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	10	0.43	0.02	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,410)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB3	10	0.43	0.02	0.42
(3,107)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	10	0.43	0.02	0.42
(3,107)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB3	10	0.43	0.02	0.42
(1,343)	1:11:A:TRP:HE3	1:16:A:GLY:HA2	10	0.42	0.19	0.33
(1,479)	1:10:A:GLN:HB3	1:12:A:LEU:H	10	0.42	0.05	0.4
(3,82)	1:11:A:TRP:HE3	1:16:A:GLY:HA2	10	0.42	0.19	0.33
(3,132)	1:10:A:GLN:HB3	1:12:A:LEU:H	10	0.42	0.05	0.4
(1,582)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HA	10	0.42	0.02	0.42
(1,582)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HA	10	0.42	0.02	0.42
(1,582)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HA	10	0.42	0.02	0.42
(3,169)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HA	10	0.42	0.02	0.42
(3,169)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HA	10	0.42	0.02	0.42
(3,169)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HA	10	0.42	0.02	0.42
(1,90)	1:10:A:GLN:HB3	1:10:A:GLN:HE22	10	0.41	0.01	0.41
(3,18)	1:10:A:GLN:HB3	1:10:A:GLN:HE22	10	0.41	0.01	0.41
(1,265)	1:10:A:GLN:HE21	1:13:A:LYS:HB2	10	0.4	0.04	0.39
(1,265)	1:10:A:GLN:HE21	1:13:A:LYS:HB3	10	0.4	0.04	0.39
(3,49)	1:10:A:GLN:HE21	1:13:A:LYS:HB2	10	0.4	0.04	0.39
(3,49)	1:10:A:GLN:HE21	1:13:A:LYS:HB3	10	0.4	0.04	0.39
(1,360)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	10	0.39	0.02	0.38
(2,271)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	10	0.39	0.02	0.38
(1,459)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HB	10	0.38	0.02	0.39
(3,123)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HB	10	0.38	0.02	0.39
(1,547)	1:23:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG3	10	0.38	0.01	0.38
(2,394)	1:23:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG3	10	0.38	0.01	0.38
(1,538)	1:23:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	10	0.37	0.02	0.38
(2,390)	1:23:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	10	0.37	0.02	0.38
(1,637)	1:12:A:LEU:HB2	1:13:A:LYS:H	10	0.37	0.04	0.38
(3,195)	1:12:A:LEU:HB2	1:13:A:LYS:H	10	0.37	0.04	0.38
(1,407)	1:13:A:LYS:HB2	1:14:A:ASP:HA	10	0.36	0.1	0.36
(1,407)	1:13:A:LYS:HB3	1:14:A:ASP:HA	10	0.36	0.1	0.36
(3,106)	1:13:A:LYS:HB2	1:14:A:ASP:HA	10	0.36	0.1	0.36
(3,106)	1:13:A:LYS:HB3	1:14:A:ASP:HA	10	0.36	0.1	0.36
(1,623)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:H	10	0.35	0.04	0.34
(3,190)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:H	10	0.35	0.04	0.34
(1,253)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HG2	10	0.35	0.02	0.35
(1,253)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HG3	10	0.35	0.02	0.35
(2,209)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HG2	10	0.35	0.02	0.35
(2,209)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HG3	10	0.35	0.02	0.35
(1,117)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD11	10	0.34	0.06	0.38
(1,117)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD12	10	0.34	0.06	0.38
(1,117)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD13	10	0.34	0.06	0.38

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(3,22)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD11	10	0.34	0.06	0.38
(3,22)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD12	10	0.34	0.06	0.38
(3,22)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD13	10	0.34	0.06	0.38
(1,137)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HG2	10	0.34	0.08	0.37
(1,137)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HG2	10	0.34	0.08	0.37
(3,28)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HG2	10	0.34	0.08	0.37
(3,28)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HG2	10	0.34	0.08	0.37
(1,358)	1:11:A:TRP:HZ3	1:24:A:PRO:HG3	10	0.33	0.04	0.34
(3,89)	1:11:A:TRP:HZ3	1:24:A:PRO:HG3	10	0.33	0.04	0.34
(1,654)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HG2	10	0.33	0.02	0.34
(2,457)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HG2	10	0.33	0.02	0.34
(1,15)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	10	0.33	0.04	0.31
(1,15)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	10	0.33	0.04	0.31
(1,15)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	10	0.33	0.04	0.31
(1,418)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HB	10	0.33	0.05	0.34
(3,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	10	0.33	0.04	0.31
(3,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	10	0.33	0.04	0.31
(3,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	10	0.33	0.04	0.31
(3,110)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HB	10	0.33	0.05	0.34
(1,533)	1:5:A:VAL:H	1:7:A:LEU:HD21	10	0.33	0.06	0.3
(1,533)	1:5:A:VAL:H	1:7:A:LEU:HD22	10	0.33	0.06	0.3
(1,533)	1:5:A:VAL:H	1:7:A:LEU:HD23	10	0.33	0.06	0.3
(3,148)	1:5:A:VAL:H	1:7:A:LEU:HD21	10	0.33	0.06	0.3
(3,148)	1:5:A:VAL:H	1:7:A:LEU:HD22	10	0.33	0.06	0.3
(3,148)	1:5:A:VAL:H	1:7:A:LEU:HD23	10	0.33	0.06	0.3
(1,172)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HG3	10	0.32	0.02	0.32
(2,141)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HG3	10	0.32	0.02	0.32
(1,577)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HA	10	0.32	0.04	0.34
(1,577)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HA	10	0.32	0.04	0.34
(1,577)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HA	10	0.32	0.04	0.34
(3,164)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HA	10	0.32	0.04	0.34
(3,164)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HA	10	0.32	0.04	0.34
(3,164)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HA	10	0.32	0.04	0.34
(1,333)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HA	10	0.31	0.06	0.32
(3,77)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HA	10	0.31	0.06	0.32
(1,575)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	10	0.31	0.03	0.3
(1,575)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	10	0.31	0.03	0.3
(1,575)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	10	0.31	0.03	0.3
(3,163)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	10	0.31	0.03	0.3
(3,163)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	10	0.31	0.03	0.3
(3,163)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	10	0.31	0.03	0.3
(1,233)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG2	10	0.3	0.0	0.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(3,39)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG2	10	0.3	0.0	0.3
(1,660)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HA	10	0.29	0.01	0.3
(1,660)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HA	10	0.29	0.01	0.3
(1,660)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HA	10	0.29	0.01	0.3
(3,199)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HA	10	0.29	0.01	0.3
(3,199)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HA	10	0.29	0.01	0.3
(3,199)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HA	10	0.29	0.01	0.3
(1,463)	1:7:A:LEU:H	1:10:A:GLN:HB3	10	0.29	0.06	0.26
(3,125)	1:7:A:LEU:H	1:10:A:GLN:HB3	10	0.29	0.06	0.26
(1,174)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HG3	10	0.28	0.01	0.28
(3,32)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HG3	10	0.28	0.01	0.28
(1,359)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	10	0.28	0.05	0.28
(1,562)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HB	10	0.28	0.03	0.29
(1,562)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HB	10	0.28	0.03	0.29
(1,562)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HB	10	0.28	0.03	0.29
(2,270)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	10	0.28	0.05	0.28
(3,156)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HB	10	0.28	0.03	0.29
(3,156)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HB	10	0.28	0.03	0.29
(3,156)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HB	10	0.28	0.03	0.29
(1,321)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB2	10	0.28	0.11	0.23
(1,321)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB2	10	0.28	0.11	0.23
(2,249)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB2	10	0.28	0.11	0.23
(2,249)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB2	10	0.28	0.11	0.23
(1,612)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HB2	10	0.27	0.07	0.24
(1,612)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HB2	10	0.27	0.07	0.24
(1,612)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HB2	10	0.27	0.07	0.24
(2,427)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HB2	10	0.27	0.07	0.24
(2,427)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HB2	10	0.27	0.07	0.24
(2,427)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HB2	10	0.27	0.07	0.24
(1,347)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HB2	10	0.27	0.04	0.28
(2,265)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HB2	10	0.27	0.04	0.28
(1,636)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:H	10	0.26	0.03	0.28
(1,636)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:H	10	0.26	0.03	0.28
(1,636)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:H	10	0.26	0.03	0.28
(2,442)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:H	10	0.26	0.03	0.28
(2,442)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:H	10	0.26	0.03	0.28
(2,442)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:H	10	0.26	0.03	0.28
(1,260)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG3	10	0.26	0.03	0.26
(3,47)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG3	10	0.26	0.03	0.26
(1,300)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG2	10	0.26	0.11	0.2
(1,300)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG2	10	0.26	0.11	0.2
(3,65)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG2	10	0.26	0.11	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(3,65)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG2	10	0.26	0.11	0.2
(1,302)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB3	10	0.25	0.05	0.23
(1,302)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB3	10	0.25	0.05	0.23
(3,66)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB3	10	0.25	0.05	0.23
(3,66)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB3	10	0.25	0.05	0.23
(1,420)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG2	10	0.25	0.04	0.26
(2,310)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG2	10	0.25	0.04	0.26
(1,354)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HB2	10	0.24	0.07	0.2
(3,87)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HB2	10	0.24	0.07	0.2
(1,650)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HD11	10	0.24	0.04	0.24
(1,650)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HD12	10	0.24	0.04	0.24
(1,650)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HD13	10	0.24	0.04	0.24
(1,650)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HD11	10	0.24	0.04	0.24
(1,650)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HD12	10	0.24	0.04	0.24
(1,650)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HD13	10	0.24	0.04	0.24
(3,197)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HD11	10	0.24	0.04	0.24
(3,197)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HD12	10	0.24	0.04	0.24
(3,197)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HD13	10	0.24	0.04	0.24
(3,197)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HD11	10	0.24	0.04	0.24
(3,197)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HD12	10	0.24	0.04	0.24
(3,197)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HD13	10	0.24	0.04	0.24
(1,301)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	10	0.24	0.11	0.16
(1,301)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	10	0.24	0.11	0.16
(1,524)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:H	10	0.24	0.01	0.24
(2,236)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	10	0.24	0.11	0.16
(2,236)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	10	0.24	0.11	0.16
(2,379)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:H	10	0.24	0.01	0.24
(1,288)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	10	0.23	0.01	0.23
(2,228)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	10	0.23	0.01	0.23
(1,69)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HB3	10	0.23	0.0	0.23
(2,55)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HB3	10	0.23	0.0	0.23
(1,171)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD3	10	0.23	0.02	0.22
(1,328)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:HZ3	10	0.23	0.04	0.24
(2,140)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD3	10	0.23	0.02	0.22
(2,255)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:HZ3	10	0.23	0.04	0.24
(1,146)	1:13:A:LYS:HA	1:14:A:ASP:H	10	0.23	0.01	0.23
(3,31)	1:13:A:LYS:HA	1:14:A:ASP:H	10	0.23	0.01	0.23
(1,580)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD11	10	0.22	0.01	0.22
(1,580)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD12	10	0.22	0.01	0.22
(1,580)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD13	10	0.22	0.01	0.22
(3,167)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD11	10	0.22	0.01	0.22
(3,167)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD12	10	0.22	0.01	0.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(3,167)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD13	10	0.22	0.01	0.22
(1,167)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG3	10	0.22	0.01	0.23
(2,136)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG3	10	0.22	0.01	0.23
(1,608)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG12	10	0.22	0.02	0.22
(1,608)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG12	10	0.22	0.02	0.22
(1,608)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG12	10	0.22	0.02	0.22
(3,184)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG12	10	0.22	0.02	0.22
(3,184)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG12	10	0.22	0.02	0.22
(3,184)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG12	10	0.22	0.02	0.22
(1,240)	1:24:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD2	10	0.22	0.01	0.21
(2,199)	1:24:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD2	10	0.22	0.01	0.21
(1,644)	1:15:A:GLY:HA2	1:16:A:GLY:H	10	0.21	0.15	0.17
(2,449)	1:15:A:GLY:HA2	1:16:A:GLY:H	10	0.21	0.15	0.17
(1,36)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HD3	10	0.21	0.06	0.2
(3,5)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HD3	10	0.21	0.06	0.2
(1,229)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	10	0.2	0.01	0.2
(2,191)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	10	0.2	0.01	0.2
(1,284)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	10	0.2	0.01	0.2
(2,225)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	10	0.2	0.01	0.2
(1,454)	1:16:A:GLY:H	1:17:A:PRO:HD3	10	0.2	0.02	0.2
(2,333)	1:16:A:GLY:H	1:17:A:PRO:HD3	10	0.2	0.02	0.2
(1,16)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG21	10	0.2	0.01	0.2
(1,16)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG22	10	0.2	0.01	0.2
(1,16)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG23	10	0.2	0.01	0.2
(1,349)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG2	10	0.2	0.01	0.2
(3,2)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG21	10	0.2	0.01	0.2
(3,2)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG22	10	0.2	0.01	0.2
(3,2)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG23	10	0.2	0.01	0.2
(3,83)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG2	10	0.2	0.01	0.2
(1,648)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:H	10	0.19	0.02	0.2
(2,453)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:H	10	0.19	0.02	0.2
(1,297)	1:11:A:TRP:HD1	1:23:A:PRO:HA	10	0.19	0.03	0.18
(3,63)	1:11:A:TRP:HD1	1:23:A:PRO:HA	10	0.19	0.03	0.18
(1,57)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB3	10	0.19	0.01	0.19
(2,46)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB3	10	0.19	0.01	0.19
(1,417)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	10	0.19	0.03	0.19
(2,308)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	10	0.19	0.03	0.19
(1,100)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HB3	10	0.18	0.01	0.18
(2,82)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HB3	10	0.18	0.01	0.18
(1,480)	1:10:A:GLN:HB2	1:12:A:LEU:H	10	0.18	0.03	0.18
(2,348)	1:10:A:GLN:HB2	1:12:A:LEU:H	10	0.18	0.03	0.18
(1,275)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HD1	10	0.17	0.06	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,275)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HD2	10	0.17	0.06	0.15
(1,601)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HB2	10	0.17	0.02	0.18
(1,601)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HB2	10	0.17	0.02	0.18
(1,601)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HB2	10	0.17	0.02	0.18
(2,422)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HB2	10	0.17	0.02	0.18
(2,422)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HB2	10	0.17	0.02	0.18
(2,422)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HB2	10	0.17	0.02	0.18
(3,54)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HD1	10	0.17	0.06	0.15
(3,54)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HD2	10	0.17	0.06	0.15
(1,271)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HD1	10	0.17	0.03	0.17
(2,220)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HD1	10	0.17	0.03	0.17
(1,568)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HA	10	0.16	0.02	0.16
(1,568)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HA	10	0.16	0.02	0.16
(1,568)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HA	10	0.16	0.02	0.16
(3,160)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HA	10	0.16	0.02	0.16
(3,160)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HA	10	0.16	0.02	0.16
(3,160)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HA	10	0.16	0.02	0.16
(1,525)	1:24:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	10	0.16	0.02	0.16
(2,380)	1:24:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	10	0.16	0.02	0.16
(1,270)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HE22	10	0.16	0.01	0.16
(1,270)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HE22	10	0.16	0.01	0.16
(1,270)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HE22	10	0.16	0.01	0.16
(2,219)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HE22	10	0.16	0.01	0.16
(2,219)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HE22	10	0.16	0.01	0.16
(2,219)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HE22	10	0.16	0.01	0.16
(1,264)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HE1	10	0.14	0.0	0.15
(3,48)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HE1	10	0.14	0.0	0.15
(1,426)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB3	10	0.14	0.02	0.15
(2,315)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB3	10	0.14	0.02	0.15
(1,70)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:H	10	0.14	0.02	0.13
(2,56)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:H	10	0.14	0.02	0.13
(1,530)	1:23:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	10	0.13	0.03	0.12
(2,383)	1:23:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	10	0.13	0.03	0.12
(1,630)	1:11:A:TRP:HH2	1:11:A:TRP:HZ3	10	0.13	0.01	0.13
(2,440)	1:11:A:TRP:HH2	1:11:A:TRP:HZ3	10	0.13	0.01	0.13
(1,41)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HA	10	0.11	0.0	0.11
(2,36)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HA	10	0.11	0.0	0.11
(1,633)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:H	9	1.5	0.96	2.14
(1,633)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:H	9	1.5	0.96	2.14
(1,633)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:H	9	1.5	0.96	2.14
(3,193)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:H	9	1.5	0.96	2.14
(3,193)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:H	9	1.5	0.96	2.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(3,193)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:H	9	1.5	0.96	2.14
(1,550)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HB2	9	0.98	0.35	1.18
(3,154)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HB2	9	0.98	0.35	1.18
(1,602)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG3	9	0.66	0.57	0.18
(1,602)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG3	9	0.66	0.57	0.18
(1,602)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG3	9	0.66	0.57	0.18
(3,180)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG3	9	0.66	0.57	0.18
(3,180)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG3	9	0.66	0.57	0.18
(3,180)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG3	9	0.66	0.57	0.18
(1,424)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HD2	9	0.5	0.35	0.34
(2,314)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HD2	9	0.5	0.35	0.34
(1,451)	1:16:A:GLY:H	1:17:A:PRO:HD2	9	0.38	0.09	0.4
(2,330)	1:16:A:GLY:H	1:17:A:PRO:HD2	9	0.38	0.09	0.4
(1,205)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HG3	9	0.34	0.28	0.25
(2,171)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HG3	9	0.34	0.28	0.25
(1,206)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD2	9	0.33	0.09	0.34
(3,35)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD2	9	0.33	0.09	0.34
(1,199)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG2	9	0.24	0.06	0.23
(1,199)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HG2	9	0.24	0.06	0.23
(3,34)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG2	9	0.24	0.06	0.23
(3,34)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HG2	9	0.24	0.06	0.23
(1,201)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HD2	9	0.23	0.05	0.25
(2,167)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HD2	9	0.23	0.05	0.25
(1,299)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HE1	9	0.21	0.04	0.21
(1,299)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HE2	9	0.21	0.04	0.21
(3,64)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HE1	9	0.21	0.04	0.21
(3,64)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HE2	9	0.21	0.04	0.21
(1,534)	1:7:A:LEU:HD11	1:25:A:SER:H	9	0.15	0.02	0.15
(1,534)	1:7:A:LEU:HD12	1:25:A:SER:H	9	0.15	0.02	0.15
(1,534)	1:7:A:LEU:HD13	1:25:A:SER:H	9	0.15	0.02	0.15
(2,386)	1:7:A:LEU:HD11	1:25:A:SER:H	9	0.15	0.02	0.15
(2,386)	1:7:A:LEU:HD12	1:25:A:SER:H	9	0.15	0.02	0.15
(2,386)	1:7:A:LEU:HD13	1:25:A:SER:H	9	0.15	0.02	0.15
(1,128)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD2	8	1.01	0.02	1.01
(1,128)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD3	8	1.01	0.02	1.01
(3,27)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD2	8	1.01	0.02	1.01
(3,27)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD3	8	1.01	0.02	1.01
(1,217)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD3	8	0.64	0.06	0.6
(2,181)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD3	8	0.64	0.06	0.6
(1,143)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HD2	8	0.44	0.01	0.43
(1,143)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HD3	8	0.44	0.01	0.43
(3,30)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HD2	8	0.44	0.01	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(3,30)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HD3	8	0.44	0.01	0.43
(1,305)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HG	8	0.42	0.05	0.42
(1,305)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HG	8	0.42	0.05	0.42
(3,67)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HG	8	0.42	0.05	0.42
(3,67)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HG	8	0.42	0.05	0.42
(1,214)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG2	8	0.41	0.05	0.38
(1,214)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG3	8	0.41	0.05	0.38
(3,36)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG2	8	0.41	0.05	0.38
(3,36)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG3	8	0.41	0.05	0.38
(1,141)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HE2	8	0.4	0.03	0.4
(1,141)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HE3	8	0.4	0.03	0.4
(3,29)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HE2	8	0.4	0.03	0.4
(3,29)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HE3	8	0.4	0.03	0.4
(1,219)	1:22:A:PRO:HD3	1:22:A:PRO:HG2	8	0.39	0.06	0.44
(2,183)	1:22:A:PRO:HD3	1:22:A:PRO:HG2	8	0.39	0.06	0.44
(1,216)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD2	8	0.39	0.18	0.52
(2,180)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD2	8	0.39	0.18	0.52
(1,310)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG13	8	0.35	0.1	0.38
(1,310)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG13	8	0.35	0.1	0.38
(2,243)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG13	8	0.35	0.1	0.38
(2,243)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG13	8	0.35	0.1	0.38
(1,491)	1:7:A:LEU:HB2	1:8:A:TYR:H	8	0.28	0.06	0.31
(3,135)	1:7:A:LEU:HB2	1:8:A:TYR:H	8	0.28	0.06	0.31
(1,656)	1:10:A:GLN:HA	1:13:A:LYS:HE2	8	0.24	0.01	0.24
(1,656)	1:10:A:GLN:HA	1:13:A:LYS:HE3	8	0.24	0.01	0.24
(2,459)	1:10:A:GLN:HA	1:13:A:LYS:HE2	8	0.24	0.01	0.24
(2,459)	1:10:A:GLN:HA	1:13:A:LYS:HE3	8	0.24	0.01	0.24
(1,278)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HA	8	0.2	0.05	0.21
(1,278)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HA	8	0.2	0.05	0.21
(3,56)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HA	8	0.2	0.05	0.21
(3,56)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HA	8	0.2	0.05	0.21
(1,189)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HG2	8	0.18	0.01	0.18
(2,156)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HG2	8	0.18	0.01	0.18
(1,436)	1:21:A:ARG:HG2	1:22:A:PRO:HD2	8	0.15	0.03	0.15
(2,324)	1:21:A:ARG:HG2	1:22:A:PRO:HD2	8	0.15	0.03	0.15
(1,674)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HD2	8	0.14	0.01	0.14
(1,674)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HD2	8	0.14	0.01	0.14
(1,674)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HD2	8	0.14	0.01	0.14
(1,674)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HD3	8	0.14	0.01	0.14
(1,674)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HD3	8	0.14	0.01	0.14
(1,674)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HD3	8	0.14	0.01	0.14
(2,470)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HD2	8	0.14	0.01	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(2,470)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HD2	8	0.14	0.01	0.14
(2,470)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HD2	8	0.14	0.01	0.14
(2,470)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HD3	8	0.14	0.01	0.14
(2,470)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HD3	8	0.14	0.01	0.14
(2,470)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HD3	8	0.14	0.01	0.14
(1,400)	1:8:A:TYR:H	1:8:A:TYR:HD1	8	0.14	0.02	0.15
(1,400)	1:8:A:TYR:H	1:8:A:TYR:HD2	8	0.14	0.02	0.15
(1,659)	1:10:A:GLN:HA	1:13:A:LYS:HG2	8	0.14	0.02	0.15
(2,299)	1:8:A:TYR:H	1:8:A:TYR:HD1	8	0.14	0.02	0.15
(2,299)	1:8:A:TYR:H	1:8:A:TYR:HD2	8	0.14	0.02	0.15
(2,461)	1:10:A:GLN:HA	1:13:A:LYS:HG2	8	0.14	0.02	0.15
(1,543)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD3	7	1.08	0.1	1.1
(1,543)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD3	7	1.08	0.1	1.1
(3,152)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD3	7	1.08	0.1	1.1
(3,152)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD3	7	1.08	0.1	1.1
(1,639)	1:14:A:ASP:HB2	1:16:A:GLY:H	7	0.47	0.23	0.54
(2,444)	1:14:A:ASP:HB2	1:16:A:GLY:H	7	0.47	0.23	0.54
(1,413)	1:3:A:GLU:HA	1:6:A:ARG:HG3	7	0.3	0.03	0.31
(1,615)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HG3	7	0.3	0.03	0.31
(1,615)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HG3	7	0.3	0.03	0.31
(1,615)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HG3	7	0.3	0.03	0.31
(2,305)	1:3:A:GLU:HA	1:6:A:ARG:HG3	7	0.3	0.03	0.31
(2,430)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HG3	7	0.3	0.03	0.31
(2,430)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HG3	7	0.3	0.03	0.31
(2,430)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HG3	7	0.3	0.03	0.31
(1,614)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HG3	7	0.29	0.02	0.29
(1,614)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HG3	7	0.29	0.02	0.29
(1,614)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HG3	7	0.29	0.02	0.29
(2,429)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HG3	7	0.29	0.02	0.29
(2,429)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HG3	7	0.29	0.02	0.29
(2,429)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HG3	7	0.29	0.02	0.29
(1,427)	1:14:A:ASP:HB2	1:19:A:SER:HB2	7	0.27	0.21	0.18
(2,316)	1:14:A:ASP:HB2	1:19:A:SER:HB2	7	0.27	0.21	0.18
(1,26)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG3	7	0.21	0.01	0.21
(2,22)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG3	7	0.21	0.01	0.21
(1,441)	1:22:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	7	0.2	0.05	0.22
(3,115)	1:22:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	7	0.2	0.05	0.22
(1,386)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:H	7	0.15	0.03	0.17
(2,288)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:H	7	0.15	0.03	0.17
(1,681)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:HD21	6	1.78	0.03	1.78
(1,681)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:HD22	6	1.78	0.03	1.78
(1,681)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:HD23	6	1.78	0.03	1.78

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(3,209)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:HD21	6	1.78	0.03	1.78
(3,209)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:HD22	6	1.78	0.03	1.78
(3,209)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:HD23	6	1.78	0.03	1.78
(1,497)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD21	6	1.72	0.05	1.71
(1,497)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD22	6	1.72	0.05	1.71
(1,497)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD23	6	1.72	0.05	1.71
(3,137)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD21	6	1.72	0.05	1.71
(3,137)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD22	6	1.72	0.05	1.71
(3,137)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD23	6	1.72	0.05	1.71
(1,607)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD21	6	1.56	0.03	1.56
(1,607)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD22	6	1.56	0.03	1.56
(1,607)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD23	6	1.56	0.03	1.56
(3,183)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD21	6	1.56	0.03	1.56
(3,183)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD22	6	1.56	0.03	1.56
(3,183)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD23	6	1.56	0.03	1.56
(1,632)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD21	6	1.34	0.02	1.34
(1,632)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD22	6	1.34	0.02	1.34
(1,632)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD23	6	1.34	0.02	1.34
(3,192)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD21	6	1.34	0.02	1.34
(3,192)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD22	6	1.34	0.02	1.34
(3,192)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD23	6	1.34	0.02	1.34
(1,470)	1:12:A:LEU:HG	1:16:A:GLY:H	6	1.05	0.66	1.5
(3,129)	1:12:A:LEU:HG	1:16:A:GLY:H	6	1.05	0.66	1.5
(1,315)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD21	6	0.94	0.04	0.93
(1,315)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD22	6	0.94	0.04	0.93
(1,315)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD23	6	0.94	0.04	0.93
(1,315)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD21	6	0.94	0.04	0.93
(1,315)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD22	6	0.94	0.04	0.93
(1,315)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD23	6	0.94	0.04	0.93
(3,70)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD21	6	0.94	0.04	0.93
(3,70)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD22	6	0.94	0.04	0.93
(3,70)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD23	6	0.94	0.04	0.93
(3,70)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD21	6	0.94	0.04	0.93
(3,70)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD22	6	0.94	0.04	0.93
(3,70)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD23	6	0.94	0.04	0.93
(1,621)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:HA3	6	0.83	0.34	1.0
(1,621)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:HA3	6	0.83	0.34	1.0
(1,621)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:HA3	6	0.83	0.34	1.0
(3,188)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:HA3	6	0.83	0.34	1.0
(3,188)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:HA3	6	0.83	0.34	1.0
(3,188)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:HA3	6	0.83	0.34	1.0
(1,124)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD21	6	0.78	0.02	0.78

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,124)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD22	6	0.78	0.02	0.78
(1,124)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD23	6	0.78	0.02	0.78
(3,25)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD21	6	0.78	0.02	0.78
(3,25)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD22	6	0.78	0.02	0.78
(3,25)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD23	6	0.78	0.02	0.78
(1,366)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD11	6	0.72	0.04	0.71
(1,366)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD12	6	0.72	0.04	0.71
(1,366)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD13	6	0.72	0.04	0.71
(3,92)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD11	6	0.72	0.04	0.71
(3,92)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD12	6	0.72	0.04	0.71
(3,92)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD13	6	0.72	0.04	0.71
(1,316)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD21	6	0.72	0.03	0.7
(1,316)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD22	6	0.72	0.03	0.7
(1,316)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD23	6	0.72	0.03	0.7
(1,316)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD21	6	0.72	0.03	0.7
(1,316)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD22	6	0.72	0.03	0.7
(1,316)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD23	6	0.72	0.03	0.7
(2,246)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD21	6	0.72	0.03	0.7
(2,246)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD22	6	0.72	0.03	0.7
(2,246)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD23	6	0.72	0.03	0.7
(2,246)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD21	6	0.72	0.03	0.7
(2,246)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD22	6	0.72	0.03	0.7
(2,246)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD23	6	0.72	0.03	0.7
(1,108)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD11	6	0.69	0.02	0.68
(1,108)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD12	6	0.69	0.02	0.68
(1,108)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD13	6	0.69	0.02	0.68
(3,20)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD11	6	0.69	0.02	0.68
(3,20)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD12	6	0.69	0.02	0.68
(3,20)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD13	6	0.69	0.02	0.68
(1,581)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD21	6	0.48	0.03	0.49
(1,581)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD22	6	0.48	0.03	0.49
(1,581)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD23	6	0.48	0.03	0.49
(3,168)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD21	6	0.48	0.03	0.49
(3,168)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD22	6	0.48	0.03	0.49
(3,168)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD23	6	0.48	0.03	0.49
(1,116)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD21	6	0.41	0.01	0.41
(1,116)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD22	6	0.41	0.01	0.41
(1,116)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD23	6	0.41	0.01	0.41
(3,21)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD21	6	0.41	0.01	0.41
(3,21)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD22	6	0.41	0.01	0.41
(3,21)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD23	6	0.41	0.01	0.41
(1,372)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD21	6	0.37	0.02	0.37

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,372)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD22	6	0.37	0.02	0.37
(1,372)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD23	6	0.37	0.02	0.37
(2,278)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD21	6	0.37	0.02	0.37
(2,278)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD22	6	0.37	0.02	0.37
(2,278)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD23	6	0.37	0.02	0.37
(1,381)	1:11:A:TRP:HE1	1:19:A:SER:HB2	6	0.28	0.12	0.3
(2,284)	1:11:A:TRP:HE1	1:19:A:SER:HB2	6	0.28	0.12	0.3
(1,28)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HD3	6	0.24	0.06	0.22
(2,24)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HD3	6	0.24	0.06	0.22
(1,528)	1:24:A:PRO:HG2	1:25:A:SER:H	6	0.18	0.04	0.2
(2,382)	1:24:A:PRO:HG2	1:25:A:SER:H	6	0.18	0.04	0.2
(1,281)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD3	6	0.13	0.02	0.12
(3,59)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD3	6	0.13	0.02	0.12
(1,595)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG11	6	0.13	0.02	0.12
(1,595)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG12	6	0.13	0.02	0.12
(1,595)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG13	6	0.13	0.02	0.12
(2,419)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG11	6	0.13	0.02	0.12
(2,419)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG12	6	0.13	0.02	0.12
(2,419)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG13	6	0.13	0.02	0.12
(1,84)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HB3	6	0.12	0.01	0.11
(2,68)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HB3	6	0.12	0.01	0.11
(1,508)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HD2	6	0.11	0.01	0.11
(1,508)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HD3	6	0.11	0.01	0.11
(2,366)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HD2	6	0.11	0.01	0.11
(2,366)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HD3	6	0.11	0.01	0.11
(1,221)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD3	5	0.56	0.32	0.3
(3,38)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD3	5	0.56	0.32	0.3
(1,383)	1:11:A:TRP:HE1	1:17:A:PRO:HA	5	0.15	0.06	0.14
(2,285)	1:11:A:TRP:HE1	1:17:A:PRO:HA	5	0.15	0.06	0.14
(1,452)	1:12:A:LEU:HA	1:16:A:GLY:H	5	0.15	0.03	0.17
(1,613)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HB2	5	0.15	0.04	0.17
(1,613)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HB2	5	0.15	0.04	0.17
(1,613)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HB2	5	0.15	0.04	0.17
(2,331)	1:12:A:LEU:HA	1:16:A:GLY:H	5	0.15	0.03	0.17
(2,428)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HB2	5	0.15	0.04	0.17
(2,428)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HB2	5	0.15	0.04	0.17
(2,428)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HB2	5	0.15	0.04	0.17
(1,325)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HA	5	0.15	0.03	0.16
(2,253)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HA	5	0.15	0.03	0.16
(1,85)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HG3	5	0.14	0.02	0.14
(2,69)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HG3	5	0.14	0.02	0.14
(1,511)	1:13:A:LYS:HB2	1:14:A:ASP:H	5	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)
(1,511)	1:13:A:LYS:HB3	1:14:A:ASP:H	5	0.14	0.02	0.14
(2,368)	1:13:A:LYS:HB2	1:14:A:ASP:H	5	0.14	0.02	0.14
(2,368)	1:13:A:LYS:HB3	1:14:A:ASP:H	5	0.14	0.02	0.14
(1,455)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:H	5	0.11	0.01	0.11
(3,122)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:H	5	0.11	0.01	0.11
(1,385)	1:11:A:TRP:HE1	1:11:A:TRP:HZ2	5	0.11	0.0	0.11
(2,287)	1:11:A:TRP:HE1	1:11:A:TRP:HZ2	5	0.11	0.0	0.11
(1,540)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HG	4	2.06	0.03	2.06
(3,150)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HG	4	2.06	0.03	2.06
(1,642)	1:16:A:GLY:H	1:19:A:SER:HB3	4	1.27	0.07	1.27
(2,447)	1:16:A:GLY:H	1:19:A:SER:HB3	4	1.27	0.07	1.27
(1,121)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HG	4	1.2	0.03	1.2
(2,99)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HG	4	1.2	0.03	1.2
(1,322)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HG	4	1.02	0.02	1.02
(2,250)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HG	4	1.02	0.02	1.02
(1,314)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD11	4	0.98	0.12	0.94
(1,314)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD12	4	0.98	0.12	0.94
(1,314)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD13	4	0.98	0.12	0.94
(1,314)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD11	4	0.98	0.12	0.94
(1,314)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD12	4	0.98	0.12	0.94
(1,314)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD13	4	0.98	0.12	0.94
(2,245)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD11	4	0.98	0.12	0.94
(2,245)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD12	4	0.98	0.12	0.94
(2,245)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD13	4	0.98	0.12	0.94
(2,245)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD11	4	0.98	0.12	0.94
(2,245)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD12	4	0.98	0.12	0.94
(2,245)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD13	4	0.98	0.12	0.94
(1,113)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD11	4	0.84	0.02	0.83
(1,113)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD12	4	0.84	0.02	0.83
(1,113)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD13	4	0.84	0.02	0.83
(2,93)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD11	4	0.84	0.02	0.83
(2,93)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD12	4	0.84	0.02	0.83
(2,93)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD13	4	0.84	0.02	0.83
(1,678)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HD2	4	0.8	0.24	0.85
(1,678)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HD2	4	0.8	0.24	0.85
(1,678)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HD2	4	0.8	0.24	0.85
(2,472)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HD2	4	0.8	0.24	0.85
(2,472)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HD2	4	0.8	0.24	0.85
(2,472)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HD2	4	0.8	0.24	0.85
(1,306)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HG	4	0.72	0.14	0.71
(1,306)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HG	4	0.72	0.14	0.71
(2,239)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HG	4	0.72	0.14	0.71

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(2,239)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HG	4	0.72	0.14	0.71
(1,368)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD21	4	0.41	0.06	0.42
(1,368)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD22	4	0.41	0.06	0.42
(1,368)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD23	4	0.41	0.06	0.42
(2,275)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD21	4	0.41	0.06	0.42
(2,275)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD22	4	0.41	0.06	0.42
(2,275)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD23	4	0.41	0.06	0.42
(1,118)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD21	4	0.35	0.01	0.35
(1,118)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD22	4	0.35	0.01	0.35
(1,118)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD23	4	0.35	0.01	0.35
(2,96)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD21	4	0.35	0.01	0.35
(2,96)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD22	4	0.35	0.01	0.35
(2,96)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD23	4	0.35	0.01	0.35
(1,323)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HG	4	0.32	0.09	0.32
(2,251)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HG	4	0.32	0.09	0.32
(1,149)	1:14:A:ASP:H	1:14:A:ASP:HB3	4	0.3	0.11	0.35
(2,118)	1:14:A:ASP:H	1:14:A:ASP:HB3	4	0.3	0.11	0.35
(1,388)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:H	4	0.29	0.03	0.29
(3,99)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:H	4	0.29	0.03	0.29
(1,553)	1:10:A:GLN:HB3	1:13:A:LYS:HD2	4	0.25	0.15	0.24
(1,553)	1:10:A:GLN:HB3	1:13:A:LYS:HD3	4	0.25	0.15	0.24
(2,399)	1:10:A:GLN:HB3	1:13:A:LYS:HD2	4	0.25	0.15	0.24
(2,399)	1:10:A:GLN:HB3	1:13:A:LYS:HD3	4	0.25	0.15	0.24
(1,478)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:H	4	0.24	0.1	0.24
(1,478)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:H	4	0.24	0.1	0.24
(1,478)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:H	4	0.24	0.1	0.24
(2,347)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:H	4	0.24	0.1	0.24
(2,347)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:H	4	0.24	0.1	0.24
(2,347)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:H	4	0.24	0.1	0.24
(1,626)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HE3	4	0.22	0.06	0.24
(1,626)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HE3	4	0.22	0.06	0.24
(2,436)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HE3	4	0.22	0.06	0.24
(2,436)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HE3	4	0.22	0.06	0.24
(1,398)	1:11:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HE3	4	0.16	0.02	0.16
(2,298)	1:11:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HE3	4	0.16	0.02	0.16
(1,329)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD2	4	0.15	0.04	0.16
(3,74)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD2	4	0.15	0.04	0.16
(1,518)	1:13:A:LYS:HA	1:15:A:GLY:H	4	0.11	0.01	0.11
(2,373)	1:13:A:LYS:HA	1:15:A:GLY:H	4	0.11	0.01	0.11
(1,231)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HB2	4	0.11	0.0	0.11
(2,193)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HB2	4	0.11	0.0	0.11
(1,421)	1:1:A:GLU:HG2	1:3:A:GLU:HA	4	0.11	0.01	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,421)	1:1:A:GLU:HG3	1:3:A:GLU:HA	4	0.11	0.01	0.11
(2,311)	1:1:A:GLU:HG2	1:3:A:GLU:HA	4	0.11	0.01	0.11
(2,311)	1:1:A:GLU:HG3	1:3:A:GLU:HA	4	0.11	0.01	0.11
(1,437)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HD2	4	0.11	0.01	0.11
(2,325)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HD2	4	0.11	0.01	0.11
(1,666)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HD3	3	0.37	0.02	0.36
(2,466)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HD3	3	0.37	0.02	0.36
(1,179)	1:19:A:SER:HA	1:19:A:SER:HB3	3	0.32	0.0	0.32
(2,147)	1:19:A:SER:HA	1:19:A:SER:HB3	3	0.32	0.0	0.32
(1,409)	1:11:A:TRP:HA	1:14:A:ASP:HB3	3	0.28	0.05	0.28
(2,303)	1:11:A:TRP:HA	1:14:A:ASP:HB3	3	0.28	0.05	0.28
(1,33)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HD2	3	0.24	0.03	0.23
(2,29)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HD2	3	0.24	0.03	0.23
(1,521)	1:14:A:ASP:HB2	1:15:A:GLY:H	3	0.22	0.06	0.26
(1,620)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA3	3	0.22	0.04	0.25
(1,620)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA3	3	0.22	0.04	0.25
(1,620)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA3	3	0.22	0.04	0.25
(2,376)	1:14:A:ASP:HB2	1:15:A:GLY:H	3	0.22	0.06	0.26
(2,433)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA3	3	0.22	0.04	0.25
(2,433)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA3	3	0.22	0.04	0.25
(2,433)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA3	3	0.22	0.04	0.25
(1,412)	1:3:A:GLU:HA	1:6:A:ARG:HG2	3	0.21	0.01	0.21
(2,304)	1:3:A:GLU:HA	1:6:A:ARG:HG2	3	0.21	0.01	0.21
(1,34)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HD3	3	0.18	0.04	0.19
(2,30)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HD3	3	0.18	0.04	0.19
(1,486)	1:19:A:SER:HA	1:21:A:ARG:H	3	0.15	0.07	0.11
(2,353)	1:19:A:SER:HA	1:21:A:ARG:H	3	0.15	0.07	0.11
(1,186)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD2	3	0.14	0.02	0.15
(3,33)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD2	3	0.14	0.02	0.15
(1,107)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HG	3	0.14	0.02	0.14
(2,88)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HG	3	0.14	0.02	0.14
(1,22)	1:5:A:VAL:HA	1:6:A:ARG:H	3	0.13	0.01	0.13
(1,526)	1:5:A:VAL:H	1:6:A:ARG:HB2	3	0.13	0.01	0.14
(1,645)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:H	3	0.13	0.01	0.14
(2,18)	1:5:A:VAL:HA	1:6:A:ARG:H	3	0.13	0.01	0.13
(2,381)	1:5:A:VAL:H	1:6:A:ARG:HB2	3	0.13	0.01	0.14
(2,450)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:H	3	0.13	0.01	0.14
(1,27)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HD2	3	0.11	0.0	0.11
(1,27)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HD2	3	0.11	0.0	0.11
(1,546)	1:23:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG2	3	0.11	0.01	0.1
(2,23)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HD2	3	0.11	0.0	0.11
(2,23)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HD2	3	0.11	0.0	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

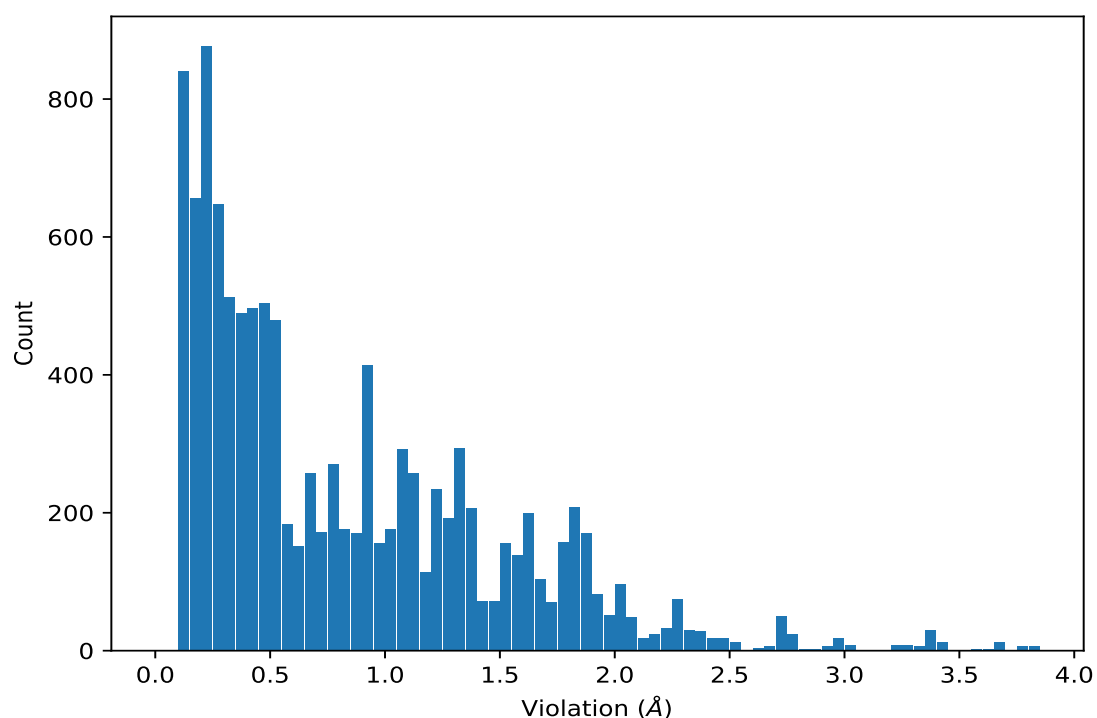
Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(3,153)	1:23:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG2	3	0.11	0.01	0.1
(1,444)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	2	1.06	0.02	1.06
(2,328)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	2	1.06	0.02	1.06
(1,145)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HG3	2	0.33	0.02	0.33
(2,115)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HG3	2	0.33	0.02	0.33
(1,374)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HG3	2	0.31	0.02	0.31
(2,280)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HG3	2	0.31	0.02	0.31
(1,144)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HG2	2	0.28	0.02	0.28
(2,114)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HG2	2	0.28	0.02	0.28
(1,317)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HG3	2	0.26	0.03	0.26
(2,247)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HG3	2	0.26	0.03	0.26
(1,251)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HB2	2	0.23	0.01	0.23
(1,251)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HB3	2	0.23	0.01	0.23
(2,207)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HB2	2	0.23	0.01	0.23
(2,207)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HB3	2	0.23	0.01	0.23
(1,129)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HG2	2	0.21	0.01	0.21
(2,102)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HG2	2	0.21	0.01	0.21
(1,109)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD21	2	0.18	0.01	0.18
(1,109)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD22	2	0.18	0.01	0.18
(1,109)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD23	2	0.18	0.01	0.18
(2,89)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD21	2	0.18	0.01	0.18
(2,89)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD22	2	0.18	0.01	0.18
(2,89)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD23	2	0.18	0.01	0.18
(1,212)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HB2	2	0.16	0.01	0.16
(2,177)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HB2	2	0.16	0.01	0.16
(1,127)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HB2	2	0.15	0.0	0.15
(1,127)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HB3	2	0.15	0.0	0.15
(2,101)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HB2	2	0.15	0.0	0.15
(2,101)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HB3	2	0.15	0.0	0.15

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)
(2,469)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD11	7	3.84
(2,469)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD12	7	3.84
(2,469)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD13	7	3.84
(1,670)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD11	7	3.84
(1,670)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD12	7	3.84
(1,670)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD13	7	3.84
(2,469)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD11	9	3.79
(2,469)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD12	9	3.79
(2,469)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD13	9	3.79
(1,670)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD11	9	3.79
(1,670)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD12	9	3.79
(1,670)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD13	9	3.79
(2,469)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD11	8	3.69
(2,469)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD12	8	3.69
(2,469)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD13	8	3.69
(1,670)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD11	8	3.69

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,670)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD12	8	3.69
(1,670)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD13	8	3.69
(2,469)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD11	10	3.67
(2,469)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD12	10	3.67
(2,469)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD13	10	3.67
(1,670)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD11	10	3.67
(1,670)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD12	10	3.67
(1,670)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD13	10	3.67
(3,158)	1:9:A:ILE:HB	1:13:A:LYS:HG3	6	3.61
(1,564)	1:9:A:ILE:HB	1:13:A:LYS:HG3	6	3.61
(3,158)	1:9:A:ILE:HB	1:13:A:LYS:HG3	4	3.56
(1,564)	1:9:A:ILE:HB	1:13:A:LYS:HG3	4	3.56
(3,136)	1:8:A:TYR:H	1:12:A:LEU:HD11	8	3.44
(3,136)	1:8:A:TYR:H	1:12:A:LEU:HD12	8	3.44
(3,136)	1:8:A:TYR:H	1:12:A:LEU:HD13	8	3.44
(3,136)	1:8:A:TYR:H	1:12:A:LEU:HD11	10	3.44
(3,136)	1:8:A:TYR:H	1:12:A:LEU:HD12	10	3.44
(3,136)	1:8:A:TYR:H	1:12:A:LEU:HD13	10	3.44
(1,495)	1:8:A:TYR:H	1:12:A:LEU:HD11	8	3.44
(1,495)	1:8:A:TYR:H	1:12:A:LEU:HD12	8	3.44
(1,495)	1:8:A:TYR:H	1:12:A:LEU:HD13	8	3.44
(1,495)	1:8:A:TYR:H	1:12:A:LEU:HD11	10	3.44
(1,495)	1:8:A:TYR:H	1:12:A:LEU:HD12	10	3.44
(1,495)	1:8:A:TYR:H	1:12:A:LEU:HD13	10	3.44
(3,202)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD21	6	3.38
(3,202)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD22	6	3.38
(3,202)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD23	6	3.38
(1,671)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD21	6	3.38
(1,671)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD22	6	3.38
(1,671)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD23	6	3.38
(3,202)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD21	3	3.37
(3,202)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD22	3	3.37
(3,202)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD23	3	3.37
(1,671)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD21	3	3.37
(1,671)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD22	3	3.37
(1,671)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD23	3	3.37
(3,202)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD21	4	3.36
(3,202)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD22	4	3.36
(3,202)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD23	4	3.36
(3,202)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD21	5	3.36
(3,202)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD22	5	3.36
(3,202)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD23	5	3.36

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,671)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD21	4	3.36
(1,671)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD22	4	3.36
(1,671)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD23	4	3.36
(1,671)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD21	5	3.36
(1,671)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD22	5	3.36
(1,671)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD23	5	3.36
(3,202)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD21	1	3.35
(3,202)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD22	1	3.35
(3,202)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD23	1	3.35
(1,671)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD21	1	3.35
(1,671)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD22	1	3.35
(1,671)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD23	1	3.35
(3,202)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD21	2	3.34
(3,202)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD22	2	3.34
(3,202)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD23	2	3.34
(1,671)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD21	2	3.34
(1,671)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD22	2	3.34
(1,671)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD23	2	3.34
(3,136)	1:8:A:TYR:H	1:12:A:LEU:HD11	9	3.3
(3,136)	1:8:A:TYR:H	1:12:A:LEU:HD12	9	3.3
(3,136)	1:8:A:TYR:H	1:12:A:LEU:HD13	9	3.3
(1,495)	1:8:A:TYR:H	1:12:A:LEU:HD11	9	3.3
(1,495)	1:8:A:TYR:H	1:12:A:LEU:HD12	9	3.3
(1,495)	1:8:A:TYR:H	1:12:A:LEU:HD13	9	3.3
(3,72)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG3	6	3.25
(1,320)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG3	6	3.25
(3,109)	1:24:A:PRO:HG3	1:25:A:SER:HA	7	3.24
(1,414)	1:24:A:PRO:HG3	1:25:A:SER:HA	7	3.24
(3,136)	1:8:A:TYR:H	1:12:A:LEU:HD11	7	3.22
(3,136)	1:8:A:TYR:H	1:12:A:LEU:HD12	7	3.22
(3,136)	1:8:A:TYR:H	1:12:A:LEU:HD13	7	3.22
(1,495)	1:8:A:TYR:H	1:12:A:LEU:HD11	7	3.22
(1,495)	1:8:A:TYR:H	1:12:A:LEU:HD12	7	3.22
(1,495)	1:8:A:TYR:H	1:12:A:LEU:HD13	7	3.22
(3,162)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HA	2	3.02
(3,162)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HA	2	3.02
(3,162)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HA	2	3.02
(1,573)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HA	2	3.02
(1,573)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HA	2	3.02
(1,573)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HA	2	3.02
(3,200)	1:16:A:GLY:HA2	1:19:A:SER:HB3	10	3.0
(1,662)	1:16:A:GLY:HA2	1:19:A:SER:HB3	10	3.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,162)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HA	3	2.98
(3,162)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HA	3	2.98
(3,162)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HA	3	2.98
(1,573)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HA	3	2.98
(1,573)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HA	3	2.98
(1,573)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HA	3	2.98
(3,162)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HA	4	2.97
(3,162)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HA	4	2.97
(3,162)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HA	4	2.97
(1,573)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HA	4	2.97
(1,573)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HA	4	2.97
(1,573)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HA	4	2.97
(3,162)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HA	1	2.96
(3,162)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HA	1	2.96
(3,162)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HA	1	2.96
(1,573)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HA	1	2.96
(1,573)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HA	1	2.96
(1,573)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HA	1	2.96
(3,162)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HA	6	2.91
(3,162)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HA	6	2.91
(3,162)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HA	6	2.91
(1,573)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HA	6	2.91
(1,573)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HA	6	2.91
(1,573)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HA	6	2.91
(3,116)	1:21:A:ARG:HG2	1:23:A:PRO:HD3	2	2.88
(1,442)	1:21:A:ARG:HG2	1:23:A:PRO:HD3	2	2.88
(3,72)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG3	3	2.81
(1,320)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG3	3	2.81
(3,72)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG3	8	2.8
(1,320)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG3	8	2.8
(2,441)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD11	9	2.79
(2,441)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD12	9	2.79
(2,441)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD13	9	2.79
(1,634)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD11	9	2.79
(1,634)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD12	9	2.79
(1,634)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD13	9	2.79
(3,116)	1:21:A:ARG:HG2	1:23:A:PRO:HD3	1	2.78
(3,116)	1:21:A:ARG:HG2	1:23:A:PRO:HD3	3	2.78
(3,116)	1:21:A:ARG:HG2	1:23:A:PRO:HD3	4	2.78
(1,442)	1:21:A:ARG:HG2	1:23:A:PRO:HD3	1	2.78
(1,442)	1:21:A:ARG:HG2	1:23:A:PRO:HD3	3	2.78
(1,442)	1:21:A:ARG:HG2	1:23:A:PRO:HD3	4	2.78

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,441)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD11	8	2.77
(2,441)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD12	8	2.77
(2,441)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD13	8	2.77
(1,634)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD11	8	2.77
(1,634)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD12	8	2.77
(1,634)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD13	8	2.77
(3,72)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG3	7	2.76
(1,320)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG3	7	2.76
(3,72)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG3	9	2.75
(1,320)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG3	9	2.75
(3,181)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:HD21	3	2.74
(3,181)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:HD22	3	2.74
(3,181)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:HD23	3	2.74
(3,116)	1:21:A:ARG:HG2	1:23:A:PRO:HD3	10	2.74
(1,603)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:HD21	3	2.74
(1,603)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:HD22	3	2.74
(1,603)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:HD23	3	2.74
(1,442)	1:21:A:ARG:HG2	1:23:A:PRO:HD3	10	2.74
(2,441)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD11	10	2.73
(2,441)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD12	10	2.73
(2,441)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD13	10	2.73
(1,634)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD11	10	2.73
(1,634)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD12	10	2.73
(1,634)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD13	10	2.73
(3,181)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:HD21	1	2.72
(3,181)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:HD22	1	2.72
(3,181)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:HD23	1	2.72
(3,181)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:HD21	4	2.72
(3,181)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:HD22	4	2.72
(3,181)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:HD23	4	2.72
(3,181)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:HD21	5	2.72
(3,181)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:HD22	5	2.72
(3,181)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:HD23	5	2.72
(3,181)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:HD21	6	2.72
(3,181)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:HD22	6	2.72
(3,181)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:HD23	6	2.72
(3,72)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG3	5	2.72
(1,603)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:HD21	1	2.72
(1,603)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:HD22	1	2.72
(1,603)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:HD23	1	2.72
(1,603)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:HD21	4	2.72
(1,603)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:HD22	4	2.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,603)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:HD23	4	2.72
(1,603)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:HD21	5	2.72
(1,603)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:HD22	5	2.72
(1,603)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:HD23	5	2.72
(1,603)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:HD21	6	2.72
(1,603)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:HD22	6	2.72
(1,603)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:HD23	6	2.72
(1,320)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG3	5	2.72
(3,181)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:HD21	2	2.71
(3,181)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:HD22	2	2.71
(3,181)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:HD23	2	2.71
(1,603)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:HD21	2	2.71
(1,603)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:HD22	2	2.71
(1,603)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:HD23	2	2.71
(3,72)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG3	1	2.7
(3,72)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG3	4	2.7
(1,320)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG3	1	2.7
(1,320)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG3	4	2.7
(3,116)	1:21:A:ARG:HG2	1:23:A:PRO:HD3	7	2.67
(3,72)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG3	2	2.67
(3,72)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG3	10	2.67
(1,442)	1:21:A:ARG:HG2	1:23:A:PRO:HD3	7	2.67
(1,320)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG3	2	2.67
(1,320)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HG3	10	2.67
(3,116)	1:21:A:ARG:HG2	1:23:A:PRO:HD3	9	2.65
(3,109)	1:24:A:PRO:HG3	1:25:A:SER:HA	10	2.65
(1,442)	1:21:A:ARG:HG2	1:23:A:PRO:HD3	9	2.65
(1,414)	1:24:A:PRO:HG3	1:25:A:SER:HA	10	2.65
(3,118)	1:23:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HD3	8	2.53
(3,58)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HB2	4	2.53
(3,58)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HB2	4	2.53
(1,446)	1:23:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HD3	8	2.53
(1,280)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HB2	4	2.53
(1,280)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HB2	4	2.53
(3,116)	1:21:A:ARG:HG2	1:23:A:PRO:HD3	8	2.5
(3,58)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HB2	8	2.5
(3,58)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HB2	8	2.5
(1,442)	1:21:A:ARG:HG2	1:23:A:PRO:HD3	8	2.5
(1,280)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HB2	8	2.5
(1,280)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HB2	8	2.5
(3,58)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HB2	10	2.49
(3,58)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HB2	10	2.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,280)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HB2	10	2.49
(1,280)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HB2	10	2.49
(3,177)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	10	2.48
(3,177)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	10	2.48
(3,177)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	10	2.48
(1,596)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	10	2.48
(1,596)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	10	2.48
(1,596)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	10	2.48
(3,118)	1:23:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HD3	7	2.47
(1,446)	1:23:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HD3	7	2.47
(3,118)	1:23:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HD3	6	2.46
(3,109)	1:24:A:PRO:HG3	1:25:A:SER:HA	8	2.46
(1,446)	1:23:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HD3	6	2.46
(1,414)	1:24:A:PRO:HG3	1:25:A:SER:HA	8	2.46
(3,118)	1:23:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HD3	1	2.45
(1,446)	1:23:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HD3	1	2.45
(3,177)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	8	2.44
(3,177)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	8	2.44
(3,177)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	8	2.44
(3,118)	1:23:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HD3	10	2.44
(2,364)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HG3	6	2.44
(1,596)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	8	2.44
(1,596)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	8	2.44
(1,596)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	8	2.44
(1,505)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HG3	6	2.44
(1,446)	1:23:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HD3	10	2.44
(3,118)	1:23:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HD3	3	2.42
(3,118)	1:23:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HD3	5	2.42
(1,446)	1:23:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HD3	3	2.42
(1,446)	1:23:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HD3	5	2.42
(3,118)	1:23:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HD3	4	2.41
(3,76)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	5	2.41
(1,446)	1:23:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HD3	4	2.41
(1,332)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	5	2.41
(3,118)	1:23:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HD3	9	2.4
(1,446)	1:23:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HD3	9	2.4
(3,118)	1:23:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HD3	2	2.39
(3,109)	1:24:A:PRO:HG3	1:25:A:SER:HA	1	2.39
(3,76)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	3	2.39
(2,364)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HG3	4	2.39
(1,505)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HG3	4	2.39
(1,446)	1:23:A:PRO:HD2	1:24:A:PRO:HD3	2	2.39

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,414)	1:24:A:PRO:HG3	1:25:A:SER:HA	1	2.39
(1,332)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	3	2.39
(3,170)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	8	2.38
(3,170)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	8	2.38
(3,170)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	8	2.38
(3,76)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	6	2.38
(1,584)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	8	2.38
(1,584)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	8	2.38
(1,584)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	8	2.38
(1,332)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	6	2.38
(3,76)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	1	2.36
(3,76)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	8	2.36
(3,58)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HB2	5	2.36
(3,58)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HB2	5	2.36
(1,332)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	1	2.36
(1,332)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	8	2.36
(1,280)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HB2	5	2.36
(1,280)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HB2	5	2.36
(3,76)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	2	2.35
(1,332)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	2	2.35
(3,177)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	6	2.34
(3,177)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	6	2.34
(3,177)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	6	2.34
(3,109)	1:24:A:PRO:HG3	1:25:A:SER:HA	3	2.34
(3,76)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	4	2.34
(2,441)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD11	7	2.34
(2,441)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD12	7	2.34
(2,441)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD13	7	2.34
(1,634)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD11	7	2.34
(1,634)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD12	7	2.34
(1,634)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD13	7	2.34
(1,596)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	6	2.34
(1,596)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	6	2.34
(1,596)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	6	2.34
(1,414)	1:24:A:PRO:HG3	1:25:A:SER:HA	3	2.34
(1,332)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	4	2.34
(3,76)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	10	2.33
(1,332)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	10	2.33
(3,58)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HB2	2	2.32
(3,58)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HB2	2	2.32
(1,280)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HB2	2	2.32
(1,280)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HB2	2	2.32

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,177)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	9	2.31
(3,177)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	9	2.31
(3,177)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	9	2.31
(3,109)	1:24:A:PRO:HG3	1:25:A:SER:HA	6	2.31
(1,596)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	9	2.31
(1,596)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	9	2.31
(1,596)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	9	2.31
(1,414)	1:24:A:PRO:HG3	1:25:A:SER:HA	6	2.31
(3,177)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	1	2.29
(3,177)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	1	2.29
(3,177)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	1	2.29
(3,91)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD11	2	2.29
(3,91)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD12	2	2.29
(3,91)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD13	2	2.29
(3,58)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HB2	1	2.29
(3,58)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HB2	1	2.29
(3,58)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HB2	9	2.29
(3,58)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HB2	9	2.29
(1,596)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	1	2.29
(1,596)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	1	2.29
(1,596)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	1	2.29
(1,365)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD11	2	2.29
(1,365)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD12	2	2.29
(1,365)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD13	2	2.29
(1,280)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HB2	1	2.29
(1,280)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HB2	1	2.29
(1,280)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HB2	9	2.29
(1,280)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HB2	9	2.29
(3,177)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	7	2.28
(3,177)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	7	2.28
(3,177)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	7	2.28
(3,58)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HB2	7	2.28
(3,58)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HB2	7	2.28
(1,596)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	7	2.28
(1,596)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	7	2.28
(1,596)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	7	2.28
(1,280)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HB2	7	2.28
(1,280)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HB2	7	2.28
(3,200)	1:16:A:GLY:HA2	1:19:A:SER:HB3	9	2.27
(3,177)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	2	2.27
(3,177)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	2	2.27
(3,177)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	2	2.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,177)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	4	2.27
(3,177)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	4	2.27
(3,177)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	4	2.27
(3,177)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	5	2.27
(3,177)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	5	2.27
(3,177)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	5	2.27
(3,58)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HB2	3	2.27
(3,58)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HB2	3	2.27
(1,662)	1:16:A:GLY:HA2	1:19:A:SER:HB3	9	2.27
(1,596)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	2	2.27
(1,596)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	2	2.27
(1,596)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	2	2.27
(1,596)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	4	2.27
(1,596)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	4	2.27
(1,596)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	4	2.27
(1,596)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	5	2.27
(1,596)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	5	2.27
(1,596)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	5	2.27
(1,280)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HB2	3	2.27
(1,280)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HB2	3	2.27
(3,193)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:H	5	2.26
(3,193)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:H	5	2.26
(3,193)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:H	5	2.26
(3,170)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	10	2.26
(3,170)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	10	2.26
(3,170)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	10	2.26
(1,633)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:H	5	2.26
(1,633)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:H	5	2.26
(1,633)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:H	5	2.26
(1,584)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	10	2.26
(1,584)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	10	2.26
(1,584)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	10	2.26
(3,200)	1:16:A:GLY:HA2	1:19:A:SER:HB3	7	2.25
(3,91)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD11	3	2.25
(3,91)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD12	3	2.25
(3,91)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD13	3	2.25
(1,662)	1:16:A:GLY:HA2	1:19:A:SER:HB3	7	2.25
(1,365)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD11	3	2.25
(1,365)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD12	3	2.25
(1,365)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD13	3	2.25
(3,162)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HA	5	2.24
(3,162)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HA	5	2.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,162)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HA	5	2.24
(3,58)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HB2	6	2.24
(3,58)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HB2	6	2.24
(1,573)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HA	5	2.24
(1,573)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HA	5	2.24
(1,573)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HA	5	2.24
(1,280)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HB2	6	2.24
(1,280)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HB2	6	2.24
(3,91)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD11	1	2.23
(3,91)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD12	1	2.23
(3,91)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD13	1	2.23
(3,91)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD11	4	2.23
(3,91)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD12	4	2.23
(3,91)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD13	4	2.23
(3,76)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	7	2.23
(3,76)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	9	2.23
(1,365)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD11	1	2.23
(1,365)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD12	1	2.23
(1,365)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD13	1	2.23
(1,365)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD11	4	2.23
(1,365)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD12	4	2.23
(1,365)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD13	4	2.23
(1,332)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	7	2.23
(1,332)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HZ3	9	2.23
(3,91)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD11	6	2.2
(3,91)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD12	6	2.2
(3,91)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD13	6	2.2
(1,365)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD11	6	2.2
(1,365)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD12	6	2.2
(1,365)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD13	6	2.2
(3,193)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:H	3	2.19
(3,193)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:H	3	2.19
(3,193)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:H	3	2.19
(1,633)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:H	3	2.19
(1,633)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:H	3	2.19
(1,633)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:H	3	2.19
(3,193)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:H	6	2.18
(3,193)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:H	6	2.18
(3,193)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:H	6	2.18
(3,91)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD11	5	2.18
(3,91)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD12	5	2.18
(3,91)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD13	5	2.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,633)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:H	6	2.18
(1,633)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:H	6	2.18
(1,633)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:H	6	2.18
(1,365)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD11	5	2.18
(1,365)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD12	5	2.18
(1,365)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD13	5	2.18
(3,193)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:H	1	2.15
(3,193)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:H	1	2.15
(3,193)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:H	1	2.15
(1,633)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:H	1	2.15
(1,633)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:H	1	2.15
(1,633)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:H	1	2.15
(3,193)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:H	2	2.14
(3,193)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:H	2	2.14
(3,193)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:H	2	2.14
(1,633)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:H	2	2.14
(1,633)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:H	2	2.14
(1,633)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:H	2	2.14
(3,193)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:H	4	2.13
(3,193)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:H	4	2.13
(3,193)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:H	4	2.13
(1,633)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:H	4	2.13
(1,633)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:H	4	2.13
(1,633)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:H	4	2.13
(3,109)	1:24:A:PRO:HG3	1:25:A:SER:HA	4	2.11
(1,414)	1:24:A:PRO:HG3	1:25:A:SER:HA	4	2.11
(3,150)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HG	8	2.1
(2,458)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:HG	9	2.1
(1,655)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:HG	9	2.1
(1,540)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HG	8	2.1
(3,109)	1:24:A:PRO:HG3	1:25:A:SER:HA	9	2.09
(1,414)	1:24:A:PRO:HG3	1:25:A:SER:HA	9	2.09
(3,161)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HA	9	2.08
(3,161)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HA	9	2.08
(3,161)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HA	9	2.08
(3,109)	1:24:A:PRO:HG3	1:25:A:SER:HA	5	2.08
(1,572)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HA	9	2.08
(1,572)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HA	9	2.08
(1,572)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HA	9	2.08
(1,414)	1:24:A:PRO:HG3	1:25:A:SER:HA	5	2.08
(3,161)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HA	7	2.07
(3,161)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HA	7	2.07

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,161)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HA	7	2.07
(3,150)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HG	10	2.07
(3,121)	1:16:A:GLY:H	1:18:A:SER:HB2	5	2.07
(3,121)	1:16:A:GLY:H	1:18:A:SER:HB3	5	2.07
(2,414)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD21	2	2.07
(2,414)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD22	2	2.07
(2,414)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD23	2	2.07
(2,414)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD21	6	2.07
(2,414)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD22	6	2.07
(2,414)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD23	6	2.07
(1,583)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD21	2	2.07
(1,583)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD22	2	2.07
(1,583)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD23	2	2.07
(1,583)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD21	6	2.07
(1,583)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD22	6	2.07
(1,583)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD23	6	2.07
(1,572)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HA	7	2.07
(1,572)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HA	7	2.07
(1,572)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HA	7	2.07
(1,540)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HG	10	2.07
(1,450)	1:16:A:GLY:H	1:18:A:SER:HB2	5	2.07
(1,450)	1:16:A:GLY:H	1:18:A:SER:HB3	5	2.07
(3,150)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HG	9	2.06
(2,414)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD21	3	2.06
(2,414)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD22	3	2.06
(2,414)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD23	3	2.06
(2,414)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD21	4	2.06
(2,414)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD22	4	2.06
(2,414)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD23	4	2.06
(1,583)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD21	3	2.06
(1,583)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD22	3	2.06
(1,583)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD23	3	2.06
(1,583)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD21	4	2.06
(1,583)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD22	4	2.06
(1,583)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD23	4	2.06
(1,540)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HG	9	2.06
(3,146)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HB	4	2.05
(3,109)	1:24:A:PRO:HG3	1:25:A:SER:HA	2	2.05
(2,414)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD21	1	2.05
(2,414)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD22	1	2.05
(2,414)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD23	1	2.05
(2,414)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD21	5	2.05

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,414)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD22	5	2.05
(2,414)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD23	5	2.05
(1,583)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD21	1	2.05
(1,583)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD22	1	2.05
(1,583)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD23	1	2.05
(1,583)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD21	5	2.05
(1,583)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD22	5	2.05
(1,583)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD23	5	2.05
(1,527)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HB	4	2.05
(1,414)	1:24:A:PRO:HG3	1:25:A:SER:HA	2	2.05
(3,177)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	3	2.04
(3,177)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	3	2.04
(3,177)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	3	2.04
(1,596)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG21	3	2.04
(1,596)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG22	3	2.04
(1,596)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG23	3	2.04
(3,204)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD21	8	2.03
(3,204)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD22	8	2.03
(3,204)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD23	8	2.03
(3,204)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD21	8	2.03
(3,204)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD22	8	2.03
(3,204)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD23	8	2.03
(3,204)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD21	8	2.03
(3,204)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD22	8	2.03
(3,204)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD23	8	2.03
(3,150)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HG	7	2.03
(1,673)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD21	8	2.03
(1,673)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD22	8	2.03
(1,673)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD23	8	2.03
(1,673)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD21	8	2.03
(1,673)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD22	8	2.03
(1,673)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD23	8	2.03
(1,673)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD21	8	2.03
(1,673)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD22	8	2.03
(1,673)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD23	8	2.03
(1,540)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:LEU:HG	7	2.03
(3,146)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HB	10	2.02
(1,527)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HB	10	2.02
(3,204)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD21	3	2.01
(3,204)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD22	3	2.01
(3,204)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD23	3	2.01
(3,204)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD21	3	2.01

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,204)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD22	3	2.01
(3,204)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD23	3	2.01
(3,204)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD21	3	2.01
(3,204)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD22	3	2.01
(3,204)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD23	3	2.01
(3,134)	1:21:A:ARG:H	1:22:A:PRO:HD2	6	2.01
(2,458)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:HG	7	2.01
(1,673)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD21	3	2.01
(1,673)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD22	3	2.01
(1,673)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD23	3	2.01
(1,673)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD21	3	2.01
(1,673)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD22	3	2.01
(1,673)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD23	3	2.01
(1,673)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD21	3	2.01
(1,673)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD22	3	2.01
(1,673)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD23	3	2.01
(1,655)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:HG	7	2.01
(1,488)	1:21:A:ARG:H	1:22:A:PRO:HD2	6	2.01
(3,204)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD21	10	2.0
(3,204)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD22	10	2.0
(3,204)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD23	10	2.0
(3,204)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD21	10	2.0
(3,204)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD22	10	2.0
(3,204)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD23	10	2.0
(3,204)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD21	10	2.0
(3,204)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD22	10	2.0
(3,204)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD23	10	2.0
(3,182)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HB	4	2.0
(3,182)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HB	4	2.0
(3,182)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HB	4	2.0
(3,182)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HB	6	2.0
(3,182)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HB	6	2.0
(3,182)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HB	6	2.0
(1,673)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD21	10	2.0
(1,673)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD22	10	2.0
(1,673)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD23	10	2.0
(1,673)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD21	10	2.0
(1,673)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD22	10	2.0
(1,673)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD23	10	2.0
(1,673)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD21	10	2.0
(1,673)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD22	10	2.0
(1,673)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD23	10	2.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,604)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HB	4	2.0
(1,604)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HB	4	2.0
(1,604)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HB	4	2.0
(1,604)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HB	6	2.0
(1,604)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HB	6	2.0
(1,604)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HB	6	2.0
(3,182)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HB	10	1.99
(3,182)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HB	10	1.99
(3,182)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HB	10	1.99
(3,146)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HB	6	1.99
(1,604)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HB	10	1.99
(1,604)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HB	10	1.99
(1,604)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HB	10	1.99
(1,527)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HB	6	1.99
(3,182)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HB	9	1.98
(3,182)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HB	9	1.98
(3,182)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HB	9	1.98
(3,146)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HB	8	1.98
(2,458)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:HG	8	1.98
(1,655)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:HG	8	1.98
(1,604)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HB	9	1.98
(1,604)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HB	9	1.98
(1,604)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HB	9	1.98
(1,527)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HB	8	1.98
(3,204)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD21	7	1.97
(3,204)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD22	7	1.97
(3,204)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD23	7	1.97
(3,204)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD21	7	1.97
(3,204)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD22	7	1.97
(3,204)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD23	7	1.97
(3,204)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD21	7	1.97
(3,204)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD22	7	1.97
(3,204)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD23	7	1.97
(3,55)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HD2	6	1.97
(1,673)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD21	7	1.97
(1,673)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD22	7	1.97
(1,673)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD23	7	1.97
(1,673)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD21	7	1.97
(1,673)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD22	7	1.97
(1,673)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD23	7	1.97
(1,673)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD21	7	1.97
(1,673)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD22	7	1.97

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,673)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD23	7	1.97
(1,277)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HD2	6	1.97
(3,182)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HB	7	1.96
(3,182)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HB	7	1.96
(3,182)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HB	7	1.96
(3,182)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HB	8	1.96
(3,182)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HB	8	1.96
(3,182)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HB	8	1.96
(3,146)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HB	9	1.96
(1,604)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HB	7	1.96
(1,604)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HB	7	1.96
(1,604)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HB	7	1.96
(1,604)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HB	8	1.96
(1,604)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HB	8	1.96
(1,604)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HB	8	1.96
(1,527)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HB	9	1.96
(3,204)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD21	5	1.95
(3,204)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD22	5	1.95
(3,204)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD23	5	1.95
(3,204)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD21	5	1.95
(3,204)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD22	5	1.95
(3,204)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD23	5	1.95
(3,204)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD21	5	1.95
(3,204)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD22	5	1.95
(3,204)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD23	5	1.95
(3,134)	1:21:A:ARG:H	1:22:A:PRO:HD2	5	1.95
(2,458)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:HG	10	1.95
(1,673)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD21	5	1.95
(1,673)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD22	5	1.95
(1,673)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD23	5	1.95
(1,673)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD21	5	1.95
(1,673)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD22	5	1.95
(1,673)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD23	5	1.95
(1,673)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD21	5	1.95
(1,673)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD22	5	1.95
(1,673)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD23	5	1.95
(1,655)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:HG	10	1.95
(1,488)	1:21:A:ARG:H	1:22:A:PRO:HD2	5	1.95
(3,204)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD21	2	1.94
(3,204)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD22	2	1.94
(3,204)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD23	2	1.94
(3,204)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD21	2	1.94

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,204)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD22	2	1.94
(3,204)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD23	2	1.94
(3,204)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD21	2	1.94
(3,204)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD22	2	1.94
(3,204)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD23	2	1.94
(3,204)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD21	9	1.94
(3,204)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD22	9	1.94
(3,204)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD23	9	1.94
(3,204)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD21	9	1.94
(3,204)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD22	9	1.94
(3,204)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD23	9	1.94
(3,204)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD21	9	1.94
(3,204)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD22	9	1.94
(3,204)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD23	9	1.94
(1,673)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD21	2	1.94
(1,673)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD22	2	1.94
(1,673)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD23	2	1.94
(1,673)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD21	2	1.94
(1,673)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD22	2	1.94
(1,673)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD23	2	1.94
(1,673)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD21	2	1.94
(1,673)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD22	2	1.94
(1,673)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD23	2	1.94
(1,673)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD21	9	1.94
(1,673)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD22	9	1.94
(1,673)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD23	9	1.94
(1,673)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD21	9	1.94
(1,673)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD22	9	1.94
(1,673)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD23	9	1.94
(1,673)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD21	9	1.94
(1,673)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD22	9	1.94
(1,673)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD23	9	1.94
(3,200)	1:16:A:GLY:HA2	1:19:A:SER:HB3	2	1.93
(3,182)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HB	2	1.93
(3,182)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HB	2	1.93
(3,182)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HB	2	1.93
(3,182)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HB	5	1.93
(3,182)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HB	5	1.93
(3,182)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HB	5	1.93
(1,662)	1:16:A:GLY:HA2	1:19:A:SER:HB3	2	1.93
(1,604)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HB	2	1.93
(1,604)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HB	2	1.93

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,604)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HB	2	1.93
(1,604)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HB	5	1.93
(1,604)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HB	5	1.93
(1,604)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HB	5	1.93
(3,182)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HB	1	1.92
(3,182)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HB	1	1.92
(3,182)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HB	1	1.92
(1,604)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HB	1	1.92
(1,604)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HB	1	1.92
(1,604)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HB	1	1.92
(3,200)	1:16:A:GLY:HA2	1:19:A:SER:HB3	4	1.91
(3,146)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HB	5	1.91
(1,662)	1:16:A:GLY:HA2	1:19:A:SER:HB3	4	1.91
(1,527)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HB	5	1.91
(3,204)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD21	1	1.9
(3,204)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD22	1	1.9
(3,204)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD23	1	1.9
(3,204)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD21	1	1.9
(3,204)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD22	1	1.9
(3,204)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD23	1	1.9
(3,204)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD21	1	1.9
(3,204)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD22	1	1.9
(3,204)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD23	1	1.9
(3,204)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD21	4	1.9
(3,204)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD22	4	1.9
(3,204)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD23	4	1.9
(3,204)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD21	4	1.9
(3,204)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD22	4	1.9
(3,204)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD23	4	1.9
(3,204)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD21	4	1.9
(3,204)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD22	4	1.9
(3,204)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD23	4	1.9
(3,151)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HG3	8	1.9
(3,146)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HB	3	1.9
(3,146)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HB	7	1.9
(1,673)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD21	1	1.9
(1,673)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD22	1	1.9
(1,673)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD23	1	1.9
(1,673)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD21	1	1.9
(1,673)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD22	1	1.9
(1,673)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD23	1	1.9
(1,673)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD21	1	1.9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,673)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD22	1	1.9
(1,673)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD23	1	1.9
(1,673)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD21	4	1.9
(1,673)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD22	4	1.9
(1,673)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD23	4	1.9
(1,673)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD21	4	1.9
(1,673)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD22	4	1.9
(1,673)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD23	4	1.9
(1,673)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD21	4	1.9
(1,673)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD22	4	1.9
(1,673)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD23	4	1.9
(1,541)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HG3	8	1.9
(1,527)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HB	3	1.9
(1,527)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HB	7	1.9
(3,146)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HB	2	1.89
(1,527)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HB	2	1.89
(3,182)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HB	3	1.88
(3,182)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HB	3	1.88
(3,182)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HB	3	1.88
(2,462)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HG2	5	1.88
(2,462)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HG2	10	1.88
(1,661)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HG2	5	1.88
(1,661)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HG2	10	1.88
(1,604)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HB	3	1.88
(1,604)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HB	3	1.88
(1,604)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HB	3	1.88
(3,146)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HB	1	1.87
(2,462)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HG2	9	1.87
(2,398)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HG3	6	1.87
(2,244)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	8	1.87
(2,244)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	8	1.87
(2,244)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	8	1.87
(2,244)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	8	1.87
(2,244)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	8	1.87
(2,244)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	8	1.87
(1,661)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HG2	9	1.87
(1,552)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HG3	6	1.87
(1,527)	1:5:A:VAL:H	1:9:A:ILE:HB	1	1.87
(1,313)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	8	1.87
(1,313)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	8	1.87
(1,313)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	8	1.87
(1,313)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	8	1.87

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,313)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	8	1.87
(1,313)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	8	1.87
(3,204)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD21	6	1.86
(3,204)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD22	6	1.86
(3,204)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD23	6	1.86
(3,204)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD21	6	1.86
(3,204)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD22	6	1.86
(3,204)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD23	6	1.86
(3,204)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD21	6	1.86
(3,204)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD22	6	1.86
(3,204)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD23	6	1.86
(3,189)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HD11	1	1.86
(3,189)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HD12	1	1.86
(3,189)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HD13	1	1.86
(3,189)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HD11	1	1.86
(3,189)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HD12	1	1.86
(3,189)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HD13	1	1.86
(3,189)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HD11	1	1.86
(3,189)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HD12	1	1.86
(3,189)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HD13	1	1.86
(3,189)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HD11	5	1.86
(3,189)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HD12	5	1.86
(3,189)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HD13	5	1.86
(3,189)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HD11	5	1.86
(3,189)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HD12	5	1.86
(3,189)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HD13	5	1.86
(3,189)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HD11	5	1.86
(3,189)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HD12	5	1.86
(3,189)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HD13	5	1.86
(3,189)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HD11	9	1.86
(3,189)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HD12	9	1.86
(3,189)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HD13	9	1.86
(3,189)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HD11	9	1.86
(3,189)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HD12	9	1.86
(3,189)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HD13	9	1.86
(3,189)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HD11	9	1.86
(3,189)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HD12	9	1.86
(3,189)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HD13	9	1.86
(2,462)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HG2	2	1.86
(1,673)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD21	6	1.86
(1,673)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD22	6	1.86
(1,673)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD23	6	1.86

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,673)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD21	6	1.86
(1,673)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD22	6	1.86
(1,673)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD23	6	1.86
(1,673)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD21	6	1.86
(1,673)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD22	6	1.86
(1,673)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD23	6	1.86
(1,661)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HG2	2	1.86
(1,622)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HD11	1	1.86
(1,622)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HD12	1	1.86
(1,622)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HD13	1	1.86
(1,622)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HD11	1	1.86
(1,622)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HD12	1	1.86
(1,622)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HD13	1	1.86
(1,622)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HD11	1	1.86
(1,622)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HD12	1	1.86
(1,622)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HD13	1	1.86
(1,622)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HD11	5	1.86
(1,622)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HD12	5	1.86
(1,622)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HD13	5	1.86
(1,622)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HD11	5	1.86
(1,622)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HD12	5	1.86
(1,622)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HD13	5	1.86
(1,622)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HD11	5	1.86
(1,622)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HD12	5	1.86
(1,622)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HD13	5	1.86
(1,622)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HD11	9	1.86
(1,622)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HD12	9	1.86
(1,622)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HD13	9	1.86
(1,622)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HD11	9	1.86
(1,622)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HD12	9	1.86
(1,622)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HD13	9	1.86
(1,622)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HD11	9	1.86
(1,622)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HD12	9	1.86
(1,622)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HD13	9	1.86
(3,189)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HD11	7	1.85
(3,189)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HD12	7	1.85
(3,189)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HD13	7	1.85
(3,189)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HD11	7	1.85
(3,189)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HD12	7	1.85
(3,189)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HD13	7	1.85
(3,189)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HD11	7	1.85
(3,189)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HD12	7	1.85

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,189)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HD13	7	1.85
(3,121)	1:16:A:GLY:H	1:18:A:SER:HB2	4	1.85
(3,121)	1:16:A:GLY:H	1:18:A:SER:HB3	4	1.85
(2,339)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:H	5	1.85
(1,622)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HD11	7	1.85
(1,622)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HD12	7	1.85
(1,622)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HD13	7	1.85
(1,622)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HD11	7	1.85
(1,622)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HD12	7	1.85
(1,622)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HD13	7	1.85
(1,622)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HD11	7	1.85
(1,622)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HD12	7	1.85
(1,622)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HD13	7	1.85
(1,464)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:H	5	1.85
(1,450)	1:16:A:GLY:H	1:18:A:SER:HB2	4	1.85
(1,450)	1:16:A:GLY:H	1:18:A:SER:HB3	4	1.85
(3,189)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HD11	2	1.84
(3,189)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HD12	2	1.84
(3,189)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HD13	2	1.84
(3,189)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HD11	2	1.84
(3,189)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HD12	2	1.84
(3,189)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HD13	2	1.84
(3,189)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HD11	2	1.84
(3,189)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HD12	2	1.84
(3,189)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HD13	2	1.84
(3,189)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HD11	4	1.84
(3,189)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HD12	4	1.84
(3,189)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HD13	4	1.84
(3,189)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HD11	4	1.84
(3,189)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HD12	4	1.84
(3,189)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HD13	4	1.84
(3,189)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HD11	4	1.84
(3,189)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HD12	4	1.84
(3,189)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HD13	4	1.84
(3,189)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HD11	6	1.84
(3,189)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HD12	6	1.84
(3,189)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HD13	6	1.84
(3,189)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HD11	6	1.84
(3,189)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HD12	6	1.84
(3,189)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HD13	6	1.84
(3,189)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HD11	6	1.84
(3,189)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HD12	6	1.84

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,189)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HD13	6	1.84
(3,161)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HA	10	1.84
(3,161)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HA	10	1.84
(3,161)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HA	10	1.84
(3,90)	1:9:A:ILE:HG13	1:11:A:TRP:HE3	7	1.84
(2,462)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HG2	8	1.84
(2,339)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:H	7	1.84
(1,661)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HG2	8	1.84
(1,622)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HD11	2	1.84
(1,622)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HD12	2	1.84
(1,622)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HD13	2	1.84
(1,622)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HD11	2	1.84
(1,622)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HD12	2	1.84
(1,622)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HD13	2	1.84
(1,622)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HD11	2	1.84
(1,622)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HD12	2	1.84
(1,622)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HD13	2	1.84
(1,622)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HD11	4	1.84
(1,622)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HD12	4	1.84
(1,622)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HD13	4	1.84
(1,622)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HD11	4	1.84
(1,622)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HD12	4	1.84
(1,622)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HD13	4	1.84
(1,622)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HD11	4	1.84
(1,622)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HD12	4	1.84
(1,622)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HD13	4	1.84
(1,622)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HD11	6	1.84
(1,622)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HD12	6	1.84
(1,622)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HD13	6	1.84
(1,622)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HD11	6	1.84
(1,622)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HD12	6	1.84
(1,622)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HD13	6	1.84
(1,622)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HD11	6	1.84
(1,622)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HD12	6	1.84
(1,622)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HD13	6	1.84
(1,572)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HA	10	1.84
(1,572)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HA	10	1.84
(1,572)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HA	10	1.84
(1,464)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:H	7	1.84
(1,363)	1:9:A:ILE:HG13	1:11:A:TRP:HE3	7	1.84
(3,200)	1:16:A:GLY:HA2	1:19:A:SER:HB3	1	1.83
(3,170)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	5	1.83

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,170)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	5	1.83
(3,170)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	5	1.83
(3,170)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	7	1.83
(3,170)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	7	1.83
(3,170)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	7	1.83
(3,151)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HG3	3	1.83
(3,151)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HG3	6	1.83
(3,134)	1:21:A:ARG:H	1:22:A:PRO:HD2	8	1.83
(2,339)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:H	1	1.83
(2,339)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:H	9	1.83
(1,662)	1:16:A:GLY:HA2	1:19:A:SER:HB3	1	1.83
(1,584)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	5	1.83
(1,584)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	5	1.83
(1,584)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	5	1.83
(1,584)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	7	1.83
(1,584)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	7	1.83
(1,584)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	7	1.83
(1,541)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HG3	3	1.83
(1,541)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HG3	6	1.83
(1,488)	1:21:A:ARG:H	1:22:A:PRO:HD2	8	1.83
(1,464)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:H	1	1.83
(1,464)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:H	9	1.83
(3,209)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:HD21	6	1.82
(3,209)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:HD22	6	1.82
(3,209)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:HD23	6	1.82
(3,170)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	9	1.82
(3,170)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	9	1.82
(3,170)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	9	1.82
(3,8)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	3	1.82
(3,8)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	3	1.82
(3,8)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	3	1.82
(2,339)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:H	2	1.82
(1,681)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:HD21	6	1.82
(1,681)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:HD22	6	1.82
(1,681)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:HD23	6	1.82
(1,584)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	9	1.82
(1,584)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	9	1.82
(1,584)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	9	1.82
(1,464)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:H	2	1.82
(1,46)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	3	1.82
(1,46)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	3	1.82
(1,46)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	3	1.82

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,189)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HD11	8	1.81
(3,189)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HD12	8	1.81
(3,189)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HD13	8	1.81
(3,189)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HD11	8	1.81
(3,189)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HD12	8	1.81
(3,189)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HD13	8	1.81
(3,189)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HD11	8	1.81
(3,189)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HD12	8	1.81
(3,189)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HD13	8	1.81
(3,161)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HA	8	1.81
(3,161)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HA	8	1.81
(3,161)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HA	8	1.81
(3,8)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	8	1.81
(3,8)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	8	1.81
(3,8)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	8	1.81
(2,462)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HG2	4	1.81
(1,661)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HG2	4	1.81
(1,622)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HD11	8	1.81
(1,622)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HD12	8	1.81
(1,622)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HD13	8	1.81
(1,622)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HD11	8	1.81
(1,622)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HD12	8	1.81
(1,622)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HD13	8	1.81
(1,622)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HD11	8	1.81
(1,622)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HD12	8	1.81
(1,622)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HD13	8	1.81
(1,572)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HA	8	1.81
(1,572)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HA	8	1.81
(1,572)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HA	8	1.81
(1,46)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	8	1.81
(1,46)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	8	1.81
(1,46)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	8	1.81
(3,189)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HD11	3	1.8
(3,189)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HD12	3	1.8
(3,189)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HD13	3	1.8
(3,189)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HD11	3	1.8
(3,189)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HD12	3	1.8
(3,189)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HD13	3	1.8
(3,189)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HD11	3	1.8
(3,189)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HD12	3	1.8
(3,189)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HD13	3	1.8
(3,189)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HD11	10	1.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,189)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HD12	10	1.8
(3,189)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HD13	10	1.8
(3,189)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HD11	10	1.8
(3,189)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HD12	10	1.8
(3,189)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HD13	10	1.8
(3,189)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HD11	10	1.8
(3,189)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HD12	10	1.8
(3,189)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HD13	10	1.8
(3,170)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	1	1.8
(3,170)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	1	1.8
(3,170)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	1	1.8
(3,170)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	2	1.8
(3,170)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	2	1.8
(3,170)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	2	1.8
(3,50)	1:10:A:GLN:HE22	1:13:A:LYS:HB2	8	1.8
(3,50)	1:10:A:GLN:HE22	1:13:A:LYS:HB3	8	1.8
(3,8)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	6	1.8
(3,8)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	6	1.8
(3,8)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	6	1.8
(2,462)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HG2	1	1.8
(2,339)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:H	4	1.8
(2,339)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:H	8	1.8
(2,339)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:H	10	1.8
(1,661)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HG2	1	1.8
(1,622)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HD11	3	1.8
(1,622)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HD12	3	1.8
(1,622)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HD13	3	1.8
(1,622)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HD11	3	1.8
(1,622)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HD12	3	1.8
(1,622)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HD13	3	1.8
(1,622)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HD11	3	1.8
(1,622)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HD12	3	1.8
(1,622)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HD13	3	1.8
(1,622)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HD11	10	1.8
(1,622)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HD12	10	1.8
(1,622)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:HD13	10	1.8
(1,622)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HD11	10	1.8
(1,622)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HD12	10	1.8
(1,622)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:HD13	10	1.8
(1,622)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HD11	10	1.8
(1,622)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HD12	10	1.8
(1,622)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:HD13	10	1.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,584)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	1	1.8
(1,584)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	1	1.8
(1,584)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	1	1.8
(1,584)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	2	1.8
(1,584)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	2	1.8
(1,584)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	2	1.8
(1,464)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:H	4	1.8
(1,464)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:H	8	1.8
(1,464)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:H	10	1.8
(1,266)	1:10:A:GLN:HE22	1:13:A:LYS:HB2	8	1.8
(1,266)	1:10:A:GLN:HE22	1:13:A:LYS:HB3	8	1.8
(1,46)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	6	1.8
(1,46)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	6	1.8
(1,46)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	6	1.8
(3,209)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:HD21	3	1.79
(3,209)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:HD22	3	1.79
(3,209)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:HD23	3	1.79
(3,209)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:HD21	4	1.79
(3,209)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:HD22	4	1.79
(3,209)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:HD23	4	1.79
(3,198)	1:19:A:SER:HB2	1:21:A:ARG:HG3	8	1.79
(3,191)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HZ2	8	1.79
(3,191)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HZ2	9	1.79
(3,191)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HZ2	10	1.79
(3,185)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG12	10	1.79
(3,185)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG12	10	1.79
(3,185)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG12	10	1.79
(3,170)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	4	1.79
(3,170)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	4	1.79
(3,170)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	4	1.79
(3,134)	1:21:A:ARG:H	1:22:A:PRO:HD2	9	1.79
(3,8)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	4	1.79
(3,8)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	4	1.79
(3,8)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	4	1.79
(3,8)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	5	1.79
(3,8)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	5	1.79
(3,8)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	5	1.79
(3,8)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	10	1.79
(3,8)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	10	1.79
(3,8)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	10	1.79
(2,462)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HG2	3	1.79
(2,339)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:H	6	1.79

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,244)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	10	1.79
(2,244)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	10	1.79
(2,244)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	10	1.79
(2,244)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	10	1.79
(2,244)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	10	1.79
(2,244)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	10	1.79
(1,681)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:HD21	3	1.79
(1,681)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:HD22	3	1.79
(1,681)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:HD23	3	1.79
(1,681)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:HD21	4	1.79
(1,681)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:HD22	4	1.79
(1,681)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:HD23	4	1.79
(1,661)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HG2	3	1.79
(1,657)	1:19:A:SER:HB2	1:21:A:ARG:HG3	8	1.79
(1,631)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HZ2	8	1.79
(1,631)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HZ2	9	1.79
(1,631)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HZ2	10	1.79
(1,609)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG12	10	1.79
(1,609)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG12	10	1.79
(1,609)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG12	10	1.79
(1,584)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	4	1.79
(1,584)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	4	1.79
(1,584)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	4	1.79
(1,488)	1:21:A:ARG:H	1:22:A:PRO:HD2	9	1.79
(1,464)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:H	6	1.79
(1,313)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	10	1.79
(1,313)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	10	1.79
(1,313)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	10	1.79
(1,313)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	10	1.79
(1,313)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	10	1.79
(1,313)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	10	1.79
(1,46)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	4	1.79
(1,46)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	4	1.79
(1,46)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	4	1.79
(1,46)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	5	1.79
(1,46)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	5	1.79
(1,46)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	5	1.79
(1,46)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	10	1.79
(1,46)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	10	1.79
(1,46)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	10	1.79
(3,191)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HZ2	2	1.78
(3,191)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HZ2	4	1.78

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,191)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HZ2	6	1.78
(3,191)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HZ2	7	1.78
(3,185)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG12	8	1.78
(3,185)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG12	8	1.78
(3,185)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG12	8	1.78
(3,185)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG12	9	1.78
(3,185)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG12	9	1.78
(3,185)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG12	9	1.78
(3,137)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD21	3	1.78
(3,137)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD22	3	1.78
(3,137)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD23	3	1.78
(3,134)	1:21:A:ARG:H	1:22:A:PRO:HD2	7	1.78
(3,8)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	1	1.78
(3,8)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	1	1.78
(3,8)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	1	1.78
(3,8)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	2	1.78
(3,8)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	2	1.78
(3,8)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	2	1.78
(2,462)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HG2	7	1.78
(1,661)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HG2	7	1.78
(1,631)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HZ2	2	1.78
(1,631)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HZ2	4	1.78
(1,631)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HZ2	6	1.78
(1,631)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HZ2	7	1.78
(1,609)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG12	8	1.78
(1,609)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG12	8	1.78
(1,609)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG12	8	1.78
(1,609)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG12	9	1.78
(1,609)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG12	9	1.78
(1,609)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG12	9	1.78
(1,497)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD21	3	1.78
(1,497)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD22	3	1.78
(1,497)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD23	3	1.78
(1,488)	1:21:A:ARG:H	1:22:A:PRO:HD2	7	1.78
(1,46)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	1	1.78
(1,46)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	1	1.78
(1,46)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	1	1.78
(1,46)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	2	1.78
(1,46)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	2	1.78
(1,46)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	2	1.78
(3,198)	1:19:A:SER:HB2	1:21:A:ARG:HG3	9	1.77
(3,191)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HZ2	1	1.77

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,191)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HZ2	3	1.77
(3,50)	1:10:A:GLN:HE22	1:13:A:LYS:HB2	3	1.77
(3,50)	1:10:A:GLN:HE22	1:13:A:LYS:HB3	3	1.77
(3,8)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	7	1.77
(3,8)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	7	1.77
(3,8)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	7	1.77
(3,8)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	9	1.77
(3,8)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	9	1.77
(3,8)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	9	1.77
(1,657)	1:19:A:SER:HB2	1:21:A:ARG:HG3	9	1.77
(1,631)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HZ2	1	1.77
(1,631)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HZ2	3	1.77
(1,266)	1:10:A:GLN:HE22	1:13:A:LYS:HB2	3	1.77
(1,266)	1:10:A:GLN:HE22	1:13:A:LYS:HB3	3	1.77
(1,46)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	7	1.77
(1,46)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	7	1.77
(1,46)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	7	1.77
(1,46)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD21	9	1.77
(1,46)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD22	9	1.77
(1,46)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD23	9	1.77
(3,209)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:HD21	1	1.76
(3,209)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:HD22	1	1.76
(3,209)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:HD23	1	1.76
(3,209)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:HD21	2	1.76
(3,209)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:HD22	2	1.76
(3,209)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:HD23	2	1.76
(3,198)	1:19:A:SER:HB2	1:21:A:ARG:HG3	7	1.76
(3,137)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD21	2	1.76
(3,137)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD22	2	1.76
(3,137)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD23	2	1.76
(1,681)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:HD21	1	1.76
(1,681)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:HD22	1	1.76
(1,681)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:HD23	1	1.76
(1,681)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:HD21	2	1.76
(1,681)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:HD22	2	1.76
(1,681)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:HD23	2	1.76
(1,657)	1:19:A:SER:HB2	1:21:A:ARG:HG3	7	1.76
(1,497)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD21	2	1.76
(1,497)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD22	2	1.76
(1,497)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD23	2	1.76
(3,200)	1:16:A:GLY:HA2	1:19:A:SER:HB3	5	1.75
(3,198)	1:19:A:SER:HB2	1:21:A:ARG:HG3	5	1.75

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,90)	1:9:A:ILE:HG13	1:11:A:TRP:HE3	9	1.75
(1,662)	1:16:A:GLY:HA2	1:19:A:SER:HB3	5	1.75
(1,657)	1:19:A:SER:HB2	1:21:A:ARG:HG3	5	1.75
(1,363)	1:9:A:ILE:HG13	1:11:A:TRP:HE3	9	1.75
(3,50)	1:10:A:GLN:HE22	1:13:A:LYS:HB2	6	1.74
(3,50)	1:10:A:GLN:HE22	1:13:A:LYS:HB3	6	1.74
(2,462)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HG2	6	1.74
(1,661)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HG2	6	1.74
(1,266)	1:10:A:GLN:HE22	1:13:A:LYS:HB2	6	1.74
(1,266)	1:10:A:GLN:HE22	1:13:A:LYS:HB3	6	1.74
(3,209)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:HD21	5	1.73
(3,209)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:HD22	5	1.73
(3,209)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:HD23	5	1.73
(3,185)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG12	3	1.73
(3,185)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG12	3	1.73
(3,185)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG12	3	1.73
(3,170)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	3	1.73
(3,170)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	3	1.73
(3,170)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	3	1.73
(3,170)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	6	1.73
(3,170)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	6	1.73
(3,170)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	6	1.73
(3,137)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD21	1	1.73
(3,137)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD22	1	1.73
(3,137)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD23	1	1.73
(3,50)	1:10:A:GLN:HE22	1:13:A:LYS:HB2	4	1.73
(3,50)	1:10:A:GLN:HE22	1:13:A:LYS:HB3	4	1.73
(3,50)	1:10:A:GLN:HE22	1:13:A:LYS:HB2	7	1.73
(3,50)	1:10:A:GLN:HE22	1:13:A:LYS:HB3	7	1.73
(1,681)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:HD21	5	1.73
(1,681)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:HD22	5	1.73
(1,681)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:HD23	5	1.73
(1,609)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG12	3	1.73
(1,609)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG12	3	1.73
(1,609)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG12	3	1.73
(1,584)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	3	1.73
(1,584)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	3	1.73
(1,584)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	3	1.73
(1,584)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD11	6	1.73
(1,584)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD12	6	1.73
(1,584)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD13	6	1.73
(1,497)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD21	1	1.73

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,497)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD22	1	1.73
(1,497)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD23	1	1.73
(1,266)	1:10:A:GLN:HE22	1:13:A:LYS:HB2	4	1.73
(1,266)	1:10:A:GLN:HE22	1:13:A:LYS:HB3	4	1.73
(1,266)	1:10:A:GLN:HE22	1:13:A:LYS:HB2	7	1.73
(1,266)	1:10:A:GLN:HE22	1:13:A:LYS:HB3	7	1.73
(3,191)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HZ2	5	1.72
(3,121)	1:16:A:GLY:H	1:18:A:SER:HB2	1	1.72
(3,121)	1:16:A:GLY:H	1:18:A:SER:HB3	1	1.72
(3,69)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	10	1.72
(3,69)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	10	1.72
(3,69)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	10	1.72
(3,69)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	10	1.72
(3,69)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	10	1.72
(3,69)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	10	1.72
(1,631)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HZ2	5	1.72
(1,450)	1:16:A:GLY:H	1:18:A:SER:HB2	1	1.72
(1,450)	1:16:A:GLY:H	1:18:A:SER:HB3	1	1.72
(1,312)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	10	1.72
(1,312)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	10	1.72
(1,312)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	10	1.72
(1,312)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	10	1.72
(1,312)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	10	1.72
(1,312)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	10	1.72
(3,185)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG12	6	1.71
(3,185)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG12	6	1.71
(3,185)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG12	6	1.71
(3,90)	1:9:A:ILE:HG13	1:11:A:TRP:HE3	2	1.71
(1,609)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG12	6	1.71
(1,609)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG12	6	1.71
(1,609)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG12	6	1.71
(1,363)	1:9:A:ILE:HG13	1:11:A:TRP:HE3	2	1.71
(3,116)	1:21:A:ARG:HG2	1:23:A:PRO:HD3	5	1.7
(3,116)	1:21:A:ARG:HG2	1:23:A:PRO:HD3	6	1.7
(3,69)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	8	1.7
(3,69)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	8	1.7
(3,69)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	8	1.7
(3,69)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	8	1.7
(3,69)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	8	1.7
(3,69)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	8	1.7
(1,442)	1:21:A:ARG:HG2	1:23:A:PRO:HD3	5	1.7
(1,442)	1:21:A:ARG:HG2	1:23:A:PRO:HD3	6	1.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,312)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	8	1.7
(1,312)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	8	1.7
(1,312)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	8	1.7
(1,312)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	8	1.7
(1,312)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	8	1.7
(1,312)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	8	1.7
(3,137)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD21	6	1.69
(3,137)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD22	6	1.69
(3,137)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD23	6	1.69
(3,90)	1:9:A:ILE:HG13	1:11:A:TRP:HE3	3	1.69
(1,497)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD21	6	1.69
(1,497)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD22	6	1.69
(1,497)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD23	6	1.69
(1,363)	1:9:A:ILE:HG13	1:11:A:TRP:HE3	3	1.69
(3,185)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG12	1	1.68
(3,185)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG12	1	1.68
(3,185)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG12	1	1.68
(3,185)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG12	4	1.68
(3,185)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG12	4	1.68
(3,185)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG12	4	1.68
(3,185)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG12	5	1.68
(3,185)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG12	5	1.68
(3,185)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG12	5	1.68
(3,139)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:H	9	1.68
(3,139)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:H	9	1.68
(3,139)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:H	9	1.68
(3,137)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD21	5	1.68
(3,137)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD22	5	1.68
(3,137)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD23	5	1.68
(1,609)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG12	1	1.68
(1,609)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG12	1	1.68
(1,609)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG12	1	1.68
(1,609)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG12	4	1.68
(1,609)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG12	4	1.68
(1,609)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG12	4	1.68
(1,609)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG12	5	1.68
(1,609)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG12	5	1.68
(1,609)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG12	5	1.68
(1,499)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:H	9	1.68
(1,499)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:H	9	1.68
(1,499)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:H	9	1.68
(1,497)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD21	5	1.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,497)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD22	5	1.68
(1,497)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD23	5	1.68
(3,185)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG12	7	1.67
(3,185)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG12	7	1.67
(3,185)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG12	7	1.67
(3,157)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB1	7	1.67
(3,157)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB2	7	1.67
(3,157)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB3	7	1.67
(3,90)	1:9:A:ILE:HG13	1:11:A:TRP:HE3	1	1.67
(3,50)	1:10:A:GLN:HE22	1:13:A:LYS:HB2	2	1.67
(3,50)	1:10:A:GLN:HE22	1:13:A:LYS:HB3	2	1.67
(3,50)	1:10:A:GLN:HE22	1:13:A:LYS:HB2	10	1.67
(3,50)	1:10:A:GLN:HE22	1:13:A:LYS:HB3	10	1.67
(2,339)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:H	3	1.67
(1,609)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG12	7	1.67
(1,609)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG12	7	1.67
(1,609)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG12	7	1.67
(1,563)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB1	7	1.67
(1,563)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB2	7	1.67
(1,563)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB3	7	1.67
(1,464)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:H	3	1.67
(1,363)	1:9:A:ILE:HG13	1:11:A:TRP:HE3	1	1.67
(1,266)	1:10:A:GLN:HE22	1:13:A:LYS:HB2	2	1.67
(1,266)	1:10:A:GLN:HE22	1:13:A:LYS:HB3	2	1.67
(1,266)	1:10:A:GLN:HE22	1:13:A:LYS:HB2	10	1.67
(1,266)	1:10:A:GLN:HE22	1:13:A:LYS:HB3	10	1.67
(3,185)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG12	2	1.66
(3,185)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG12	2	1.66
(3,185)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG12	2	1.66
(3,157)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB1	9	1.66
(3,157)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB2	9	1.66
(3,157)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB3	9	1.66
(3,69)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	7	1.66
(3,69)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	7	1.66
(3,69)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	7	1.66
(3,69)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	7	1.66
(3,69)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	7	1.66
(3,69)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	7	1.66
(2,266)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HG2	5	1.66
(1,609)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG12	2	1.66
(1,609)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG12	2	1.66
(1,609)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG12	2	1.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,563)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB1	9	1.66
(1,563)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB2	9	1.66
(1,563)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB3	9	1.66
(1,348)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HG2	5	1.66
(1,312)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	7	1.66
(1,312)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	7	1.66
(1,312)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	7	1.66
(1,312)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	7	1.66
(1,312)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	7	1.66
(1,312)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	7	1.66
(3,139)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:H	5	1.65
(3,139)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:H	5	1.65
(3,139)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:H	5	1.65
(3,139)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:H	8	1.65
(3,139)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:H	8	1.65
(3,139)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:H	8	1.65
(3,139)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:H	10	1.65
(3,139)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:H	10	1.65
(3,139)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:H	10	1.65
(3,137)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD21	4	1.65
(3,137)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD22	4	1.65
(3,137)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD23	4	1.65
(3,113)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD2	7	1.65
(3,90)	1:9:A:ILE:HG13	1:11:A:TRP:HE3	8	1.65
(3,90)	1:9:A:ILE:HG13	1:11:A:TRP:HE3	10	1.65
(3,50)	1:10:A:GLN:HE22	1:13:A:LYS:HB2	9	1.65
(3,50)	1:10:A:GLN:HE22	1:13:A:LYS:HB3	9	1.65
(1,499)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:H	5	1.65
(1,499)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:H	5	1.65
(1,499)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:H	5	1.65
(1,499)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:H	8	1.65
(1,499)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:H	8	1.65
(1,499)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:H	8	1.65
(1,499)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:H	10	1.65
(1,499)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:H	10	1.65
(1,499)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:H	10	1.65
(1,497)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD21	4	1.65
(1,497)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD22	4	1.65
(1,497)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:LEU:HD23	4	1.65
(1,439)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD2	7	1.65
(1,363)	1:9:A:ILE:HG13	1:11:A:TRP:HE3	8	1.65
(1,363)	1:9:A:ILE:HG13	1:11:A:TRP:HE3	10	1.65

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,266)	1:10:A:GLN:HE22	1:13:A:LYS:HB2	9	1.65
(1,266)	1:10:A:GLN:HE22	1:13:A:LYS:HB3	9	1.65
(3,157)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB1	1	1.64
(3,157)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB2	1	1.64
(3,157)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB3	1	1.64
(3,139)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:H	7	1.64
(3,139)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:H	7	1.64
(3,139)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:H	7	1.64
(3,113)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD2	8	1.64
(3,69)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	3	1.64
(3,69)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	3	1.64
(3,69)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	3	1.64
(3,69)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	3	1.64
(3,69)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	3	1.64
(3,69)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	3	1.64
(3,69)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	9	1.64
(3,69)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	9	1.64
(3,69)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	9	1.64
(3,69)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	9	1.64
(3,69)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	9	1.64
(3,69)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	9	1.64
(3,55)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HD2	5	1.64
(2,398)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HG3	5	1.64
(1,563)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB1	1	1.64
(1,563)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB2	1	1.64
(1,563)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB3	1	1.64
(1,552)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HG3	5	1.64
(1,499)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:H	7	1.64
(1,499)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:H	7	1.64
(1,499)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:H	7	1.64
(1,439)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD2	8	1.64
(1,312)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	3	1.64
(1,312)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	3	1.64
(1,312)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	3	1.64
(1,312)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	3	1.64
(1,312)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	3	1.64
(1,312)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	3	1.64
(1,312)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	9	1.64
(1,312)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	9	1.64
(1,312)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	9	1.64
(1,312)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	9	1.64
(1,312)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	9	1.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,312)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	9	1.64
(1,277)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HD2	5	1.64
(3,157)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB1	5	1.63
(3,157)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB2	5	1.63
(3,157)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB3	5	1.63
(3,90)	1:9:A:ILE:HG13	1:11:A:TRP:HE3	4	1.63
(3,90)	1:9:A:ILE:HG13	1:11:A:TRP:HE3	6	1.63
(2,406)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HB2	1	1.63
(2,406)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HB2	6	1.63
(1,563)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB1	5	1.63
(1,563)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB2	5	1.63
(1,563)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB3	5	1.63
(1,561)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HB2	1	1.63
(1,561)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HB2	6	1.63
(1,363)	1:9:A:ILE:HG13	1:11:A:TRP:HE3	4	1.63
(1,363)	1:9:A:ILE:HG13	1:11:A:TRP:HE3	6	1.63
(3,206)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HG2	2	1.62
(3,206)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HG2	2	1.62
(3,206)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HG2	2	1.62
(3,206)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HG3	2	1.62
(3,206)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HG3	2	1.62
(3,206)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HG3	2	1.62
(3,157)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB1	10	1.62
(3,157)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB2	10	1.62
(3,157)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB3	10	1.62
(3,69)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	1	1.62
(3,69)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	1	1.62
(3,69)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	1	1.62
(3,69)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	1	1.62
(3,69)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	1	1.62
(3,69)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	1	1.62
(2,406)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HB2	4	1.62
(2,406)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HB2	8	1.62
(1,676)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HG2	2	1.62
(1,676)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HG2	2	1.62
(1,676)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HG2	2	1.62
(1,676)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HG3	2	1.62
(1,676)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HG3	2	1.62
(1,676)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HG3	2	1.62
(1,563)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB1	10	1.62
(1,563)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB2	10	1.62
(1,563)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB3	10	1.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,561)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HB2	4	1.62
(1,561)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HB2	8	1.62
(1,312)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	1	1.62
(1,312)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	1	1.62
(1,312)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	1	1.62
(1,312)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	1	1.62
(1,312)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	1	1.62
(1,312)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	1	1.62
(3,139)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:H	2	1.61
(3,139)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:H	2	1.61
(3,139)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:H	2	1.61
(3,139)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:H	4	1.61
(3,139)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:H	4	1.61
(3,139)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:H	4	1.61
(3,113)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD2	9	1.61
(3,50)	1:10:A:GLN:HE22	1:13:A:LYS:HB2	1	1.61
(3,50)	1:10:A:GLN:HE22	1:13:A:LYS:HB3	1	1.61
(2,406)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HB2	3	1.61
(1,561)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HB2	3	1.61
(1,499)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:H	2	1.61
(1,499)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:H	2	1.61
(1,499)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:H	2	1.61
(1,499)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:H	4	1.61
(1,499)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:H	4	1.61
(1,499)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:H	4	1.61
(1,439)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD2	9	1.61
(1,266)	1:10:A:GLN:HE22	1:13:A:LYS:HB2	1	1.61
(1,266)	1:10:A:GLN:HE22	1:13:A:LYS:HB3	1	1.61
(3,206)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HG2	1	1.6
(3,206)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HG2	1	1.6
(3,206)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HG2	1	1.6
(3,206)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HG3	1	1.6
(3,206)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HG3	1	1.6
(3,206)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HG3	1	1.6
(3,183)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD21	3	1.6
(3,183)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD22	3	1.6
(3,183)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD23	3	1.6
(3,157)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB1	2	1.6
(3,157)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB2	2	1.6
(3,157)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB3	2	1.6
(3,139)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:H	1	1.6
(3,139)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:H	1	1.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,139)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:H	1	1.6
(3,139)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:H	3	1.6
(3,139)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:H	3	1.6
(3,139)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:H	3	1.6
(3,79)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HD2	1	1.6
(3,79)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HD2	4	1.6
(3,69)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	6	1.6
(3,69)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	6	1.6
(3,69)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	6	1.6
(3,69)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	6	1.6
(3,69)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	6	1.6
(3,69)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	6	1.6
(2,463)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HD2	5	1.6
(2,406)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HB2	7	1.6
(1,676)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HG2	1	1.6
(1,676)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HG2	1	1.6
(1,676)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HG2	1	1.6
(1,676)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HG3	1	1.6
(1,676)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HG3	1	1.6
(1,676)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HG3	1	1.6
(1,663)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HD2	5	1.6
(1,607)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD21	3	1.6
(1,607)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD22	3	1.6
(1,607)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD23	3	1.6
(1,563)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB1	2	1.6
(1,563)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB2	2	1.6
(1,563)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB3	2	1.6
(1,561)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HB2	7	1.6
(1,499)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:H	1	1.6
(1,499)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:H	1	1.6
(1,499)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:H	1	1.6
(1,499)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:H	3	1.6
(1,499)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:H	3	1.6
(1,499)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:H	3	1.6
(1,338)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HD2	1	1.6
(1,338)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HD2	4	1.6
(1,312)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	6	1.6
(1,312)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	6	1.6
(1,312)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	6	1.6
(1,312)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	6	1.6
(1,312)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	6	1.6
(1,312)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	6	1.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,183)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD21	5	1.59
(3,183)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD22	5	1.59
(3,183)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD23	5	1.59
(3,139)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:H	6	1.59
(3,139)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:H	6	1.59
(3,139)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:H	6	1.59
(3,90)	1:9:A:ILE:HG13	1:11:A:TRP:HE3	5	1.59
(3,79)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HD2	2	1.59
(3,79)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HD2	10	1.59
(2,406)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HB2	2	1.59
(2,406)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HB2	5	1.59
(2,406)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HB2	9	1.59
(1,607)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD21	5	1.59
(1,607)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD22	5	1.59
(1,607)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD23	5	1.59
(1,561)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HB2	2	1.59
(1,561)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HB2	5	1.59
(1,561)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HB2	9	1.59
(1,499)	1:7:A:LEU:HD11	1:10:A:GLN:H	6	1.59
(1,499)	1:7:A:LEU:HD12	1:10:A:GLN:H	6	1.59
(1,499)	1:7:A:LEU:HD13	1:10:A:GLN:H	6	1.59
(1,363)	1:9:A:ILE:HG13	1:11:A:TRP:HE3	5	1.59
(1,338)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HD2	2	1.59
(1,338)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HD2	10	1.59
(3,134)	1:21:A:ARG:H	1:22:A:PRO:HD2	10	1.58
(3,69)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	2	1.58
(3,69)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	2	1.58
(3,69)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	2	1.58
(3,69)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	2	1.58
(3,69)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	2	1.58
(3,69)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	2	1.58
(3,50)	1:10:A:GLN:HE22	1:13:A:LYS:HB2	5	1.58
(3,50)	1:10:A:GLN:HE22	1:13:A:LYS:HB3	5	1.58
(2,388)	1:1:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:H	8	1.58
(1,536)	1:1:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:H	8	1.58
(1,488)	1:21:A:ARG:H	1:22:A:PRO:HD2	10	1.58
(1,312)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	2	1.58
(1,312)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	2	1.58
(1,312)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	2	1.58
(1,312)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	2	1.58
(1,312)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	2	1.58
(1,312)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	2	1.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,266)	1:10:A:GLN:HE22	1:13:A:LYS:HB2	5	1.58
(1,266)	1:10:A:GLN:HE22	1:13:A:LYS:HB3	5	1.58
(3,183)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD21	1	1.57
(3,183)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD22	1	1.57
(3,183)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD23	1	1.57
(3,165)	1:6:A:ARG:HA	1:7:A:LEU:HD11	7	1.57
(3,165)	1:6:A:ARG:HA	1:7:A:LEU:HD12	7	1.57
(3,165)	1:6:A:ARG:HA	1:7:A:LEU:HD13	7	1.57
(3,69)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	5	1.57
(3,69)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	5	1.57
(3,69)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	5	1.57
(3,69)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	5	1.57
(3,69)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	5	1.57
(3,69)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	5	1.57
(2,406)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HB2	10	1.57
(2,388)	1:1:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:H	10	1.57
(1,607)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD21	1	1.57
(1,607)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD22	1	1.57
(1,607)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD23	1	1.57
(1,578)	1:6:A:ARG:HA	1:7:A:LEU:HD11	7	1.57
(1,578)	1:6:A:ARG:HA	1:7:A:LEU:HD12	7	1.57
(1,578)	1:6:A:ARG:HA	1:7:A:LEU:HD13	7	1.57
(1,561)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HB2	10	1.57
(1,536)	1:1:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:H	10	1.57
(1,312)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	5	1.57
(1,312)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	5	1.57
(1,312)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	5	1.57
(1,312)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	5	1.57
(1,312)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	5	1.57
(1,312)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	5	1.57
(3,206)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HG2	4	1.56
(3,206)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HG2	4	1.56
(3,206)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HG2	4	1.56
(3,206)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HG3	4	1.56
(3,206)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HG3	4	1.56
(3,206)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HG3	4	1.56
(3,178)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HG2	4	1.56
(3,178)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HG2	4	1.56
(3,178)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HG2	4	1.56
(3,178)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HG3	4	1.56
(3,178)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HG3	4	1.56
(3,178)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HG3	4	1.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,157)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB1	8	1.56
(3,157)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB2	8	1.56
(3,157)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB3	8	1.56
(3,129)	1:12:A:LEU:HG	1:16:A:GLY:H	10	1.56
(2,388)	1:1:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:H	1	1.56
(2,388)	1:1:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:H	7	1.56
(2,322)	1:21:A:ARG:HB3	1:22:A:PRO:HD2	6	1.56
(1,676)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HG2	4	1.56
(1,676)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HG2	4	1.56
(1,676)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HG2	4	1.56
(1,676)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HG3	4	1.56
(1,676)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HG3	4	1.56
(1,676)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HG3	4	1.56
(1,597)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HG2	4	1.56
(1,597)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HG2	4	1.56
(1,597)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HG2	4	1.56
(1,597)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HG3	4	1.56
(1,597)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HG3	4	1.56
(1,597)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HG3	4	1.56
(1,563)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB1	8	1.56
(1,563)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB2	8	1.56
(1,563)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB3	8	1.56
(1,536)	1:1:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:H	1	1.56
(1,536)	1:1:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:H	7	1.56
(1,470)	1:12:A:LEU:HG	1:16:A:GLY:H	10	1.56
(1,434)	1:21:A:ARG:HB3	1:22:A:PRO:HD2	6	1.56
(3,183)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD21	6	1.55
(3,183)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD22	6	1.55
(3,183)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD23	6	1.55
(3,165)	1:6:A:ARG:HA	1:7:A:LEU:HD11	1	1.55
(3,165)	1:6:A:ARG:HA	1:7:A:LEU:HD12	1	1.55
(3,165)	1:6:A:ARG:HA	1:7:A:LEU:HD13	1	1.55
(3,165)	1:6:A:ARG:HA	1:7:A:LEU:HD11	5	1.55
(3,165)	1:6:A:ARG:HA	1:7:A:LEU:HD12	5	1.55
(3,165)	1:6:A:ARG:HA	1:7:A:LEU:HD13	5	1.55
(3,165)	1:6:A:ARG:HA	1:7:A:LEU:HD11	9	1.55
(3,165)	1:6:A:ARG:HA	1:7:A:LEU:HD12	9	1.55
(3,165)	1:6:A:ARG:HA	1:7:A:LEU:HD13	9	1.55
(2,388)	1:1:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:H	5	1.55
(2,388)	1:1:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:H	9	1.55
(1,607)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD21	6	1.55
(1,607)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD22	6	1.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,607)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD23	6	1.55
(1,578)	1:6:A:ARG:HA	1:7:A:LEU:HD11	1	1.55
(1,578)	1:6:A:ARG:HA	1:7:A:LEU:HD12	1	1.55
(1,578)	1:6:A:ARG:HA	1:7:A:LEU:HD13	1	1.55
(1,578)	1:6:A:ARG:HA	1:7:A:LEU:HD11	5	1.55
(1,578)	1:6:A:ARG:HA	1:7:A:LEU:HD12	5	1.55
(1,578)	1:6:A:ARG:HA	1:7:A:LEU:HD13	5	1.55
(1,578)	1:6:A:ARG:HA	1:7:A:LEU:HD11	9	1.55
(1,578)	1:6:A:ARG:HA	1:7:A:LEU:HD12	9	1.55
(1,578)	1:6:A:ARG:HA	1:7:A:LEU:HD13	9	1.55
(1,536)	1:1:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:H	5	1.55
(1,536)	1:1:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:H	9	1.55
(3,183)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD21	2	1.54
(3,183)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD22	2	1.54
(3,183)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD23	2	1.54
(3,157)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB1	4	1.54
(3,157)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB2	4	1.54
(3,157)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB3	4	1.54
(3,129)	1:12:A:LEU:HG	1:16:A:GLY:H	8	1.54
(3,113)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD2	10	1.54
(3,93)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD21	9	1.54
(3,93)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD22	9	1.54
(3,93)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD23	9	1.54
(2,388)	1:1:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:H	6	1.54
(2,266)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HG2	10	1.54
(1,607)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD21	2	1.54
(1,607)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD22	2	1.54
(1,607)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD23	2	1.54
(1,563)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB1	4	1.54
(1,563)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB2	4	1.54
(1,563)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB3	4	1.54
(1,536)	1:1:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:H	6	1.54
(1,470)	1:12:A:LEU:HG	1:16:A:GLY:H	8	1.54
(1,439)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD2	10	1.54
(1,367)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD21	9	1.54
(1,367)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD22	9	1.54
(1,367)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD23	9	1.54
(1,348)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HG2	10	1.54
(3,165)	1:6:A:ARG:HA	1:7:A:LEU:HD11	2	1.53
(3,165)	1:6:A:ARG:HA	1:7:A:LEU:HD12	2	1.53
(3,165)	1:6:A:ARG:HA	1:7:A:LEU:HD13	2	1.53
(3,165)	1:6:A:ARG:HA	1:7:A:LEU:HD11	4	1.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,165)	1:6:A:ARG:HA	1:7:A:LEU:HD12	4	1.53
(3,165)	1:6:A:ARG:HA	1:7:A:LEU:HD13	4	1.53
(3,165)	1:6:A:ARG:HA	1:7:A:LEU:HD11	6	1.53
(3,165)	1:6:A:ARG:HA	1:7:A:LEU:HD12	6	1.53
(3,165)	1:6:A:ARG:HA	1:7:A:LEU:HD13	6	1.53
(3,157)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB1	6	1.53
(3,157)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB2	6	1.53
(3,157)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB3	6	1.53
(3,134)	1:21:A:ARG:H	1:22:A:PRO:HD2	3	1.53
(3,93)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD21	7	1.53
(3,93)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD22	7	1.53
(3,93)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD23	7	1.53
(3,79)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HD2	3	1.53
(2,388)	1:1:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:H	2	1.53
(2,388)	1:1:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:H	4	1.53
(2,266)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HG2	6	1.53
(1,578)	1:6:A:ARG:HA	1:7:A:LEU:HD11	2	1.53
(1,578)	1:6:A:ARG:HA	1:7:A:LEU:HD12	2	1.53
(1,578)	1:6:A:ARG:HA	1:7:A:LEU:HD13	2	1.53
(1,578)	1:6:A:ARG:HA	1:7:A:LEU:HD11	4	1.53
(1,578)	1:6:A:ARG:HA	1:7:A:LEU:HD12	4	1.53
(1,578)	1:6:A:ARG:HA	1:7:A:LEU:HD13	4	1.53
(1,578)	1:6:A:ARG:HA	1:7:A:LEU:HD11	6	1.53
(1,578)	1:6:A:ARG:HA	1:7:A:LEU:HD12	6	1.53
(1,578)	1:6:A:ARG:HA	1:7:A:LEU:HD13	6	1.53
(1,563)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB1	6	1.53
(1,563)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB2	6	1.53
(1,563)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB3	6	1.53
(1,536)	1:1:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:H	2	1.53
(1,536)	1:1:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:H	4	1.53
(1,488)	1:21:A:ARG:H	1:22:A:PRO:HD2	3	1.53
(1,367)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD21	7	1.53
(1,367)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD22	7	1.53
(1,367)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD23	7	1.53
(1,348)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HG2	6	1.53
(1,338)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HD2	3	1.53
(3,206)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HG2	3	1.52
(3,206)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HG2	3	1.52
(3,206)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HG2	3	1.52
(3,206)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HG3	3	1.52
(3,206)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HG3	3	1.52
(3,206)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HG3	3	1.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,178)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HG2	6	1.52
(3,178)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HG2	6	1.52
(3,178)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HG2	6	1.52
(3,178)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HG3	6	1.52
(3,178)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HG3	6	1.52
(3,178)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HG3	6	1.52
(3,134)	1:21:A:ARG:H	1:22:A:PRO:HD2	4	1.52
(3,101)	1:11:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HD1	4	1.52
(3,79)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HD2	8	1.52
(3,79)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HD2	9	1.52
(2,398)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HG3	2	1.52
(2,266)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HG2	3	1.52
(2,244)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	7	1.52
(2,244)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	7	1.52
(2,244)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	7	1.52
(2,244)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	7	1.52
(2,244)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	7	1.52
(2,244)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	7	1.52
(1,676)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HG2	3	1.52
(1,676)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HG2	3	1.52
(1,676)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HG2	3	1.52
(1,676)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HG3	3	1.52
(1,676)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HG3	3	1.52
(1,676)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HG3	3	1.52
(1,597)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HG2	6	1.52
(1,597)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HG2	6	1.52
(1,597)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HG2	6	1.52
(1,597)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HG3	6	1.52
(1,597)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HG3	6	1.52
(1,597)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HG3	6	1.52
(1,552)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HG3	2	1.52
(1,488)	1:21:A:ARG:H	1:22:A:PRO:HD2	4	1.52
(1,399)	1:11:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HD1	4	1.52
(1,348)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HG2	3	1.52
(1,338)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HD2	8	1.52
(1,338)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HD2	9	1.52
(1,313)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	7	1.52
(1,313)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	7	1.52
(1,313)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	7	1.52
(1,313)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	7	1.52
(1,313)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	7	1.52
(1,313)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	7	1.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,183)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD21	4	1.51
(3,183)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD22	4	1.51
(3,183)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD23	4	1.51
(3,134)	1:21:A:ARG:H	1:22:A:PRO:HD2	1	1.51
(3,79)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HD2	5	1.51
(3,79)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HD2	7	1.51
(2,322)	1:21:A:ARG:HB3	1:22:A:PRO:HD2	5	1.51
(2,301)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HB2	1	1.51
(2,301)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HB2	4	1.51
(1,607)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD21	4	1.51
(1,607)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD22	4	1.51
(1,607)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:HD23	4	1.51
(1,488)	1:21:A:ARG:H	1:22:A:PRO:HD2	1	1.51
(1,434)	1:21:A:ARG:HB3	1:22:A:PRO:HD2	5	1.51
(1,404)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HB2	1	1.51
(1,404)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HB2	4	1.51
(1,338)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HD2	5	1.51
(1,338)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HD2	7	1.51
(3,165)	1:6:A:ARG:HA	1:7:A:LEU:HD11	3	1.5
(3,165)	1:6:A:ARG:HA	1:7:A:LEU:HD12	3	1.5
(3,165)	1:6:A:ARG:HA	1:7:A:LEU:HD13	3	1.5
(3,165)	1:6:A:ARG:HA	1:7:A:LEU:HD11	10	1.5
(3,165)	1:6:A:ARG:HA	1:7:A:LEU:HD12	10	1.5
(3,165)	1:6:A:ARG:HA	1:7:A:LEU:HD13	10	1.5
(3,134)	1:21:A:ARG:H	1:22:A:PRO:HD2	2	1.5
(3,129)	1:12:A:LEU:HG	1:16:A:GLY:H	7	1.5
(3,113)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD2	2	1.5
(3,101)	1:11:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HD1	5	1.5
(3,101)	1:11:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HD1	6	1.5
(2,266)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HG2	2	1.5
(1,578)	1:6:A:ARG:HA	1:7:A:LEU:HD11	3	1.5
(1,578)	1:6:A:ARG:HA	1:7:A:LEU:HD12	3	1.5
(1,578)	1:6:A:ARG:HA	1:7:A:LEU:HD13	3	1.5
(1,578)	1:6:A:ARG:HA	1:7:A:LEU:HD11	10	1.5
(1,578)	1:6:A:ARG:HA	1:7:A:LEU:HD12	10	1.5
(1,578)	1:6:A:ARG:HA	1:7:A:LEU:HD13	10	1.5
(1,488)	1:21:A:ARG:H	1:22:A:PRO:HD2	2	1.5
(1,470)	1:12:A:LEU:HG	1:16:A:GLY:H	7	1.5
(1,439)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD2	2	1.5
(1,399)	1:11:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HD1	5	1.5
(1,399)	1:11:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HD1	6	1.5
(1,348)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HG2	2	1.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,129)	1:12:A:LEU:HG	1:16:A:GLY:H	9	1.49
(3,113)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD2	1	1.49
(3,113)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD2	3	1.49
(3,113)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD2	4	1.49
(3,101)	1:11:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HD1	1	1.49
(3,101)	1:11:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HD1	2	1.49
(2,388)	1:1:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:H	3	1.49
(2,301)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HB2	2	1.49
(2,266)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HG2	1	1.49
(2,266)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HG2	4	1.49
(1,536)	1:1:A:GLU:HB3	1:5:A:VAL:H	3	1.49
(1,470)	1:12:A:LEU:HG	1:16:A:GLY:H	9	1.49
(1,439)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD2	1	1.49
(1,439)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD2	3	1.49
(1,439)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD2	4	1.49
(1,404)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HB2	2	1.49
(1,399)	1:11:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HD1	1	1.49
(1,399)	1:11:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HD1	2	1.49
(1,348)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HG2	1	1.49
(1,348)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HG2	4	1.49
(3,198)	1:19:A:SER:HB2	1:21:A:ARG:HG3	6	1.48
(3,165)	1:6:A:ARG:HA	1:7:A:LEU:HD11	8	1.48
(3,165)	1:6:A:ARG:HA	1:7:A:LEU:HD12	8	1.48
(3,165)	1:6:A:ARG:HA	1:7:A:LEU:HD13	8	1.48
(2,266)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HG2	7	1.48
(2,266)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HG2	9	1.48
(2,244)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	9	1.48
(2,244)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	9	1.48
(2,244)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	9	1.48
(2,244)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	9	1.48
(2,244)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	9	1.48
(2,244)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	9	1.48
(1,657)	1:19:A:SER:HB2	1:21:A:ARG:HG3	6	1.48
(1,578)	1:6:A:ARG:HA	1:7:A:LEU:HD11	8	1.48
(1,578)	1:6:A:ARG:HA	1:7:A:LEU:HD12	8	1.48
(1,578)	1:6:A:ARG:HA	1:7:A:LEU:HD13	8	1.48
(1,348)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HG2	7	1.48
(1,348)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HG2	9	1.48
(1,313)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	9	1.48
(1,313)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	9	1.48
(1,313)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	9	1.48
(1,313)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	9	1.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,313)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	9	1.48
(1,313)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	9	1.48
(3,206)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HG2	5	1.47
(3,206)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HG2	5	1.47
(3,206)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HG2	5	1.47
(3,206)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HG3	5	1.47
(3,206)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HG3	5	1.47
(3,206)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HG3	5	1.47
(3,101)	1:11:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HD1	3	1.47
(3,79)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HD2	6	1.47
(2,301)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HB2	3	1.47
(2,266)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HG2	8	1.47
(1,676)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HG2	5	1.47
(1,676)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HG2	5	1.47
(1,676)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HG2	5	1.47
(1,676)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HG3	5	1.47
(1,676)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HG3	5	1.47
(1,676)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HG3	5	1.47
(1,404)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HB2	3	1.47
(1,399)	1:11:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HD1	3	1.47
(1,348)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HG2	8	1.47
(1,338)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HD2	6	1.47
(3,84)	1:11:A:TRP:HE3	1:17:A:PRO:HG2	1	1.46
(3,84)	1:11:A:TRP:HE3	1:17:A:PRO:HG3	1	1.46
(2,463)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HD2	2	1.46
(2,398)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HG3	1	1.46
(1,663)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HD2	2	1.46
(1,552)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HG3	1	1.46
(1,350)	1:11:A:TRP:HE3	1:17:A:PRO:HG2	1	1.46
(1,350)	1:11:A:TRP:HE3	1:17:A:PRO:HG3	1	1.46
(3,206)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HG2	6	1.45
(3,206)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HG2	6	1.45
(3,206)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HG2	6	1.45
(3,206)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HG3	6	1.45
(3,206)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HG3	6	1.45
(3,206)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HG3	6	1.45
(3,180)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG3	7	1.45
(3,180)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG3	7	1.45
(3,180)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG3	7	1.45
(1,676)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HG2	6	1.45
(1,676)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HG2	6	1.45
(1,676)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HG2	6	1.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,676)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HG3	6	1.45
(1,676)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HG3	6	1.45
(1,676)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HG3	6	1.45
(1,602)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG3	7	1.45
(1,602)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG3	7	1.45
(1,602)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG3	7	1.45
(3,180)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG3	9	1.44
(3,180)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG3	9	1.44
(3,180)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG3	9	1.44
(3,142)	1:13:A:LYS:HD2	1:14:A:ASP:H	3	1.44
(3,142)	1:13:A:LYS:HD3	1:14:A:ASP:H	3	1.44
(2,463)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HD2	9	1.44
(2,398)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HG3	4	1.44
(1,663)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HD2	9	1.44
(1,602)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG3	9	1.44
(1,602)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG3	9	1.44
(1,602)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG3	9	1.44
(1,552)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HG3	4	1.44
(1,507)	1:13:A:LYS:HD2	1:14:A:ASP:H	3	1.44
(1,507)	1:13:A:LYS:HD3	1:14:A:ASP:H	3	1.44
(3,142)	1:13:A:LYS:HD2	1:14:A:ASP:H	8	1.43
(3,142)	1:13:A:LYS:HD3	1:14:A:ASP:H	8	1.43
(3,84)	1:11:A:TRP:HE3	1:17:A:PRO:HG2	4	1.43
(3,84)	1:11:A:TRP:HE3	1:17:A:PRO:HG3	4	1.43
(3,84)	1:11:A:TRP:HE3	1:17:A:PRO:HG2	5	1.43
(3,84)	1:11:A:TRP:HE3	1:17:A:PRO:HG3	5	1.43
(3,84)	1:11:A:TRP:HE3	1:17:A:PRO:HG2	7	1.43
(3,84)	1:11:A:TRP:HE3	1:17:A:PRO:HG3	7	1.43
(3,84)	1:11:A:TRP:HE3	1:17:A:PRO:HG2	9	1.43
(3,84)	1:11:A:TRP:HE3	1:17:A:PRO:HG3	9	1.43
(1,507)	1:13:A:LYS:HD2	1:14:A:ASP:H	8	1.43
(1,507)	1:13:A:LYS:HD3	1:14:A:ASP:H	8	1.43
(1,350)	1:11:A:TRP:HE3	1:17:A:PRO:HG2	4	1.43
(1,350)	1:11:A:TRP:HE3	1:17:A:PRO:HG3	4	1.43
(1,350)	1:11:A:TRP:HE3	1:17:A:PRO:HG2	5	1.43
(1,350)	1:11:A:TRP:HE3	1:17:A:PRO:HG3	5	1.43
(1,350)	1:11:A:TRP:HE3	1:17:A:PRO:HG2	7	1.43
(1,350)	1:11:A:TRP:HE3	1:17:A:PRO:HG3	7	1.43
(1,350)	1:11:A:TRP:HE3	1:17:A:PRO:HG2	9	1.43
(1,350)	1:11:A:TRP:HE3	1:17:A:PRO:HG3	9	1.43
(3,121)	1:16:A:GLY:H	1:18:A:SER:HB2	10	1.42
(3,121)	1:16:A:GLY:H	1:18:A:SER:HB3	10	1.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,450)	1:16:A:GLY:H	1:18:A:SER:HB2	10	1.42
(1,450)	1:16:A:GLY:H	1:18:A:SER:HB3	10	1.42
(3,157)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB1	3	1.41
(3,157)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB2	3	1.41
(3,157)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB3	3	1.41
(3,84)	1:11:A:TRP:HE3	1:17:A:PRO:HG2	2	1.41
(3,84)	1:11:A:TRP:HE3	1:17:A:PRO:HG3	2	1.41
(2,463)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HD2	4	1.41
(2,463)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HD2	6	1.41
(2,398)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HG3	3	1.41
(1,663)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HD2	4	1.41
(1,663)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HD2	6	1.41
(1,563)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB1	3	1.41
(1,563)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB2	3	1.41
(1,563)	1:1:A:GLU:HB3	1:4:A:ALA:HB3	3	1.41
(1,552)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HG3	3	1.41
(1,350)	1:11:A:TRP:HE3	1:17:A:PRO:HG2	2	1.41
(1,350)	1:11:A:TRP:HE3	1:17:A:PRO:HG3	2	1.41
(3,121)	1:16:A:GLY:H	1:18:A:SER:HB2	2	1.4
(3,121)	1:16:A:GLY:H	1:18:A:SER:HB3	2	1.4
(3,121)	1:16:A:GLY:H	1:18:A:SER:HB2	7	1.4
(3,121)	1:16:A:GLY:H	1:18:A:SER:HB3	7	1.4
(3,108)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB1	3	1.4
(3,108)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB2	3	1.4
(3,108)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB3	3	1.4
(3,101)	1:11:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HD1	10	1.4
(1,450)	1:16:A:GLY:H	1:18:A:SER:HB2	2	1.4
(1,450)	1:16:A:GLY:H	1:18:A:SER:HB3	2	1.4
(1,450)	1:16:A:GLY:H	1:18:A:SER:HB2	7	1.4
(1,450)	1:16:A:GLY:H	1:18:A:SER:HB3	7	1.4
(1,411)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB1	3	1.4
(1,411)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB2	3	1.4
(1,411)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB3	3	1.4
(1,399)	1:11:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HD1	10	1.4
(3,145)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:H	9	1.39
(3,93)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD21	10	1.39
(3,93)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD22	10	1.39
(3,93)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD23	10	1.39
(1,516)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:H	9	1.39
(1,367)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD21	10	1.39
(1,367)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD22	10	1.39
(1,367)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD23	10	1.39

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,145)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:H	7	1.38
(3,124)	1:9:A:ILE:H	1:10:A:GLN:HB3	7	1.38
(3,96)	1:11:A:TRP:HE1	1:24:A:PRO:HD2	9	1.38
(2,463)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HD2	10	1.38
(2,398)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HG3	10	1.38
(1,663)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HD2	10	1.38
(1,552)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HG3	10	1.38
(1,516)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:H	7	1.38
(1,461)	1:9:A:ILE:H	1:10:A:GLN:HB3	7	1.38
(1,378)	1:11:A:TRP:HE1	1:24:A:PRO:HD2	9	1.38
(3,192)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD21	6	1.37
(3,192)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD22	6	1.37
(3,192)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD23	6	1.37
(3,101)	1:11:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HD1	8	1.37
(3,93)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD21	8	1.37
(3,93)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD22	8	1.37
(3,93)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD23	8	1.37
(2,463)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HD2	3	1.37
(2,415)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HB2	7	1.37
(2,415)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HB2	7	1.37
(2,415)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HB2	7	1.37
(2,301)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HB2	10	1.37
(1,663)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HD2	3	1.37
(1,632)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD21	6	1.37
(1,632)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD22	6	1.37
(1,632)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD23	6	1.37
(1,585)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HB2	7	1.37
(1,585)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HB2	7	1.37
(1,585)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HB2	7	1.37
(1,404)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HB2	10	1.37
(1,399)	1:11:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HD1	8	1.37
(1,367)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD21	8	1.37
(1,367)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD22	8	1.37
(1,367)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD23	8	1.37
(3,203)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD11	3	1.36
(3,203)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD12	3	1.36
(3,203)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD13	3	1.36
(3,203)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD11	3	1.36
(3,203)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD12	3	1.36
(3,203)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD13	3	1.36
(3,203)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD11	3	1.36
(3,203)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD12	3	1.36

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,203)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD13	3	1.36
(3,203)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD11	7	1.36
(3,203)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD12	7	1.36
(3,203)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD13	7	1.36
(3,203)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD11	7	1.36
(3,203)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD12	7	1.36
(3,203)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD13	7	1.36
(3,203)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD11	7	1.36
(3,203)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD12	7	1.36
(3,203)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD13	7	1.36
(3,203)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD11	8	1.36
(3,203)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD12	8	1.36
(3,203)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD13	8	1.36
(3,203)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD11	8	1.36
(3,203)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD12	8	1.36
(3,203)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD13	8	1.36
(3,203)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD11	8	1.36
(3,203)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD12	8	1.36
(3,203)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD13	8	1.36
(3,192)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD21	3	1.36
(3,192)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD22	3	1.36
(3,192)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD23	3	1.36
(3,162)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HA	10	1.36
(3,162)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HA	10	1.36
(3,162)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HA	10	1.36
(1,672)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD11	3	1.36
(1,672)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD12	3	1.36
(1,672)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD13	3	1.36
(1,672)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD11	3	1.36
(1,672)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD12	3	1.36
(1,672)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD13	3	1.36
(1,672)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD11	3	1.36
(1,672)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD12	3	1.36
(1,672)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD13	3	1.36
(1,672)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD11	7	1.36
(1,672)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD12	7	1.36
(1,672)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD13	7	1.36
(1,672)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD11	7	1.36
(1,672)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD12	7	1.36
(1,672)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD13	7	1.36
(1,672)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD11	7	1.36
(1,672)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD12	7	1.36

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,672)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD13	7	1.36
(1,672)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD11	8	1.36
(1,672)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD12	8	1.36
(1,672)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD13	8	1.36
(1,672)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD11	8	1.36
(1,672)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD12	8	1.36
(1,672)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD13	8	1.36
(1,672)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD11	8	1.36
(1,672)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD12	8	1.36
(1,672)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD13	8	1.36
(1,632)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD21	3	1.36
(1,632)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD22	3	1.36
(1,632)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD23	3	1.36
(1,573)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HA	10	1.36
(1,573)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HA	10	1.36
(1,573)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HA	10	1.36
(3,203)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD11	5	1.35
(3,203)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD12	5	1.35
(3,203)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD13	5	1.35
(3,203)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD11	5	1.35
(3,203)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD12	5	1.35
(3,203)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD13	5	1.35
(3,203)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD11	5	1.35
(3,203)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD12	5	1.35
(3,203)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD13	5	1.35
(3,203)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD11	10	1.35
(3,203)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD12	10	1.35
(3,203)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD13	10	1.35
(3,203)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD11	10	1.35
(3,203)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD12	10	1.35
(3,203)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD13	10	1.35
(3,203)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD11	10	1.35
(3,203)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD12	10	1.35
(3,203)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD13	10	1.35
(3,200)	1:16:A:GLY:HA2	1:19:A:SER:HB3	8	1.35
(3,162)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HA	8	1.35
(3,162)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HA	8	1.35
(3,162)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HA	8	1.35
(3,145)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:H	8	1.35
(3,145)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:H	10	1.35
(3,143)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HB2	8	1.35
(3,143)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HB3	8	1.35

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,142)	1:13:A:LYS:HD2	1:14:A:ASP:H	7	1.35
(3,142)	1:13:A:LYS:HD3	1:14:A:ASP:H	7	1.35
(3,142)	1:13:A:LYS:HD2	1:14:A:ASP:H	9	1.35
(3,142)	1:13:A:LYS:HD3	1:14:A:ASP:H	9	1.35
(3,101)	1:11:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HD1	9	1.35
(3,69)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	4	1.35
(3,69)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	4	1.35
(3,69)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	4	1.35
(3,69)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	4	1.35
(3,69)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	4	1.35
(3,69)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	4	1.35
(2,447)	1:16:A:GLY:H	1:19:A:SER:HB3	10	1.35
(2,415)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HB2	1	1.35
(2,415)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HB2	1	1.35
(2,415)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HB2	1	1.35
(1,672)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD11	5	1.35
(1,672)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD12	5	1.35
(1,672)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD13	5	1.35
(1,672)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD11	5	1.35
(1,672)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD12	5	1.35
(1,672)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD13	5	1.35
(1,672)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD11	5	1.35
(1,672)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD12	5	1.35
(1,672)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD13	5	1.35
(1,672)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD11	10	1.35
(1,672)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD12	10	1.35
(1,672)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD13	10	1.35
(1,672)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD11	10	1.35
(1,672)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD12	10	1.35
(1,672)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD13	10	1.35
(1,672)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD11	10	1.35
(1,672)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD12	10	1.35
(1,672)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD13	10	1.35
(1,662)	1:16:A:GLY:HA2	1:19:A:SER:HB3	8	1.35
(1,642)	1:16:A:GLY:H	1:19:A:SER:HB3	10	1.35
(1,585)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HB2	1	1.35
(1,585)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HB2	1	1.35
(1,585)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HB2	1	1.35
(1,573)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HA	8	1.35
(1,573)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HA	8	1.35
(1,573)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HA	8	1.35
(1,516)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:H	8	1.35

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,516)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:H	10	1.35
(1,510)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HB2	8	1.35
(1,510)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HB3	8	1.35
(1,507)	1:13:A:LYS:HD2	1:14:A:ASP:H	7	1.35
(1,507)	1:13:A:LYS:HD3	1:14:A:ASP:H	7	1.35
(1,507)	1:13:A:LYS:HD2	1:14:A:ASP:H	9	1.35
(1,507)	1:13:A:LYS:HD3	1:14:A:ASP:H	9	1.35
(1,399)	1:11:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HD1	9	1.35
(1,312)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE1	4	1.35
(1,312)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HE2	4	1.35
(1,312)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE1	4	1.35
(1,312)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HE2	4	1.35
(1,312)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE1	4	1.35
(1,312)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HE2	4	1.35
(3,203)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD11	2	1.34
(3,203)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD12	2	1.34
(3,203)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD13	2	1.34
(3,203)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD11	2	1.34
(3,203)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD12	2	1.34
(3,203)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD13	2	1.34
(3,203)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD11	2	1.34
(3,203)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD12	2	1.34
(3,203)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD13	2	1.34
(3,203)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD11	4	1.34
(3,203)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD12	4	1.34
(3,203)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD13	4	1.34
(3,203)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD11	4	1.34
(3,203)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD12	4	1.34
(3,203)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD13	4	1.34
(3,203)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD11	4	1.34
(3,203)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD12	4	1.34
(3,203)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD13	4	1.34
(3,192)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD21	4	1.34
(3,192)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD22	4	1.34
(3,192)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD23	4	1.34
(3,108)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB1	4	1.34
(3,108)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB2	4	1.34
(3,108)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB3	4	1.34
(2,463)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HD2	1	1.34
(1,672)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD11	2	1.34
(1,672)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD12	2	1.34
(1,672)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD13	2	1.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,672)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD11	2	1.34
(1,672)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD12	2	1.34
(1,672)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD13	2	1.34
(1,672)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD11	2	1.34
(1,672)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD12	2	1.34
(1,672)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD13	2	1.34
(1,672)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD11	4	1.34
(1,672)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD12	4	1.34
(1,672)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD13	4	1.34
(1,672)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD11	4	1.34
(1,672)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD12	4	1.34
(1,672)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD13	4	1.34
(1,672)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD11	4	1.34
(1,672)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD12	4	1.34
(1,672)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD13	4	1.34
(1,663)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HD2	1	1.34
(1,632)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD21	4	1.34
(1,632)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD22	4	1.34
(1,632)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD23	4	1.34
(1,411)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB1	4	1.34
(1,411)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB2	4	1.34
(1,411)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB3	4	1.34
(3,203)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD11	1	1.33
(3,203)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD12	1	1.33
(3,203)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD13	1	1.33
(3,203)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD11	1	1.33
(3,203)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD12	1	1.33
(3,203)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD13	1	1.33
(3,203)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD11	1	1.33
(3,203)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD12	1	1.33
(3,203)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD13	1	1.33
(3,192)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD21	5	1.33
(3,192)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD22	5	1.33
(3,192)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD23	5	1.33
(3,178)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HG2	2	1.33
(3,178)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HG2	2	1.33
(3,178)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HG2	2	1.33
(3,178)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HG3	2	1.33
(3,178)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HG3	2	1.33
(3,178)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HG3	2	1.33
(3,159)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG11	3	1.33
(3,159)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG12	3	1.33

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,159)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG13	3	1.33
(3,143)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HB2	3	1.33
(3,143)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HB3	3	1.33
(3,142)	1:13:A:LYS:HD2	1:14:A:ASP:H	10	1.33
(3,142)	1:13:A:LYS:HD3	1:14:A:ASP:H	10	1.33
(2,415)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HB2	2	1.33
(2,415)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HB2	2	1.33
(2,415)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HB2	2	1.33
(1,672)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD11	1	1.33
(1,672)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD12	1	1.33
(1,672)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD13	1	1.33
(1,672)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD11	1	1.33
(1,672)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD12	1	1.33
(1,672)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD13	1	1.33
(1,672)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD11	1	1.33
(1,672)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD12	1	1.33
(1,672)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD13	1	1.33
(1,632)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD21	5	1.33
(1,632)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD22	5	1.33
(1,632)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD23	5	1.33
(1,597)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HG2	2	1.33
(1,597)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HG2	2	1.33
(1,597)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HG2	2	1.33
(1,597)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HG3	2	1.33
(1,597)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HG3	2	1.33
(1,597)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HG3	2	1.33
(1,585)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HB2	2	1.33
(1,585)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HB2	2	1.33
(1,585)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HB2	2	1.33
(1,567)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG11	3	1.33
(1,567)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG12	3	1.33
(1,567)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG13	3	1.33
(1,510)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HB2	3	1.33
(1,510)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HB3	3	1.33
(1,507)	1:13:A:LYS:HD2	1:14:A:ASP:H	10	1.33
(1,507)	1:13:A:LYS:HD3	1:14:A:ASP:H	10	1.33
(3,203)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD11	9	1.32
(3,203)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD12	9	1.32
(3,203)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD13	9	1.32
(3,203)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD11	9	1.32
(3,203)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD12	9	1.32
(3,203)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD13	9	1.32

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,203)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD11	9	1.32
(3,203)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD12	9	1.32
(3,203)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD13	9	1.32
(3,192)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD21	1	1.32
(3,192)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD22	1	1.32
(3,192)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD23	1	1.32
(3,192)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD21	2	1.32
(3,192)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD22	2	1.32
(3,192)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD23	2	1.32
(3,178)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HG2	9	1.32
(3,178)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HG2	9	1.32
(3,178)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HG2	9	1.32
(3,178)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HG3	9	1.32
(3,178)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HG3	9	1.32
(3,178)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HG3	9	1.32
(3,145)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:H	3	1.32
(3,108)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB1	1	1.32
(3,108)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB2	1	1.32
(3,108)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB3	1	1.32
(3,108)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB1	2	1.32
(3,108)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB2	2	1.32
(3,108)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB3	2	1.32
(3,108)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB1	5	1.32
(3,108)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB2	5	1.32
(3,108)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB3	5	1.32
(3,108)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB1	6	1.32
(3,108)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB2	6	1.32
(3,108)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB3	6	1.32
(3,108)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB1	7	1.32
(3,108)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB2	7	1.32
(3,108)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB3	7	1.32
(3,101)	1:11:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HD1	7	1.32
(2,447)	1:16:A:GLY:H	1:19:A:SER:HB3	8	1.32
(2,415)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HB2	8	1.32
(2,415)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HB2	8	1.32
(2,415)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HB2	8	1.32
(1,672)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD11	9	1.32
(1,672)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD12	9	1.32
(1,672)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD13	9	1.32
(1,672)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD11	9	1.32
(1,672)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD12	9	1.32
(1,672)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD13	9	1.32

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,672)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD11	9	1.32
(1,672)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD12	9	1.32
(1,672)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD13	9	1.32
(1,642)	1:16:A:GLY:H	1:19:A:SER:HB3	8	1.32
(1,632)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD21	1	1.32
(1,632)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD22	1	1.32
(1,632)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD23	1	1.32
(1,632)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD21	2	1.32
(1,632)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD22	2	1.32
(1,632)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD23	2	1.32
(1,597)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HG2	9	1.32
(1,597)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HG2	9	1.32
(1,597)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HG2	9	1.32
(1,597)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HG3	9	1.32
(1,597)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HG3	9	1.32
(1,597)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HG3	9	1.32
(1,585)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HB2	8	1.32
(1,585)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HB2	8	1.32
(1,585)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HB2	8	1.32
(1,516)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:H	3	1.32
(1,411)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB1	1	1.32
(1,411)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB2	1	1.32
(1,411)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB3	1	1.32
(1,411)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB1	2	1.32
(1,411)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB2	2	1.32
(1,411)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB3	2	1.32
(1,411)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB1	5	1.32
(1,411)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB2	5	1.32
(1,411)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB3	5	1.32
(1,411)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB1	6	1.32
(1,411)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB2	6	1.32
(1,411)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB3	6	1.32
(1,411)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB1	7	1.32
(1,411)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB2	7	1.32
(1,411)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB3	7	1.32
(1,399)	1:11:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HD1	7	1.32
(3,178)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HG2	5	1.31
(3,178)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HG2	5	1.31
(3,178)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HG2	5	1.31
(3,178)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HG3	5	1.31
(3,178)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HG3	5	1.31
(3,178)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HG3	5	1.31

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,145)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:H	1	1.31
(3,143)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HB2	2	1.31
(3,143)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HB3	2	1.31
(3,143)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HB2	7	1.31
(3,143)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HB3	7	1.31
(3,119)	1:14:A:ASP:HA	1:16:A:GLY:H	5	1.31
(3,96)	1:11:A:TRP:HE1	1:24:A:PRO:HD2	7	1.31
(3,84)	1:11:A:TRP:HE3	1:17:A:PRO:HG2	10	1.31
(3,84)	1:11:A:TRP:HE3	1:17:A:PRO:HG3	10	1.31
(2,463)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HD2	7	1.31
(2,415)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HB2	5	1.31
(2,415)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HB2	5	1.31
(2,415)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HB2	5	1.31
(2,322)	1:21:A:ARG:HB3	1:22:A:PRO:HD2	8	1.31
(1,663)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HD2	7	1.31
(1,597)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HG2	5	1.31
(1,597)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HG2	5	1.31
(1,597)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HG2	5	1.31
(1,597)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HG3	5	1.31
(1,597)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HG3	5	1.31
(1,597)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HG3	5	1.31
(1,585)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HB2	5	1.31
(1,585)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HB2	5	1.31
(1,585)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HB2	5	1.31
(1,516)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:H	1	1.31
(1,510)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HB2	2	1.31
(1,510)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HB3	2	1.31
(1,510)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HB2	7	1.31
(1,510)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HB3	7	1.31
(1,448)	1:14:A:ASP:HA	1:16:A:GLY:H	5	1.31
(1,434)	1:21:A:ARG:HB3	1:22:A:PRO:HD2	8	1.31
(1,378)	1:11:A:TRP:HE1	1:24:A:PRO:HD2	7	1.31
(1,350)	1:11:A:TRP:HE3	1:17:A:PRO:HG2	10	1.31
(1,350)	1:11:A:TRP:HE3	1:17:A:PRO:HG3	10	1.31
(3,203)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD11	6	1.3
(3,203)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD12	6	1.3
(3,203)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD13	6	1.3
(3,203)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD11	6	1.3
(3,203)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD12	6	1.3
(3,203)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD13	6	1.3
(3,203)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD11	6	1.3
(3,203)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD12	6	1.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,203)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD13	6	1.3
(3,178)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HG2	1	1.3
(3,178)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HG2	1	1.3
(3,178)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HG2	1	1.3
(3,178)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HG3	1	1.3
(3,178)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HG3	1	1.3
(3,178)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HG3	1	1.3
(3,145)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:H	2	1.3
(3,140)	1:6:A:ARG:H	1:9:A:ILE:HD11	2	1.3
(3,140)	1:6:A:ARG:H	1:9:A:ILE:HD12	2	1.3
(3,140)	1:6:A:ARG:H	1:9:A:ILE:HD13	2	1.3
(3,140)	1:6:A:ARG:H	1:9:A:ILE:HD11	4	1.3
(3,140)	1:6:A:ARG:H	1:9:A:ILE:HD12	4	1.3
(3,140)	1:6:A:ARG:H	1:9:A:ILE:HD13	4	1.3
(3,108)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB1	9	1.3
(3,108)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB2	9	1.3
(3,108)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB3	9	1.3
(3,108)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB1	10	1.3
(3,108)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB2	10	1.3
(3,108)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB3	10	1.3
(3,96)	1:11:A:TRP:HE1	1:24:A:PRO:HD2	2	1.3
(3,96)	1:11:A:TRP:HE1	1:24:A:PRO:HD2	10	1.3
(3,84)	1:11:A:TRP:HE3	1:17:A:PRO:HG2	3	1.3
(3,84)	1:11:A:TRP:HE3	1:17:A:PRO:HG3	3	1.3
(1,672)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD11	6	1.3
(1,672)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD12	6	1.3
(1,672)	1:4:A:ALA:HB1	1:7:A:LEU:HD13	6	1.3
(1,672)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD11	6	1.3
(1,672)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD12	6	1.3
(1,672)	1:4:A:ALA:HB2	1:7:A:LEU:HD13	6	1.3
(1,672)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD11	6	1.3
(1,672)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD12	6	1.3
(1,672)	1:4:A:ALA:HB3	1:7:A:LEU:HD13	6	1.3
(1,597)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HG2	1	1.3
(1,597)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HG2	1	1.3
(1,597)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HG2	1	1.3
(1,597)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HG3	1	1.3
(1,597)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HG3	1	1.3
(1,597)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HG3	1	1.3
(1,516)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:H	2	1.3
(1,503)	1:6:A:ARG:H	1:9:A:ILE:HD11	2	1.3
(1,503)	1:6:A:ARG:H	1:9:A:ILE:HD12	2	1.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,503)	1:6:A:ARG:H	1:9:A:ILE:HD13	2	1.3
(1,503)	1:6:A:ARG:H	1:9:A:ILE:HD11	4	1.3
(1,503)	1:6:A:ARG:H	1:9:A:ILE:HD12	4	1.3
(1,503)	1:6:A:ARG:H	1:9:A:ILE:HD13	4	1.3
(1,411)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB1	9	1.3
(1,411)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB2	9	1.3
(1,411)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB3	9	1.3
(1,411)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB1	10	1.3
(1,411)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB2	10	1.3
(1,411)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB3	10	1.3
(1,378)	1:11:A:TRP:HE1	1:24:A:PRO:HD2	2	1.3
(1,378)	1:11:A:TRP:HE1	1:24:A:PRO:HD2	10	1.3
(1,350)	1:11:A:TRP:HE3	1:17:A:PRO:HG2	3	1.3
(1,350)	1:11:A:TRP:HE3	1:17:A:PRO:HG3	3	1.3
(3,154)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HB2	2	1.29
(3,145)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:H	5	1.29
(3,142)	1:13:A:LYS:HD2	1:14:A:ASP:H	2	1.29
(3,142)	1:13:A:LYS:HD3	1:14:A:ASP:H	2	1.29
(3,140)	1:6:A:ARG:H	1:9:A:ILE:HD11	1	1.29
(3,140)	1:6:A:ARG:H	1:9:A:ILE:HD12	1	1.29
(3,140)	1:6:A:ARG:H	1:9:A:ILE:HD13	1	1.29
(3,140)	1:6:A:ARG:H	1:9:A:ILE:HD11	5	1.29
(3,140)	1:6:A:ARG:H	1:9:A:ILE:HD12	5	1.29
(3,140)	1:6:A:ARG:H	1:9:A:ILE:HD13	5	1.29
(3,140)	1:6:A:ARG:H	1:9:A:ILE:HD11	7	1.29
(3,140)	1:6:A:ARG:H	1:9:A:ILE:HD12	7	1.29
(3,140)	1:6:A:ARG:H	1:9:A:ILE:HD13	7	1.29
(3,96)	1:11:A:TRP:HE1	1:24:A:PRO:HD2	8	1.29
(2,415)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HB2	9	1.29
(2,415)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HB2	9	1.29
(2,415)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HB2	9	1.29
(2,415)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HB2	10	1.29
(2,415)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HB2	10	1.29
(2,415)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HB2	10	1.29
(1,585)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HB2	9	1.29
(1,585)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HB2	9	1.29
(1,585)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HB2	9	1.29
(1,585)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HB2	10	1.29
(1,585)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HB2	10	1.29
(1,585)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HB2	10	1.29
(1,550)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HB2	2	1.29
(1,516)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:H	5	1.29

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,507)	1:13:A:LYS:HD2	1:14:A:ASP:H	2	1.29
(1,507)	1:13:A:LYS:HD3	1:14:A:ASP:H	2	1.29
(1,503)	1:6:A:ARG:H	1:9:A:ILE:HD11	1	1.29
(1,503)	1:6:A:ARG:H	1:9:A:ILE:HD12	1	1.29
(1,503)	1:6:A:ARG:H	1:9:A:ILE:HD13	1	1.29
(1,503)	1:6:A:ARG:H	1:9:A:ILE:HD11	5	1.29
(1,503)	1:6:A:ARG:H	1:9:A:ILE:HD12	5	1.29
(1,503)	1:6:A:ARG:H	1:9:A:ILE:HD13	5	1.29
(1,503)	1:6:A:ARG:H	1:9:A:ILE:HD11	7	1.29
(1,503)	1:6:A:ARG:H	1:9:A:ILE:HD12	7	1.29
(1,503)	1:6:A:ARG:H	1:9:A:ILE:HD13	7	1.29
(1,378)	1:11:A:TRP:HE1	1:24:A:PRO:HD2	8	1.29
(3,159)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG11	7	1.28
(3,159)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG12	7	1.28
(3,159)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG13	7	1.28
(3,143)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HB2	1	1.28
(3,143)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HB3	1	1.28
(3,142)	1:13:A:LYS:HD2	1:14:A:ASP:H	5	1.28
(3,142)	1:13:A:LYS:HD3	1:14:A:ASP:H	5	1.28
(3,108)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB1	8	1.28
(3,108)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB2	8	1.28
(3,108)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB3	8	1.28
(3,84)	1:11:A:TRP:HE3	1:17:A:PRO:HG2	6	1.28
(3,84)	1:11:A:TRP:HE3	1:17:A:PRO:HG3	6	1.28
(2,463)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HD2	8	1.28
(1,663)	1:11:A:TRP:HB2	1:24:A:PRO:HD2	8	1.28
(1,567)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG11	7	1.28
(1,567)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG12	7	1.28
(1,567)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG13	7	1.28
(1,510)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HB2	1	1.28
(1,510)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HB3	1	1.28
(1,507)	1:13:A:LYS:HD2	1:14:A:ASP:H	5	1.28
(1,507)	1:13:A:LYS:HD3	1:14:A:ASP:H	5	1.28
(1,411)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB1	8	1.28
(1,411)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB2	8	1.28
(1,411)	1:2:A:GLU:HA	1:4:A:ALA:HB3	8	1.28
(1,350)	1:11:A:TRP:HE3	1:17:A:PRO:HG2	6	1.28
(1,350)	1:11:A:TRP:HE3	1:17:A:PRO:HG3	6	1.28
(3,205)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HG2	3	1.27
(3,205)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HG2	3	1.27
(3,205)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HG2	3	1.27
(3,140)	1:6:A:ARG:H	1:9:A:ILE:HD11	6	1.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,140)	1:6:A:ARG:H	1:9:A:ILE:HD12	6	1.27
(3,140)	1:6:A:ARG:H	1:9:A:ILE:HD13	6	1.27
(3,140)	1:6:A:ARG:H	1:9:A:ILE:HD11	8	1.27
(3,140)	1:6:A:ARG:H	1:9:A:ILE:HD12	8	1.27
(3,140)	1:6:A:ARG:H	1:9:A:ILE:HD13	8	1.27
(3,120)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:H	7	1.27
(3,114)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	9	1.27
(3,114)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	9	1.27
(3,73)	1:11:A:TRP:HZ3	1:17:A:PRO:HA	3	1.27
(2,415)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HB2	3	1.27
(2,415)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HB2	3	1.27
(2,415)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HB2	3	1.27
(2,415)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HB2	4	1.27
(2,415)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HB2	4	1.27
(2,415)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HB2	4	1.27
(2,415)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HB2	6	1.27
(2,415)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HB2	6	1.27
(2,415)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HB2	6	1.27
(2,322)	1:21:A:ARG:HB3	1:22:A:PRO:HD2	9	1.27
(1,675)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HG2	3	1.27
(1,675)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HG2	3	1.27
(1,675)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HG2	3	1.27
(1,585)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HB2	3	1.27
(1,585)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HB2	3	1.27
(1,585)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HB2	3	1.27
(1,585)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HB2	4	1.27
(1,585)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HB2	4	1.27
(1,585)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HB2	4	1.27
(1,585)	1:5:A:VAL:HG21	1:8:A:TYR:HB2	6	1.27
(1,585)	1:5:A:VAL:HG22	1:8:A:TYR:HB2	6	1.27
(1,585)	1:5:A:VAL:HG23	1:8:A:TYR:HB2	6	1.27
(1,503)	1:6:A:ARG:H	1:9:A:ILE:HD11	6	1.27
(1,503)	1:6:A:ARG:H	1:9:A:ILE:HD12	6	1.27
(1,503)	1:6:A:ARG:H	1:9:A:ILE:HD13	6	1.27
(1,503)	1:6:A:ARG:H	1:9:A:ILE:HD11	8	1.27
(1,503)	1:6:A:ARG:H	1:9:A:ILE:HD12	8	1.27
(1,503)	1:6:A:ARG:H	1:9:A:ILE:HD13	8	1.27
(1,449)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:H	7	1.27
(1,440)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	9	1.27
(1,440)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	9	1.27
(1,434)	1:21:A:ARG:HB3	1:22:A:PRO:HD2	9	1.27
(1,326)	1:11:A:TRP:HZ3	1:17:A:PRO:HA	3	1.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,142)	1:13:A:LYS:HD2	1:14:A:ASP:H	1	1.26
(3,142)	1:13:A:LYS:HD3	1:14:A:ASP:H	1	1.26
(3,140)	1:6:A:ARG:H	1:9:A:ILE:HD11	3	1.26
(3,140)	1:6:A:ARG:H	1:9:A:ILE:HD12	3	1.26
(3,140)	1:6:A:ARG:H	1:9:A:ILE:HD13	3	1.26
(3,121)	1:16:A:GLY:H	1:18:A:SER:HB2	9	1.26
(3,121)	1:16:A:GLY:H	1:18:A:SER:HB3	9	1.26
(3,114)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	8	1.26
(3,114)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	8	1.26
(3,73)	1:11:A:TRP:HZ3	1:17:A:PRO:HA	8	1.26
(2,469)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD11	6	1.26
(2,469)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD12	6	1.26
(2,469)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD13	6	1.26
(1,670)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD11	6	1.26
(1,670)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD12	6	1.26
(1,670)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD13	6	1.26
(1,507)	1:13:A:LYS:HD2	1:14:A:ASP:H	1	1.26
(1,507)	1:13:A:LYS:HD3	1:14:A:ASP:H	1	1.26
(1,503)	1:6:A:ARG:H	1:9:A:ILE:HD11	3	1.26
(1,503)	1:6:A:ARG:H	1:9:A:ILE:HD12	3	1.26
(1,503)	1:6:A:ARG:H	1:9:A:ILE:HD13	3	1.26
(1,450)	1:16:A:GLY:H	1:18:A:SER:HB2	9	1.26
(1,450)	1:16:A:GLY:H	1:18:A:SER:HB3	9	1.26
(1,440)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	8	1.26
(1,440)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	8	1.26
(1,326)	1:11:A:TRP:HZ3	1:17:A:PRO:HA	8	1.26
(3,205)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HG2	9	1.25
(3,205)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HG2	9	1.25
(3,205)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HG2	9	1.25
(3,178)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HG2	3	1.25
(3,178)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HG2	3	1.25
(3,178)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HG2	3	1.25
(3,178)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HG3	3	1.25
(3,178)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HG3	3	1.25
(3,178)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HG3	3	1.25
(3,178)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HG2	7	1.25
(3,178)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HG2	7	1.25
(3,178)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HG2	7	1.25
(3,178)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HG3	7	1.25
(3,178)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HG3	7	1.25
(3,178)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HG3	7	1.25
(3,178)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HG2	10	1.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,178)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HG2	10	1.25
(3,178)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HG2	10	1.25
(3,178)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HG3	10	1.25
(3,178)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HG3	10	1.25
(3,178)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HG3	10	1.25
(3,145)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:H	4	1.25
(3,114)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	7	1.25
(3,114)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	7	1.25
(3,73)	1:11:A:TRP:HZ3	1:17:A:PRO:HA	9	1.25
(3,71)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB2	6	1.25
(3,71)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB3	6	1.25
(1,675)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HG2	9	1.25
(1,675)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HG2	9	1.25
(1,675)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HG2	9	1.25
(1,597)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HG2	3	1.25
(1,597)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HG2	3	1.25
(1,597)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HG2	3	1.25
(1,597)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HG3	3	1.25
(1,597)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HG3	3	1.25
(1,597)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HG3	3	1.25
(1,597)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HG2	7	1.25
(1,597)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HG2	7	1.25
(1,597)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HG2	7	1.25
(1,597)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HG3	7	1.25
(1,597)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HG3	7	1.25
(1,597)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HG3	7	1.25
(1,597)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HG2	10	1.25
(1,597)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HG2	10	1.25
(1,597)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HG2	10	1.25
(1,597)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HG3	10	1.25
(1,597)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HG3	10	1.25
(1,597)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HG3	10	1.25
(1,516)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:H	4	1.25
(1,440)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	7	1.25
(1,440)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	7	1.25
(1,326)	1:11:A:TRP:HZ3	1:17:A:PRO:HA	9	1.25
(1,319)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB2	6	1.25
(1,319)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB3	6	1.25
(3,205)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HG2	1	1.24
(3,205)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HG2	1	1.24
(3,205)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HG2	1	1.24
(3,205)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HG2	6	1.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,205)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HG2	6	1.24
(3,205)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HG2	6	1.24
(3,205)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HG2	8	1.24
(3,205)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HG2	8	1.24
(3,205)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HG2	8	1.24
(3,159)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG11	1	1.24
(3,159)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG12	1	1.24
(3,159)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG13	1	1.24
(3,159)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG11	10	1.24
(3,159)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG12	10	1.24
(3,159)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG13	10	1.24
(3,143)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HB2	9	1.24
(3,143)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HB3	9	1.24
(3,96)	1:11:A:TRP:HE1	1:24:A:PRO:HD2	4	1.24
(3,73)	1:11:A:TRP:HZ3	1:17:A:PRO:HA	6	1.24
(2,469)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD11	1	1.24
(2,469)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD12	1	1.24
(2,469)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD13	1	1.24
(2,469)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD11	3	1.24
(2,469)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD12	3	1.24
(2,469)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD13	3	1.24
(2,469)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD11	4	1.24
(2,469)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD12	4	1.24
(2,469)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD13	4	1.24
(2,469)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD11	5	1.24
(2,469)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD12	5	1.24
(2,469)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD13	5	1.24
(2,233)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HD3	8	1.24
(2,233)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HD3	8	1.24
(1,675)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HG2	1	1.24
(1,675)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HG2	1	1.24
(1,675)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HG2	1	1.24
(1,675)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HG2	6	1.24
(1,675)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HG2	6	1.24
(1,675)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HG2	6	1.24
(1,675)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HG2	8	1.24
(1,675)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HG2	8	1.24
(1,675)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HG2	8	1.24
(1,670)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD11	1	1.24
(1,670)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD12	1	1.24
(1,670)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD13	1	1.24
(1,670)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD11	3	1.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,670)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD12	3	1.24
(1,670)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD13	3	1.24
(1,670)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD11	4	1.24
(1,670)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD12	4	1.24
(1,670)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD13	4	1.24
(1,670)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD11	5	1.24
(1,670)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD12	5	1.24
(1,670)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD13	5	1.24
(1,567)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG11	1	1.24
(1,567)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG12	1	1.24
(1,567)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG13	1	1.24
(1,567)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG11	10	1.24
(1,567)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG12	10	1.24
(1,567)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG13	10	1.24
(1,510)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HB2	9	1.24
(1,510)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HB3	9	1.24
(1,378)	1:11:A:TRP:HE1	1:24:A:PRO:HD2	4	1.24
(1,326)	1:11:A:TRP:HZ3	1:17:A:PRO:HA	6	1.24
(1,294)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HD3	8	1.24
(1,294)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HD3	8	1.24
(3,205)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HG2	4	1.23
(3,205)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HG2	4	1.23
(3,205)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HG2	4	1.23
(3,178)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HG2	8	1.23
(3,178)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HG2	8	1.23
(3,178)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HG2	8	1.23
(3,178)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HG3	8	1.23
(3,178)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HG3	8	1.23
(3,178)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HG3	8	1.23
(3,162)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HA	9	1.23
(3,162)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HA	9	1.23
(3,162)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HA	9	1.23
(3,159)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG11	2	1.23
(3,159)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG12	2	1.23
(3,159)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG13	2	1.23
(3,159)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG11	4	1.23
(3,159)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG12	4	1.23
(3,159)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG13	4	1.23
(3,143)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HB2	5	1.23
(3,143)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HB3	5	1.23
(3,143)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HB2	10	1.23
(3,143)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HB3	10	1.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,96)	1:11:A:TRP:HE1	1:24:A:PRO:HD2	3	1.23
(3,95)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB2	10	1.23
(3,95)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB3	10	1.23
(3,84)	1:11:A:TRP:HE3	1:17:A:PRO:HG2	8	1.23
(3,84)	1:11:A:TRP:HE3	1:17:A:PRO:HG3	8	1.23
(3,73)	1:11:A:TRP:HZ3	1:17:A:PRO:HA	2	1.23
(3,73)	1:11:A:TRP:HZ3	1:17:A:PRO:HA	7	1.23
(3,71)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB2	3	1.23
(3,71)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB3	3	1.23
(2,469)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD11	2	1.23
(2,469)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD12	2	1.23
(2,469)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD13	2	1.23
(2,322)	1:21:A:ARG:HB3	1:22:A:PRO:HD2	7	1.23
(2,301)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HB2	8	1.23
(2,262)	1:11:A:TRP:HZ3	1:16:A:GLY:HA2	8	1.23
(2,261)	1:11:A:TRP:HH2	1:16:A:GLY:HA2	8	1.23
(2,99)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HG	9	1.23
(1,675)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HG2	4	1.23
(1,675)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HG2	4	1.23
(1,675)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HG2	4	1.23
(1,670)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD11	2	1.23
(1,670)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD12	2	1.23
(1,670)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD13	2	1.23
(1,597)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HG2	8	1.23
(1,597)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HG2	8	1.23
(1,597)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HG2	8	1.23
(1,597)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HG3	8	1.23
(1,597)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HG3	8	1.23
(1,597)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HG3	8	1.23
(1,573)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HA	9	1.23
(1,573)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HA	9	1.23
(1,573)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HA	9	1.23
(1,567)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG11	2	1.23
(1,567)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG12	2	1.23
(1,567)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG13	2	1.23
(1,567)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG11	4	1.23
(1,567)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG12	4	1.23
(1,567)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG13	4	1.23
(1,510)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HB2	5	1.23
(1,510)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HB3	5	1.23
(1,510)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HB2	10	1.23
(1,510)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HB3	10	1.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,434)	1:21:A:ARG:HB3	1:22:A:PRO:HD2	7	1.23
(1,404)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HB2	8	1.23
(1,378)	1:11:A:TRP:HE1	1:24:A:PRO:HD2	3	1.23
(1,376)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB2	10	1.23
(1,376)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB3	10	1.23
(1,350)	1:11:A:TRP:HE3	1:17:A:PRO:HG2	8	1.23
(1,350)	1:11:A:TRP:HE3	1:17:A:PRO:HG3	8	1.23
(1,344)	1:11:A:TRP:HZ3	1:16:A:GLY:HA2	8	1.23
(1,342)	1:11:A:TRP:HH2	1:16:A:GLY:HA2	8	1.23
(1,326)	1:11:A:TRP:HZ3	1:17:A:PRO:HA	2	1.23
(1,326)	1:11:A:TRP:HZ3	1:17:A:PRO:HA	7	1.23
(1,319)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB2	3	1.23
(1,319)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB3	3	1.23
(1,121)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HG	9	1.23
(3,205)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HG2	2	1.22
(3,205)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HG2	2	1.22
(3,205)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HG2	2	1.22
(3,205)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HG2	7	1.22
(3,205)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HG2	7	1.22
(3,205)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HG2	7	1.22
(3,162)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HA	7	1.22
(3,162)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HA	7	1.22
(3,162)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HA	7	1.22
(3,152)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD3	4	1.22
(3,152)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD3	4	1.22
(3,140)	1:6:A:ARG:H	1:9:A:ILE:HD11	9	1.22
(3,140)	1:6:A:ARG:H	1:9:A:ILE:HD12	9	1.22
(3,140)	1:6:A:ARG:H	1:9:A:ILE:HD13	9	1.22
(3,98)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HE1	6	1.22
(3,95)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB2	4	1.22
(3,95)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB3	4	1.22
(3,73)	1:11:A:TRP:HZ3	1:17:A:PRO:HA	4	1.22
(2,447)	1:16:A:GLY:H	1:19:A:SER:HB3	9	1.22
(2,301)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HB2	7	1.22
(2,233)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HD3	4	1.22
(2,233)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HD3	4	1.22
(1,675)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HG2	2	1.22
(1,675)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HG2	2	1.22
(1,675)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HG2	2	1.22
(1,675)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HG2	7	1.22
(1,675)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HG2	7	1.22
(1,675)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HG2	7	1.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,642)	1:16:A:GLY:H	1:19:A:SER:HB3	9	1.22
(1,573)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HA	7	1.22
(1,573)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HA	7	1.22
(1,573)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HA	7	1.22
(1,543)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD3	4	1.22
(1,543)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD3	4	1.22
(1,503)	1:6:A:ARG:H	1:9:A:ILE:HD11	9	1.22
(1,503)	1:6:A:ARG:H	1:9:A:ILE:HD12	9	1.22
(1,503)	1:6:A:ARG:H	1:9:A:ILE:HD13	9	1.22
(1,404)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HB2	7	1.22
(1,382)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HE1	6	1.22
(1,376)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB2	4	1.22
(1,376)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB3	4	1.22
(1,326)	1:11:A:TRP:HZ3	1:17:A:PRO:HA	4	1.22
(1,294)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HD3	4	1.22
(1,294)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HD3	4	1.22
(3,205)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HG2	5	1.21
(3,205)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HG2	5	1.21
(3,205)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HG2	5	1.21
(3,159)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG11	6	1.21
(3,159)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG12	6	1.21
(3,159)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG13	6	1.21
(3,159)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG11	8	1.21
(3,159)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG12	8	1.21
(3,159)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG13	8	1.21
(3,159)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG11	9	1.21
(3,159)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG12	9	1.21
(3,159)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG13	9	1.21
(3,140)	1:6:A:ARG:H	1:9:A:ILE:HD11	10	1.21
(3,140)	1:6:A:ARG:H	1:9:A:ILE:HD12	10	1.21
(3,140)	1:6:A:ARG:H	1:9:A:ILE:HD13	10	1.21
(3,98)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HE1	5	1.21
(3,95)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB2	1	1.21
(3,95)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB3	1	1.21
(3,95)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB2	2	1.21
(3,95)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB3	2	1.21
(3,73)	1:11:A:TRP:HZ3	1:17:A:PRO:HA	1	1.21
(2,301)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HB2	9	1.21
(2,99)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HG	7	1.21
(1,675)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HG2	5	1.21
(1,675)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HG2	5	1.21
(1,675)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HG2	5	1.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,567)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG11	6	1.21
(1,567)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG12	6	1.21
(1,567)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG13	6	1.21
(1,567)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG11	8	1.21
(1,567)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG12	8	1.21
(1,567)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG13	8	1.21
(1,567)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG11	9	1.21
(1,567)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG12	9	1.21
(1,567)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG13	9	1.21
(1,503)	1:6:A:ARG:H	1:9:A:ILE:HD11	10	1.21
(1,503)	1:6:A:ARG:H	1:9:A:ILE:HD12	10	1.21
(1,503)	1:6:A:ARG:H	1:9:A:ILE:HD13	10	1.21
(1,404)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HB2	9	1.21
(1,382)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HE1	5	1.21
(1,376)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB2	1	1.21
(1,376)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB3	1	1.21
(1,376)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB2	2	1.21
(1,376)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB3	2	1.21
(1,326)	1:11:A:TRP:HZ3	1:17:A:PRO:HA	1	1.21
(1,121)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HG	7	1.21
(3,145)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:H	6	1.2
(3,98)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HE1	4	1.2
(3,96)	1:11:A:TRP:HE1	1:24:A:PRO:HD2	1	1.2
(3,95)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB2	3	1.2
(3,95)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB3	3	1.2
(2,398)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HG3	7	1.2
(2,99)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HG	8	1.2
(1,552)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HG3	7	1.2
(1,516)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:H	6	1.2
(1,382)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HE1	4	1.2
(1,378)	1:11:A:TRP:HE1	1:24:A:PRO:HD2	1	1.2
(1,376)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB2	3	1.2
(1,376)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB3	3	1.2
(1,121)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HG	8	1.2
(3,205)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HG2	10	1.19
(3,205)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HG2	10	1.19
(3,205)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HG2	10	1.19
(3,154)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HB2	3	1.19
(3,119)	1:14:A:ASP:HA	1:16:A:GLY:H	1	1.19
(3,73)	1:11:A:TRP:HZ3	1:17:A:PRO:HA	10	1.19
(2,233)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HD3	10	1.19
(2,233)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HD3	10	1.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,675)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HG2	10	1.19
(1,675)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HG2	10	1.19
(1,675)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HG2	10	1.19
(1,550)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HB2	3	1.19
(1,448)	1:14:A:ASP:HA	1:16:A:GLY:H	1	1.19
(1,326)	1:11:A:TRP:HZ3	1:17:A:PRO:HA	10	1.19
(1,294)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HD3	10	1.19
(1,294)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HD3	10	1.19
(3,188)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:HA3	5	1.18
(3,188)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:HA3	5	1.18
(3,188)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:HA3	5	1.18
(3,158)	1:9:A:ILE:HB	1:13:A:LYS:HG3	8	1.18
(3,154)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HB2	1	1.18
(3,154)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HB2	4	1.18
(3,154)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HB2	10	1.18
(3,119)	1:14:A:ASP:HA	1:16:A:GLY:H	2	1.18
(3,98)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HE1	3	1.18
(2,447)	1:16:A:GLY:H	1:19:A:SER:HB3	7	1.18
(1,642)	1:16:A:GLY:H	1:19:A:SER:HB3	7	1.18
(1,621)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:HA3	5	1.18
(1,621)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:HA3	5	1.18
(1,621)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:HA3	5	1.18
(1,564)	1:9:A:ILE:HB	1:13:A:LYS:HG3	8	1.18
(1,550)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HB2	1	1.18
(1,550)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HB2	4	1.18
(1,550)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HB2	10	1.18
(1,448)	1:14:A:ASP:HA	1:16:A:GLY:H	2	1.18
(1,382)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HE1	3	1.18
(3,207)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD21	8	1.17
(3,207)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD22	8	1.17
(3,207)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD23	8	1.17
(3,159)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG11	5	1.17
(3,159)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG12	5	1.17
(3,159)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG13	5	1.17
(3,158)	1:9:A:ILE:HB	1:13:A:LYS:HG3	3	1.17
(3,158)	1:9:A:ILE:HB	1:13:A:LYS:HG3	9	1.17
(3,98)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HE1	1	1.17
(3,98)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HE1	2	1.17
(3,95)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB2	9	1.17
(3,95)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB3	9	1.17
(3,61)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	7	1.17
(3,61)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	10	1.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,398)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HG3	9	1.17
(1,679)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD21	8	1.17
(1,679)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD22	8	1.17
(1,679)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD23	8	1.17
(1,567)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG11	5	1.17
(1,567)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG12	5	1.17
(1,567)	1:2:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG13	5	1.17
(1,564)	1:9:A:ILE:HB	1:13:A:LYS:HG3	3	1.17
(1,564)	1:9:A:ILE:HB	1:13:A:LYS:HG3	9	1.17
(1,552)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HG3	9	1.17
(1,382)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HE1	1	1.17
(1,382)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HE1	2	1.17
(1,376)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB2	9	1.17
(1,376)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB3	9	1.17
(1,292)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	7	1.17
(1,292)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	10	1.17
(3,138)	1:12:A:LEU:HD21	1:14:A:ASP:H	2	1.16
(3,138)	1:12:A:LEU:HD22	1:14:A:ASP:H	2	1.16
(3,138)	1:12:A:LEU:HD23	1:14:A:ASP:H	2	1.16
(3,91)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD11	10	1.16
(3,91)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD12	10	1.16
(3,91)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD13	10	1.16
(3,61)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	2	1.16
(3,61)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	3	1.16
(3,61)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	4	1.16
(3,61)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	9	1.16
(2,245)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD11	8	1.16
(2,245)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD12	8	1.16
(2,245)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD13	8	1.16
(2,245)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD11	8	1.16
(2,245)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD12	8	1.16
(2,245)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD13	8	1.16
(2,99)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HG	10	1.16
(1,498)	1:12:A:LEU:HD21	1:14:A:ASP:H	2	1.16
(1,498)	1:12:A:LEU:HD22	1:14:A:ASP:H	2	1.16
(1,498)	1:12:A:LEU:HD23	1:14:A:ASP:H	2	1.16
(1,365)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD11	10	1.16
(1,365)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD12	10	1.16
(1,365)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD13	10	1.16
(1,314)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD11	8	1.16
(1,314)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD12	8	1.16
(1,314)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD13	8	1.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,314)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD11	8	1.16
(1,314)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD12	8	1.16
(1,314)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD13	8	1.16
(1,292)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	2	1.16
(1,292)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	3	1.16
(1,292)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	4	1.16
(1,292)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	9	1.16
(1,121)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HG	10	1.16
(3,200)	1:16:A:GLY:HA2	1:19:A:SER:HB3	6	1.15
(3,186)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	10	1.15
(3,186)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	10	1.15
(3,186)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	10	1.15
(3,186)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	10	1.15
(3,186)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	10	1.15
(3,186)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	10	1.15
(3,186)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	10	1.15
(3,186)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	10	1.15
(3,186)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	10	1.15
(3,180)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG3	10	1.15
(3,180)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG3	10	1.15
(3,180)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG3	10	1.15
(3,158)	1:9:A:ILE:HB	1:13:A:LYS:HG3	1	1.15
(3,138)	1:12:A:LEU:HD21	1:14:A:ASP:H	1	1.15
(3,138)	1:12:A:LEU:HD22	1:14:A:ASP:H	1	1.15
(3,138)	1:12:A:LEU:HD23	1:14:A:ASP:H	1	1.15
(3,98)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HE1	10	1.15
(3,61)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	1	1.15
(3,61)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	6	1.15
(3,61)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	8	1.15
(1,662)	1:16:A:GLY:HA2	1:19:A:SER:HB3	6	1.15
(1,617)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	10	1.15
(1,617)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	10	1.15
(1,617)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	10	1.15
(1,617)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	10	1.15
(1,617)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	10	1.15
(1,617)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	10	1.15
(1,617)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	10	1.15
(1,617)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	10	1.15
(1,617)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	10	1.15
(1,602)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG3	10	1.15
(1,602)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG3	10	1.15
(1,602)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG3	10	1.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,564)	1:9:A:ILE:HB	1:13:A:LYS:HG3	1	1.15
(1,498)	1:12:A:LEU:HD21	1:14:A:ASP:H	1	1.15
(1,498)	1:12:A:LEU:HD22	1:14:A:ASP:H	1	1.15
(1,498)	1:12:A:LEU:HD23	1:14:A:ASP:H	1	1.15
(1,382)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HE1	10	1.15
(1,292)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	1	1.15
(1,292)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	6	1.15
(1,292)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	8	1.15
(3,207)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD21	10	1.14
(3,207)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD22	10	1.14
(3,207)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD23	10	1.14
(3,186)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	8	1.14
(3,186)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	8	1.14
(3,186)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	8	1.14
(3,186)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	8	1.14
(3,186)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	8	1.14
(3,186)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	8	1.14
(3,186)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	8	1.14
(3,186)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	8	1.14
(3,186)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	8	1.14
(3,158)	1:9:A:ILE:HB	1:13:A:LYS:HG3	7	1.14
(3,158)	1:9:A:ILE:HB	1:13:A:LYS:HG3	10	1.14
(3,96)	1:11:A:TRP:HE1	1:24:A:PRO:HD2	6	1.14
(3,95)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB2	7	1.14
(3,95)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB3	7	1.14
(3,61)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	5	1.14
(1,679)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD21	10	1.14
(1,679)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD22	10	1.14
(1,679)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD23	10	1.14
(1,617)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	8	1.14
(1,617)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	8	1.14
(1,617)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	8	1.14
(1,617)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	8	1.14
(1,617)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	8	1.14
(1,617)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	8	1.14
(1,617)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	8	1.14
(1,617)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	8	1.14
(1,617)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	8	1.14
(1,564)	1:9:A:ILE:HB	1:13:A:LYS:HG3	7	1.14
(1,564)	1:9:A:ILE:HB	1:13:A:LYS:HG3	10	1.14
(1,378)	1:11:A:TRP:HE1	1:24:A:PRO:HD2	6	1.14
(1,376)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB2	7	1.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,376)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB3	7	1.14
(1,292)	1:11:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:HD1	5	1.14
(3,207)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD21	9	1.13
(3,207)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD22	9	1.13
(3,207)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD23	9	1.13
(3,186)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	3	1.13
(3,186)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	3	1.13
(3,186)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	3	1.13
(3,186)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	3	1.13
(3,186)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	3	1.13
(3,186)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	3	1.13
(3,186)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	3	1.13
(3,186)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	3	1.13
(3,186)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	3	1.13
(3,151)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HG3	7	1.13
(3,151)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HG3	9	1.13
(3,136)	1:8:A:TYR:H	1:12:A:LEU:HD11	5	1.13
(3,136)	1:8:A:TYR:H	1:12:A:LEU:HD12	5	1.13
(3,136)	1:8:A:TYR:H	1:12:A:LEU:HD13	5	1.13
(3,119)	1:14:A:ASP:HA	1:16:A:GLY:H	10	1.13
(3,91)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD11	8	1.13
(3,91)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD12	8	1.13
(3,91)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD13	8	1.13
(3,14)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	5	1.13
(3,14)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	5	1.13
(2,473)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:HB2	8	1.13
(2,473)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:HB2	8	1.13
(1,682)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:HB2	8	1.13
(1,682)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:HB2	8	1.13
(1,679)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD21	9	1.13
(1,679)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD22	9	1.13
(1,679)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD23	9	1.13
(1,617)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	3	1.13
(1,617)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	3	1.13
(1,617)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	3	1.13
(1,617)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	3	1.13
(1,617)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	3	1.13
(1,617)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	3	1.13
(1,617)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	3	1.13
(1,617)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	3	1.13
(1,617)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	3	1.13
(1,541)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HG3	7	1.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,541)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HG3	9	1.13
(1,495)	1:8:A:TYR:H	1:12:A:LEU:HD11	5	1.13
(1,495)	1:8:A:TYR:H	1:12:A:LEU:HD12	5	1.13
(1,495)	1:8:A:TYR:H	1:12:A:LEU:HD13	5	1.13
(1,448)	1:14:A:ASP:HA	1:16:A:GLY:H	10	1.13
(1,365)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD11	8	1.13
(1,365)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD12	8	1.13
(1,365)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD13	8	1.13
(1,67)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	5	1.13
(1,67)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	5	1.13
(3,158)	1:9:A:ILE:HB	1:13:A:LYS:HG3	2	1.12
(3,158)	1:9:A:ILE:HB	1:13:A:LYS:HG3	5	1.12
(3,152)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD3	9	1.12
(3,152)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD3	9	1.12
(3,136)	1:8:A:TYR:H	1:12:A:LEU:HD11	3	1.12
(3,136)	1:8:A:TYR:H	1:12:A:LEU:HD12	3	1.12
(3,136)	1:8:A:TYR:H	1:12:A:LEU:HD13	3	1.12
(3,136)	1:8:A:TYR:H	1:12:A:LEU:HD11	6	1.12
(3,136)	1:8:A:TYR:H	1:12:A:LEU:HD12	6	1.12
(3,136)	1:8:A:TYR:H	1:12:A:LEU:HD13	6	1.12
(3,121)	1:16:A:GLY:H	1:18:A:SER:HB2	8	1.12
(3,121)	1:16:A:GLY:H	1:18:A:SER:HB3	8	1.12
(3,98)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HE1	8	1.12
(3,14)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	2	1.12
(3,14)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	2	1.12
(2,261)	1:11:A:TRP:HH2	1:16:A:GLY:HA2	3	1.12
(2,113)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HB3	5	1.12
(1,564)	1:9:A:ILE:HB	1:13:A:LYS:HG3	2	1.12
(1,564)	1:9:A:ILE:HB	1:13:A:LYS:HG3	5	1.12
(1,543)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD3	9	1.12
(1,543)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD3	9	1.12
(1,495)	1:8:A:TYR:H	1:12:A:LEU:HD11	3	1.12
(1,495)	1:8:A:TYR:H	1:12:A:LEU:HD12	3	1.12
(1,495)	1:8:A:TYR:H	1:12:A:LEU:HD13	3	1.12
(1,495)	1:8:A:TYR:H	1:12:A:LEU:HD11	6	1.12
(1,495)	1:8:A:TYR:H	1:12:A:LEU:HD12	6	1.12
(1,495)	1:8:A:TYR:H	1:12:A:LEU:HD13	6	1.12
(1,450)	1:16:A:GLY:H	1:18:A:SER:HB2	8	1.12
(1,450)	1:16:A:GLY:H	1:18:A:SER:HB3	8	1.12
(1,382)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HE1	8	1.12
(1,342)	1:11:A:TRP:HH2	1:16:A:GLY:HA2	3	1.12
(1,142)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HB3	5	1.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,67)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	2	1.12
(1,67)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	2	1.12
(3,136)	1:8:A:TYR:H	1:12:A:LEU:HD11	1	1.11
(3,136)	1:8:A:TYR:H	1:12:A:LEU:HD12	1	1.11
(3,136)	1:8:A:TYR:H	1:12:A:LEU:HD13	1	1.11
(3,136)	1:8:A:TYR:H	1:12:A:LEU:HD11	4	1.11
(3,136)	1:8:A:TYR:H	1:12:A:LEU:HD12	4	1.11
(3,136)	1:8:A:TYR:H	1:12:A:LEU:HD13	4	1.11
(3,114)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	10	1.11
(3,114)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	10	1.11
(3,14)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	1	1.11
(3,14)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	1	1.11
(3,14)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	3	1.11
(3,14)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	3	1.11
(3,14)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	6	1.11
(3,14)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	6	1.11
(3,14)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	7	1.11
(3,14)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	7	1.11
(3,14)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	9	1.11
(3,14)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	9	1.11
(3,13)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	10	1.11
(3,13)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	10	1.11
(2,473)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:HB2	10	1.11
(2,473)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:HB2	10	1.11
(2,261)	1:11:A:TRP:HH2	1:16:A:GLY:HA2	6	1.11
(2,113)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HB3	1	1.11
(2,113)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HB3	10	1.11
(1,682)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:HB2	10	1.11
(1,682)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:HB2	10	1.11
(1,495)	1:8:A:TYR:H	1:12:A:LEU:HD11	1	1.11
(1,495)	1:8:A:TYR:H	1:12:A:LEU:HD12	1	1.11
(1,495)	1:8:A:TYR:H	1:12:A:LEU:HD13	1	1.11
(1,495)	1:8:A:TYR:H	1:12:A:LEU:HD11	4	1.11
(1,495)	1:8:A:TYR:H	1:12:A:LEU:HD12	4	1.11
(1,495)	1:8:A:TYR:H	1:12:A:LEU:HD13	4	1.11
(1,440)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	10	1.11
(1,440)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	10	1.11
(1,342)	1:11:A:TRP:HH2	1:16:A:GLY:HA2	6	1.11
(1,142)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HB3	1	1.11
(1,142)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HB3	10	1.11
(1,67)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	1	1.11
(1,67)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	1	1.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,67)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	3	1.11
(1,67)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	3	1.11
(1,67)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	6	1.11
(1,67)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	6	1.11
(1,67)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	7	1.11
(1,67)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	7	1.11
(1,67)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	9	1.11
(1,67)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	9	1.11
(1,66)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	10	1.11
(1,66)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	10	1.11
(3,152)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD3	2	1.1
(3,152)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD3	2	1.1
(3,152)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD3	5	1.1
(3,152)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD3	5	1.1
(3,138)	1:12:A:LEU:HD21	1:14:A:ASP:H	5	1.1
(3,138)	1:12:A:LEU:HD22	1:14:A:ASP:H	5	1.1
(3,138)	1:12:A:LEU:HD23	1:14:A:ASP:H	5	1.1
(3,95)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB2	6	1.1
(3,95)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB3	6	1.1
(3,93)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD21	6	1.1
(3,93)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD22	6	1.1
(3,93)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD23	6	1.1
(3,53)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE1	8	1.1
(3,53)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE2	8	1.1
(3,53)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE1	10	1.1
(3,53)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE2	10	1.1
(3,13)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	4	1.1
(3,13)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	4	1.1
(3,13)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	8	1.1
(3,13)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	8	1.1
(2,113)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HB3	2	1.1
(2,113)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HB3	7	1.1
(2,113)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HB3	9	1.1
(1,543)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD3	2	1.1
(1,543)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD3	2	1.1
(1,543)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD3	5	1.1
(1,543)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD3	5	1.1
(1,498)	1:12:A:LEU:HD21	1:14:A:ASP:H	5	1.1
(1,498)	1:12:A:LEU:HD22	1:14:A:ASP:H	5	1.1
(1,498)	1:12:A:LEU:HD23	1:14:A:ASP:H	5	1.1
(1,376)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB2	6	1.1
(1,376)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB3	6	1.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,367)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD21	6	1.1
(1,367)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD22	6	1.1
(1,367)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD23	6	1.1
(1,274)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE1	8	1.1
(1,274)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE2	8	1.1
(1,274)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE1	10	1.1
(1,274)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE2	10	1.1
(1,142)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HB3	2	1.1
(1,142)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HB3	7	1.1
(1,142)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HB3	9	1.1
(1,66)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	4	1.1
(1,66)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	4	1.1
(1,66)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	8	1.1
(1,66)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	8	1.1
(3,186)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	4	1.09
(3,186)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	4	1.09
(3,186)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	4	1.09
(3,186)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	4	1.09
(3,186)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	4	1.09
(3,186)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	4	1.09
(3,186)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	4	1.09
(3,186)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	4	1.09
(3,186)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	4	1.09
(3,186)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	6	1.09
(3,186)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	6	1.09
(3,186)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	6	1.09
(3,186)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	6	1.09
(3,186)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	6	1.09
(3,186)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	6	1.09
(3,186)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	6	1.09
(3,186)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	6	1.09
(3,186)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	6	1.09
(3,136)	1:8:A:TYR:H	1:12:A:LEU:HD11	2	1.09
(3,136)	1:8:A:TYR:H	1:12:A:LEU:HD12	2	1.09
(3,136)	1:8:A:TYR:H	1:12:A:LEU:HD13	2	1.09
(3,114)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	3	1.09
(3,114)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	3	1.09
(3,13)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	9	1.09
(3,13)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	9	1.09
(1,617)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	4	1.09
(1,617)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	4	1.09
(1,617)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	4	1.09

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,617)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	4	1.09
(1,617)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	4	1.09
(1,617)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	4	1.09
(1,617)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	4	1.09
(1,617)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	4	1.09
(1,617)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	4	1.09
(1,617)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	6	1.09
(1,617)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	6	1.09
(1,617)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	6	1.09
(1,617)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	6	1.09
(1,617)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	6	1.09
(1,617)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	6	1.09
(1,617)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	6	1.09
(1,617)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	6	1.09
(1,617)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	6	1.09
(1,495)	1:8:A:TYR:H	1:12:A:LEU:HD11	2	1.09
(1,495)	1:8:A:TYR:H	1:12:A:LEU:HD12	2	1.09
(1,495)	1:8:A:TYR:H	1:12:A:LEU:HD13	2	1.09
(1,440)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	3	1.09
(1,440)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	3	1.09
(1,66)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	9	1.09
(1,66)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	9	1.09
(3,207)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD21	6	1.08
(3,207)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD22	6	1.08
(3,207)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD23	6	1.08
(3,188)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:HA3	1	1.08
(3,188)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:HA3	1	1.08
(3,188)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:HA3	1	1.08
(3,152)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD3	1	1.08
(3,152)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD3	1	1.08
(3,152)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD3	6	1.08
(3,152)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD3	6	1.08
(3,138)	1:12:A:LEU:HD21	1:14:A:ASP:H	4	1.08
(3,138)	1:12:A:LEU:HD22	1:14:A:ASP:H	4	1.08
(3,138)	1:12:A:LEU:HD23	1:14:A:ASP:H	4	1.08
(3,114)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	4	1.08
(3,114)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	4	1.08
(3,103)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG2	4	1.08
(3,103)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG3	4	1.08
(3,96)	1:11:A:TRP:HE1	1:24:A:PRO:HD2	5	1.08
(3,71)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB2	2	1.08
(3,71)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB3	2	1.08

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,13)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	7	1.08
(3,13)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	7	1.08
(2,391)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HB2	7	1.08
(2,328)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	6	1.08
(1,679)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD21	6	1.08
(1,679)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD22	6	1.08
(1,679)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD23	6	1.08
(1,621)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:HA3	1	1.08
(1,621)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:HA3	1	1.08
(1,621)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:HA3	1	1.08
(1,543)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD3	1	1.08
(1,543)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD3	1	1.08
(1,543)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD3	6	1.08
(1,543)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD3	6	1.08
(1,542)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HB2	7	1.08
(1,498)	1:12:A:LEU:HD21	1:14:A:ASP:H	4	1.08
(1,498)	1:12:A:LEU:HD22	1:14:A:ASP:H	4	1.08
(1,498)	1:12:A:LEU:HD23	1:14:A:ASP:H	4	1.08
(1,444)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	6	1.08
(1,440)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	4	1.08
(1,440)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	4	1.08
(1,403)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG2	4	1.08
(1,403)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG3	4	1.08
(1,378)	1:11:A:TRP:HE1	1:24:A:PRO:HD2	5	1.08
(1,319)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB2	2	1.08
(1,319)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB3	2	1.08
(1,66)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	7	1.08
(1,66)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	7	1.08
(3,207)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD21	3	1.07
(3,207)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD22	3	1.07
(3,207)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD23	3	1.07
(3,186)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	1	1.07
(3,186)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	1	1.07
(3,186)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	1	1.07
(3,186)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	1	1.07
(3,186)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	1	1.07
(3,186)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	1	1.07
(3,186)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	1	1.07
(3,186)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	1	1.07
(3,186)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	1	1.07
(3,128)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:H	5	1.07
(3,114)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	1	1.07

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,114)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	1	1.07
(3,114)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	2	1.07
(3,114)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	2	1.07
(3,103)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG2	1	1.07
(3,103)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG3	1	1.07
(3,103)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG2	2	1.07
(3,103)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG3	2	1.07
(3,93)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD21	3	1.07
(3,93)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD22	3	1.07
(3,93)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD23	3	1.07
(3,7)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	9	1.07
(3,7)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	9	1.07
(3,7)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	9	1.07
(3,7)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	10	1.07
(3,7)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	10	1.07
(3,7)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	10	1.07
(2,391)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HB2	8	1.07
(1,679)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD21	3	1.07
(1,679)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD22	3	1.07
(1,679)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD23	3	1.07
(1,617)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	1	1.07
(1,617)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	1	1.07
(1,617)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	1	1.07
(1,617)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	1	1.07
(1,617)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	1	1.07
(1,617)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	1	1.07
(1,617)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	1	1.07
(1,617)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	1	1.07
(1,617)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	1	1.07
(1,542)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HB2	8	1.07
(1,469)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:H	5	1.07
(1,440)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	1	1.07
(1,440)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	1	1.07
(1,440)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	2	1.07
(1,440)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	2	1.07
(1,403)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG2	1	1.07
(1,403)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG3	1	1.07
(1,403)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG2	2	1.07
(1,403)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG3	2	1.07
(1,367)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD21	3	1.07
(1,367)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD22	3	1.07
(1,367)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD23	3	1.07

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,45)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	9	1.07
(1,45)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	9	1.07
(1,45)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	9	1.07
(1,45)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	10	1.07
(1,45)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	10	1.07
(1,45)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	10	1.07
(3,186)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	2	1.06
(3,186)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	2	1.06
(3,186)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	2	1.06
(3,186)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	2	1.06
(3,186)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	2	1.06
(3,186)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	2	1.06
(3,186)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	2	1.06
(3,186)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	2	1.06
(3,186)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	2	1.06
(3,186)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	5	1.06
(3,186)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	5	1.06
(3,186)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	5	1.06
(3,186)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	5	1.06
(3,186)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	5	1.06
(3,186)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	5	1.06
(3,186)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	5	1.06
(3,186)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	5	1.06
(3,186)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	5	1.06
(3,186)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	7	1.06
(3,186)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	7	1.06
(3,186)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	7	1.06
(3,186)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	7	1.06
(3,186)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	7	1.06
(3,186)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	7	1.06
(3,186)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	7	1.06
(3,186)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	7	1.06
(3,186)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	7	1.06
(3,186)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	9	1.06
(3,186)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	9	1.06
(3,186)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	9	1.06
(3,186)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	9	1.06
(3,186)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	9	1.06
(3,186)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	9	1.06
(3,186)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	9	1.06
(3,186)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	9	1.06
(3,186)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	9	1.06

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,180)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG3	8	1.06
(3,180)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG3	8	1.06
(3,180)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG3	8	1.06
(3,128)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:H	1	1.06
(3,119)	1:14:A:ASP:HA	1:16:A:GLY:H	4	1.06
(3,71)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB2	4	1.06
(3,71)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB3	4	1.06
(3,13)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	1	1.06
(3,13)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	1	1.06
(3,13)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	2	1.06
(3,13)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	2	1.06
(3,13)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	3	1.06
(3,13)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	3	1.06
(3,13)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	5	1.06
(3,13)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	5	1.06
(3,13)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	6	1.06
(3,13)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	6	1.06
(2,391)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HB2	1	1.06
(2,262)	1:11:A:TRP:HZ3	1:16:A:GLY:HA2	3	1.06
(2,113)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HB3	3	1.06
(2,113)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HB3	8	1.06
(1,617)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	2	1.06
(1,617)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	2	1.06
(1,617)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	2	1.06
(1,617)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	2	1.06
(1,617)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	2	1.06
(1,617)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	2	1.06
(1,617)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	2	1.06
(1,617)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	2	1.06
(1,617)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	2	1.06
(1,617)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	5	1.06
(1,617)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	5	1.06
(1,617)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	5	1.06
(1,617)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	5	1.06
(1,617)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	5	1.06
(1,617)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	5	1.06
(1,617)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	5	1.06
(1,617)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	5	1.06
(1,617)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	5	1.06
(1,617)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	7	1.06
(1,617)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	7	1.06
(1,617)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	7	1.06

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,617)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	7	1.06
(1,617)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	7	1.06
(1,617)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	7	1.06
(1,617)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	7	1.06
(1,617)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	7	1.06
(1,617)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	7	1.06
(1,617)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG21	9	1.06
(1,617)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG22	9	1.06
(1,617)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HG23	9	1.06
(1,617)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG21	9	1.06
(1,617)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG22	9	1.06
(1,617)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HG23	9	1.06
(1,617)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG21	9	1.06
(1,617)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG22	9	1.06
(1,617)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HG23	9	1.06
(1,602)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG3	8	1.06
(1,602)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG3	8	1.06
(1,602)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG3	8	1.06
(1,542)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HB2	1	1.06
(1,469)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:H	1	1.06
(1,448)	1:14:A:ASP:HA	1:16:A:GLY:H	4	1.06
(1,344)	1:11:A:TRP:HZ3	1:16:A:GLY:HA2	3	1.06
(1,319)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB2	4	1.06
(1,319)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB3	4	1.06
(1,142)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HB3	3	1.06
(1,142)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HB3	8	1.06
(1,66)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	1	1.06
(1,66)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	1	1.06
(1,66)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	2	1.06
(1,66)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	2	1.06
(1,66)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	3	1.06
(1,66)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	3	1.06
(1,66)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	5	1.06
(1,66)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	5	1.06
(1,66)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE1	6	1.06
(1,66)	1:8:A:TYR:HB2	1:8:A:TYR:HE2	6	1.06
(3,98)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HE1	7	1.05
(3,98)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HE1	9	1.05
(3,53)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE1	4	1.05
(3,53)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE2	4	1.05
(3,7)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	7	1.05
(3,7)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	7	1.05

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,7)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	7	1.05
(2,328)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	5	1.05
(2,250)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HG	9	1.05
(1,444)	1:22:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	5	1.05
(1,382)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HE1	7	1.05
(1,382)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HE1	9	1.05
(1,322)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HG	9	1.05
(1,274)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE1	4	1.05
(1,274)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE2	4	1.05
(1,45)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	7	1.05
(1,45)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	7	1.05
(1,45)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	7	1.05
(3,143)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HB2	6	1.04
(3,143)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HB3	6	1.04
(3,128)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:H	2	1.04
(3,128)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:H	3	1.04
(3,27)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD2	9	1.04
(3,27)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD3	9	1.04
(3,7)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	8	1.04
(3,7)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	8	1.04
(3,7)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	8	1.04
(2,472)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HD2	7	1.04
(2,472)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HD2	7	1.04
(2,472)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HD2	7	1.04
(1,678)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HD2	7	1.04
(1,678)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HD2	7	1.04
(1,678)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HD2	7	1.04
(1,510)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HB2	6	1.04
(1,510)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HB3	6	1.04
(1,469)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:H	2	1.04
(1,469)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:H	3	1.04
(1,128)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD2	9	1.04
(1,128)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD3	9	1.04
(1,45)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	8	1.04
(1,45)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	8	1.04
(1,45)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	8	1.04
(3,194)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:H	4	1.03
(3,194)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:H	4	1.03
(3,194)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:H	4	1.03
(3,194)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:H	6	1.03
(3,194)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:H	6	1.03
(3,194)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:H	6	1.03

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,103)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG2	3	1.03
(3,103)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG3	3	1.03
(3,95)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB2	8	1.03
(3,95)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB3	8	1.03
(3,71)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB2	9	1.03
(3,71)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB3	9	1.03
(3,71)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB2	10	1.03
(3,71)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB3	10	1.03
(3,27)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD2	1	1.03
(3,27)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD3	1	1.03
(3,27)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD2	10	1.03
(3,27)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD3	10	1.03
(3,7)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	4	1.03
(3,7)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	4	1.03
(3,7)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	4	1.03
(2,391)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HB2	2	1.03
(2,391)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HB2	10	1.03
(2,250)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HG	8	1.03
(1,635)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:H	4	1.03
(1,635)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:H	4	1.03
(1,635)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:H	4	1.03
(1,635)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:H	6	1.03
(1,635)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:H	6	1.03
(1,635)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:H	6	1.03
(1,542)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HB2	2	1.03
(1,542)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HB2	10	1.03
(1,403)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG2	3	1.03
(1,403)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG3	3	1.03
(1,376)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB2	8	1.03
(1,376)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB3	8	1.03
(1,322)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HG	8	1.03
(1,319)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB2	9	1.03
(1,319)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB3	9	1.03
(1,319)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB2	10	1.03
(1,319)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB3	10	1.03
(1,128)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD2	1	1.03
(1,128)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD3	1	1.03
(1,128)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD2	10	1.03
(1,128)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD3	10	1.03
(1,45)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	4	1.03
(1,45)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	4	1.03
(1,45)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	4	1.03

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,207)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD21	4	1.02
(3,207)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD22	4	1.02
(3,207)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD23	4	1.02
(3,71)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB2	1	1.02
(3,71)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB3	1	1.02
(3,71)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB2	7	1.02
(3,71)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB3	7	1.02
(3,7)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	1	1.02
(3,7)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	1	1.02
(3,7)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	1	1.02
(3,7)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	2	1.02
(3,7)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	2	1.02
(3,7)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	2	1.02
(3,7)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	5	1.02
(3,7)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	5	1.02
(3,7)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	5	1.02
(3,7)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	6	1.02
(3,7)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	6	1.02
(3,7)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	6	1.02
(2,472)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HD2	9	1.02
(2,472)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HD2	9	1.02
(2,472)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HD2	9	1.02
(2,262)	1:11:A:TRP:HZ3	1:16:A:GLY:HA2	6	1.02
(2,250)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HG	7	1.02
(1,679)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD21	4	1.02
(1,679)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD22	4	1.02
(1,679)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD23	4	1.02
(1,678)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HD2	9	1.02
(1,678)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HD2	9	1.02
(1,678)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HD2	9	1.02
(1,344)	1:11:A:TRP:HZ3	1:16:A:GLY:HA2	6	1.02
(1,322)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HG	7	1.02
(1,319)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB2	1	1.02
(1,319)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB3	1	1.02
(1,319)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB2	7	1.02
(1,319)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB3	7	1.02
(1,45)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	1	1.02
(1,45)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	1	1.02
(1,45)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	1	1.02
(1,45)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	2	1.02
(1,45)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	2	1.02
(1,45)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	2	1.02

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,45)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	5	1.02
(1,45)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	5	1.02
(1,45)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	5	1.02
(1,45)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	6	1.02
(1,45)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	6	1.02
(1,45)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	6	1.02
(3,151)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HG3	2	1.01
(3,27)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD2	5	1.01
(3,27)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD3	5	1.01
(3,27)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD2	7	1.01
(3,27)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD3	7	1.01
(2,391)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HB2	5	1.01
(1,542)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HB2	5	1.01
(1,541)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HG3	2	1.01
(1,128)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD2	5	1.01
(1,128)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD3	5	1.01
(1,128)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD2	7	1.01
(1,128)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD3	7	1.01
(3,188)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:HA3	2	1.0
(3,188)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:HA3	2	1.0
(3,188)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:HA3	2	1.0
(3,151)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HG3	1	1.0
(3,151)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HG3	4	1.0
(3,128)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:H	4	1.0
(3,52)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HE3	3	1.0
(3,27)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD2	8	1.0
(3,27)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD3	8	1.0
(3,7)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	3	1.0
(3,7)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	3	1.0
(3,7)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	3	1.0
(2,250)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HG	10	1.0
(2,245)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD11	10	1.0
(2,245)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD12	10	1.0
(2,245)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD13	10	1.0
(2,245)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD11	10	1.0
(2,245)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD12	10	1.0
(2,245)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD13	10	1.0
(2,233)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HD3	7	1.0
(2,233)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HD3	7	1.0
(2,113)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HB3	4	1.0
(1,621)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:HA3	2	1.0
(1,621)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:HA3	2	1.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,621)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:HA3	2	1.0
(1,541)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HG3	1	1.0
(1,541)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HG3	4	1.0
(1,469)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:H	4	1.0
(1,322)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HG	10	1.0
(1,314)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD11	10	1.0
(1,314)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD12	10	1.0
(1,314)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD13	10	1.0
(1,314)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD11	10	1.0
(1,314)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD12	10	1.0
(1,314)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD13	10	1.0
(1,294)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HD3	7	1.0
(1,294)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HD3	7	1.0
(1,272)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HE3	3	1.0
(1,142)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HB3	4	1.0
(1,128)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD2	8	1.0
(1,128)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD3	8	1.0
(1,45)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD11	3	1.0
(1,45)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD12	3	1.0
(1,45)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HD13	3	1.0
(3,194)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:H	2	0.99
(3,194)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:H	2	0.99
(3,194)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:H	2	0.99
(3,194)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:H	5	0.99
(3,194)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:H	5	0.99
(3,194)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:H	5	0.99
(3,188)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:HA3	4	0.99
(3,188)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:HA3	4	0.99
(3,188)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:HA3	4	0.99
(3,151)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HG3	10	0.99
(3,128)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:H	6	0.99
(3,70)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD21	3	0.99
(3,70)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD22	3	0.99
(3,70)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD23	3	0.99
(3,70)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD21	3	0.99
(3,70)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD22	3	0.99
(3,70)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD23	3	0.99
(3,70)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD21	6	0.99
(3,70)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD22	6	0.99
(3,70)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD23	6	0.99
(3,70)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD21	6	0.99
(3,70)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD22	6	0.99

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,70)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD23	6	0.99
(3,27)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD2	2	0.99
(3,27)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD3	2	0.99
(2,391)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HB2	3	0.99
(2,314)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HD2	3	0.99
(2,314)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HD2	6	0.99
(1,635)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:H	2	0.99
(1,635)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:H	2	0.99
(1,635)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:H	2	0.99
(1,635)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:H	5	0.99
(1,635)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:H	5	0.99
(1,635)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:H	5	0.99
(1,621)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:HA3	4	0.99
(1,621)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:HA3	4	0.99
(1,621)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:HA3	4	0.99
(1,542)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HB2	3	0.99
(1,541)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HG3	10	0.99
(1,469)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:H	6	0.99
(1,424)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HD2	3	0.99
(1,424)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HD2	6	0.99
(1,315)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD21	3	0.99
(1,315)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD22	3	0.99
(1,315)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD23	3	0.99
(1,315)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD21	3	0.99
(1,315)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD22	3	0.99
(1,315)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD23	3	0.99
(1,315)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD21	6	0.99
(1,315)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD22	6	0.99
(1,315)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD23	6	0.99
(1,315)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD21	6	0.99
(1,315)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD22	6	0.99
(1,315)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD23	6	0.99
(1,128)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD2	2	0.99
(1,128)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD3	2	0.99
(3,194)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:H	1	0.98
(3,194)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:H	1	0.98
(3,194)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:H	1	0.98
(3,194)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:H	3	0.98
(3,194)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:H	3	0.98
(3,194)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:H	3	0.98
(3,154)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HB2	7	0.98
(3,93)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD21	2	0.98

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,93)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD22	2	0.98
(3,93)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD23	2	0.98
(3,14)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	8	0.98
(3,14)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	8	0.98
(3,14)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	10	0.98
(3,14)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	10	0.98
(2,398)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HG3	8	0.98
(1,635)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:H	1	0.98
(1,635)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:H	1	0.98
(1,635)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:H	1	0.98
(1,635)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:H	3	0.98
(1,635)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:H	3	0.98
(1,635)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:H	3	0.98
(1,552)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HG3	8	0.98
(1,550)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HB2	7	0.98
(1,367)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD21	2	0.98
(1,367)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD22	2	0.98
(1,367)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD23	2	0.98
(1,67)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	8	0.98
(1,67)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	8	0.98
(1,67)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	10	0.98
(1,67)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	10	0.98
(3,200)	1:16:A:GLY:HA2	1:19:A:SER:HB3	3	0.97
(3,143)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HB2	4	0.97
(3,143)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HB3	4	0.97
(3,95)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB2	5	0.97
(3,95)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB3	5	0.97
(3,27)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD2	3	0.97
(3,27)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD3	3	0.97
(3,14)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	4	0.97
(3,14)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	4	0.97
(2,391)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HB2	4	0.97
(2,391)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HB2	9	0.97
(2,113)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HB3	6	0.97
(1,662)	1:16:A:GLY:HA2	1:19:A:SER:HB3	3	0.97
(1,542)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HB2	4	0.97
(1,542)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HB2	9	0.97
(1,510)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HB2	4	0.97
(1,510)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HB3	4	0.97
(1,376)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB2	5	0.97
(1,376)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HB3	5	0.97
(1,142)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HB3	6	0.97

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,128)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD2	3	0.97
(1,128)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HD3	3	0.97
(1,67)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE1	4	0.97
(1,67)	1:8:A:TYR:HB3	1:8:A:TYR:HE2	4	0.97
(3,196)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:HD1	8	0.96
(3,196)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:HD2	8	0.96
(3,196)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:HD1	8	0.96
(3,196)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:HD2	8	0.96
(3,196)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:HD1	8	0.96
(3,196)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:HD2	8	0.96
(3,196)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:HD1	10	0.96
(3,196)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:HD2	10	0.96
(3,196)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:HD1	10	0.96
(3,196)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:HD2	10	0.96
(3,196)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:HD1	10	0.96
(3,196)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:HD2	10	0.96
(3,161)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HA	2	0.96
(3,161)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HA	2	0.96
(3,161)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HA	2	0.96
(3,154)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HB2	9	0.96
(3,52)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HE3	6	0.96
(3,38)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD3	5	0.96
(3,38)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD3	6	0.96
(2,314)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HD2	8	0.96
(2,133)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG2	2	0.96
(2,133)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG2	9	0.96
(2,133)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG2	10	0.96
(1,649)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:HD1	8	0.96
(1,649)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:HD2	8	0.96
(1,649)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:HD1	8	0.96
(1,649)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:HD2	8	0.96
(1,649)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:HD1	8	0.96
(1,649)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:HD2	8	0.96
(1,649)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:HD1	10	0.96
(1,649)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:HD2	10	0.96
(1,649)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:HD1	10	0.96
(1,649)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:HD2	10	0.96
(1,649)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:HD1	10	0.96
(1,649)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:HD2	10	0.96
(1,572)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HA	2	0.96
(1,572)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HA	2	0.96
(1,572)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HA	2	0.96

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,550)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HB2	9	0.96
(1,424)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HD2	8	0.96
(1,272)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HE3	6	0.96
(1,221)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD3	5	0.96
(1,221)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD3	6	0.96
(1,164)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG2	2	0.96
(1,164)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG2	9	0.96
(1,164)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG2	10	0.96
(3,198)	1:19:A:SER:HB2	1:21:A:ARG:HG3	10	0.95
(3,196)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:HD1	3	0.95
(3,196)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:HD2	3	0.95
(3,196)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:HD1	3	0.95
(3,196)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:HD2	3	0.95
(3,196)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:HD1	3	0.95
(3,196)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:HD2	3	0.95
(3,161)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HA	3	0.95
(3,161)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HA	3	0.95
(3,161)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HA	3	0.95
(3,161)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HA	4	0.95
(3,161)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HA	4	0.95
(3,161)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HA	4	0.95
(3,161)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HA	6	0.95
(3,161)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HA	6	0.95
(3,161)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HA	6	0.95
(3,70)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD21	1	0.95
(3,70)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD22	1	0.95
(3,70)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD23	1	0.95
(3,70)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD21	1	0.95
(3,70)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD22	1	0.95
(3,70)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD23	1	0.95
(2,391)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HB2	6	0.95
(2,233)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HD3	1	0.95
(2,233)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HD3	1	0.95
(2,133)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG2	4	0.95
(2,133)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG2	6	0.95
(2,133)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG2	7	0.95
(1,657)	1:19:A:SER:HB2	1:21:A:ARG:HG3	10	0.95
(1,649)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:HD1	3	0.95
(1,649)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:HD2	3	0.95
(1,649)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:HD1	3	0.95
(1,649)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:HD2	3	0.95
(1,649)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:HD1	3	0.95

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,649)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:HD2	3	0.95
(1,572)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HA	3	0.95
(1,572)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HA	3	0.95
(1,572)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HA	3	0.95
(1,572)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HA	4	0.95
(1,572)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HA	4	0.95
(1,572)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HA	4	0.95
(1,572)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HA	6	0.95
(1,572)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HA	6	0.95
(1,572)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HA	6	0.95
(1,542)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HB2	6	0.95
(1,315)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD21	1	0.95
(1,315)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD22	1	0.95
(1,315)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD23	1	0.95
(1,315)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD21	1	0.95
(1,315)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD22	1	0.95
(1,315)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD23	1	0.95
(1,294)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HD3	1	0.95
(1,294)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HD3	1	0.95
(1,164)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG2	4	0.95
(1,164)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG2	6	0.95
(1,164)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG2	7	0.95
(3,207)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD21	1	0.94
(3,207)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD22	1	0.94
(3,207)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD23	1	0.94
(3,196)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:HD1	9	0.94
(3,196)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:HD2	9	0.94
(3,196)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:HD1	9	0.94
(3,196)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:HD2	9	0.94
(3,196)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:HD1	9	0.94
(3,196)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:HD2	9	0.94
(3,112)	1:21:A:ARG:HG2	1:22:A:PRO:HD3	2	0.94
(3,93)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD21	4	0.94
(3,93)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD22	4	0.94
(3,93)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD23	4	0.94
(3,52)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HE3	5	0.94
(3,44)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	7	0.94
(3,44)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	8	0.94
(2,233)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HD3	9	0.94
(2,233)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HD3	9	0.94
(2,133)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG2	1	0.94
(2,133)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG2	3	0.94

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,133)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG2	8	0.94
(1,679)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD21	1	0.94
(1,679)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD22	1	0.94
(1,679)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD23	1	0.94
(1,649)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:HD1	9	0.94
(1,649)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:HD2	9	0.94
(1,649)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:HD1	9	0.94
(1,649)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:HD2	9	0.94
(1,649)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:HD1	9	0.94
(1,649)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:HD2	9	0.94
(1,431)	1:21:A:ARG:HG2	1:22:A:PRO:HD3	2	0.94
(1,367)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD21	4	0.94
(1,367)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD22	4	0.94
(1,367)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD23	4	0.94
(1,294)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HD3	9	0.94
(1,294)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HD3	9	0.94
(1,272)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HE3	5	0.94
(1,249)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	7	0.94
(1,249)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	8	0.94
(1,164)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG2	1	0.94
(1,164)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG2	3	0.94
(1,164)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG2	8	0.94
(3,202)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD21	7	0.93
(3,202)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD22	7	0.93
(3,202)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD23	7	0.93
(3,202)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD21	8	0.93
(3,202)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD22	8	0.93
(3,202)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD23	8	0.93
(3,196)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:HD1	5	0.93
(3,196)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:HD2	5	0.93
(3,196)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:HD1	5	0.93
(3,196)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:HD2	5	0.93
(3,196)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:HD1	5	0.93
(3,196)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:HD2	5	0.93
(3,196)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:HD1	6	0.93
(3,196)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:HD2	6	0.93
(3,196)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:HD1	6	0.93
(3,196)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:HD2	6	0.93
(3,196)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:HD1	6	0.93
(3,196)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:HD2	6	0.93
(3,194)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:H	7	0.93
(3,194)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:H	7	0.93

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,194)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:H	7	0.93
(3,130)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG21	7	0.93
(3,130)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG22	7	0.93
(3,130)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG23	7	0.93
(3,52)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HE3	1	0.93
(3,52)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HE3	2	0.93
(2,233)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HD3	3	0.93
(2,233)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HD3	3	0.93
(1,671)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD21	7	0.93
(1,671)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD22	7	0.93
(1,671)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD23	7	0.93
(1,671)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD21	8	0.93
(1,671)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD22	8	0.93
(1,671)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD23	8	0.93
(1,649)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:HD1	5	0.93
(1,649)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:HD2	5	0.93
(1,649)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:HD1	5	0.93
(1,649)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:HD2	5	0.93
(1,649)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:HD1	5	0.93
(1,649)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:HD2	5	0.93
(1,649)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:HD1	6	0.93
(1,649)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:HD2	6	0.93
(1,649)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:HD1	6	0.93
(1,649)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:HD2	6	0.93
(1,649)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:HD1	6	0.93
(1,649)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:HD2	6	0.93
(1,635)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:H	7	0.93
(1,635)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:H	7	0.93
(1,635)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:H	7	0.93
(1,476)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG21	7	0.93
(1,476)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG22	7	0.93
(1,476)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG23	7	0.93
(1,294)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HD3	3	0.93
(1,294)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HD3	3	0.93
(1,272)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HE3	1	0.93
(1,272)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HE3	2	0.93
(3,207)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD21	5	0.92
(3,207)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD22	5	0.92
(3,207)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD23	5	0.92
(3,196)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:HD1	4	0.92
(3,196)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:HD2	4	0.92
(3,196)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:HD1	4	0.92

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,196)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:HD2	4	0.92
(3,196)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:HD1	4	0.92
(3,196)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:HD2	4	0.92
(3,196)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:HD1	7	0.92
(3,196)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:HD2	7	0.92
(3,196)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:HD1	7	0.92
(3,196)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:HD2	7	0.92
(3,196)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:HD1	7	0.92
(3,196)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:HD2	7	0.92
(3,194)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:H	9	0.92
(3,194)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:H	9	0.92
(3,194)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:H	9	0.92
(3,175)	1:7:A:LEU:HD21	1:8:A:TYR:HB2	5	0.92
(3,175)	1:7:A:LEU:HD22	1:8:A:TYR:HB2	5	0.92
(3,175)	1:7:A:LEU:HD23	1:8:A:TYR:HB2	5	0.92
(3,161)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HA	1	0.92
(3,161)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HA	1	0.92
(3,161)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HA	1	0.92
(3,113)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD2	5	0.92
(3,103)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG2	10	0.92
(3,103)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG3	10	0.92
(3,93)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD21	1	0.92
(3,93)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD22	1	0.92
(3,93)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD23	1	0.92
(3,44)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	1	0.92
(3,44)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	3	0.92
(3,44)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	10	0.92
(2,43)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD11	2	0.92
(2,43)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD12	2	0.92
(2,43)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD13	2	0.92
(2,43)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD11	3	0.92
(2,43)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD12	3	0.92
(2,43)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD13	3	0.92
(2,43)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD11	4	0.92
(2,43)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD12	4	0.92
(2,43)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD13	4	0.92
(2,43)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD11	5	0.92
(2,43)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD12	5	0.92
(2,43)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD13	5	0.92
(2,43)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD11	6	0.92
(2,43)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD12	6	0.92
(2,43)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD13	6	0.92

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,43)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD11	7	0.92
(2,43)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD12	7	0.92
(2,43)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD13	7	0.92
(2,43)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD11	8	0.92
(2,43)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD12	8	0.92
(2,43)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD13	8	0.92
(1,679)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD21	5	0.92
(1,679)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD22	5	0.92
(1,679)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD23	5	0.92
(1,649)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:HD1	4	0.92
(1,649)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:HD2	4	0.92
(1,649)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:HD1	4	0.92
(1,649)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:HD2	4	0.92
(1,649)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:HD1	4	0.92
(1,649)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:HD2	4	0.92
(1,649)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:HD1	7	0.92
(1,649)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:HD2	7	0.92
(1,649)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:HD1	7	0.92
(1,649)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:HD2	7	0.92
(1,649)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:HD1	7	0.92
(1,649)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:HD2	7	0.92
(1,635)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:H	9	0.92
(1,635)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:H	9	0.92
(1,635)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:H	9	0.92
(1,592)	1:7:A:LEU:HD21	1:8:A:TYR:HB2	5	0.92
(1,592)	1:7:A:LEU:HD22	1:8:A:TYR:HB2	5	0.92
(1,592)	1:7:A:LEU:HD23	1:8:A:TYR:HB2	5	0.92
(1,572)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HA	1	0.92
(1,572)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HA	1	0.92
(1,572)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HA	1	0.92
(1,439)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD2	5	0.92
(1,403)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG2	10	0.92
(1,403)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG3	10	0.92
(1,367)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD21	1	0.92
(1,367)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD22	1	0.92
(1,367)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD23	1	0.92
(1,249)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	1	0.92
(1,249)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	3	0.92
(1,249)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	10	0.92
(1,53)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD11	2	0.92
(1,53)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD12	2	0.92
(1,53)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD13	2	0.92

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,53)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD11	3	0.92
(1,53)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD12	3	0.92
(1,53)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD13	3	0.92
(1,53)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD11	4	0.92
(1,53)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD12	4	0.92
(1,53)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD13	4	0.92
(1,53)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD11	5	0.92
(1,53)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD12	5	0.92
(1,53)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD13	5	0.92
(1,53)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD11	6	0.92
(1,53)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD12	6	0.92
(1,53)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD13	6	0.92
(1,53)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD11	7	0.92
(1,53)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD12	7	0.92
(1,53)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD13	7	0.92
(1,53)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD11	8	0.92
(1,53)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD12	8	0.92
(1,53)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD13	8	0.92
(3,175)	1:7:A:LEU:HD21	1:8:A:TYR:HB2	6	0.91
(3,175)	1:7:A:LEU:HD22	1:8:A:TYR:HB2	6	0.91
(3,175)	1:7:A:LEU:HD23	1:8:A:TYR:HB2	6	0.91
(3,175)	1:7:A:LEU:HD21	1:8:A:TYR:HB2	8	0.91
(3,175)	1:7:A:LEU:HD22	1:8:A:TYR:HB2	8	0.91
(3,175)	1:7:A:LEU:HD23	1:8:A:TYR:HB2	8	0.91
(3,175)	1:7:A:LEU:HD21	1:8:A:TYR:HB2	10	0.91
(3,175)	1:7:A:LEU:HD22	1:8:A:TYR:HB2	10	0.91
(3,175)	1:7:A:LEU:HD23	1:8:A:TYR:HB2	10	0.91
(3,112)	1:21:A:ARG:HG2	1:22:A:PRO:HD3	1	0.91
(3,112)	1:21:A:ARG:HG2	1:22:A:PRO:HD3	10	0.91
(3,75)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	5	0.91
(3,75)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	6	0.91
(3,70)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD21	2	0.91
(3,70)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD22	2	0.91
(3,70)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD23	2	0.91
(3,70)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD21	2	0.91
(3,70)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD22	2	0.91
(3,70)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD23	2	0.91
(3,52)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HE3	4	0.91
(2,322)	1:21:A:ARG:HB3	1:22:A:PRO:HD2	10	0.91
(2,233)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HD3	2	0.91
(2,233)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HD3	2	0.91
(2,233)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HD3	6	0.91

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,233)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HD3	6	0.91
(2,171)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HG3	5	0.91
(2,43)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD11	1	0.91
(2,43)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD12	1	0.91
(2,43)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD13	1	0.91
(2,43)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD11	9	0.91
(2,43)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD12	9	0.91
(2,43)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD13	9	0.91
(2,43)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD11	10	0.91
(2,43)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD12	10	0.91
(2,43)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD13	10	0.91
(1,592)	1:7:A:LEU:HD21	1:8:A:TYR:HB2	6	0.91
(1,592)	1:7:A:LEU:HD22	1:8:A:TYR:HB2	6	0.91
(1,592)	1:7:A:LEU:HD23	1:8:A:TYR:HB2	6	0.91
(1,592)	1:7:A:LEU:HD21	1:8:A:TYR:HB2	8	0.91
(1,592)	1:7:A:LEU:HD22	1:8:A:TYR:HB2	8	0.91
(1,592)	1:7:A:LEU:HD23	1:8:A:TYR:HB2	8	0.91
(1,592)	1:7:A:LEU:HD21	1:8:A:TYR:HB2	10	0.91
(1,592)	1:7:A:LEU:HD22	1:8:A:TYR:HB2	10	0.91
(1,592)	1:7:A:LEU:HD23	1:8:A:TYR:HB2	10	0.91
(1,434)	1:21:A:ARG:HB3	1:22:A:PRO:HD2	10	0.91
(1,431)	1:21:A:ARG:HG2	1:22:A:PRO:HD3	1	0.91
(1,431)	1:21:A:ARG:HG2	1:22:A:PRO:HD3	10	0.91
(1,330)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	5	0.91
(1,330)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	6	0.91
(1,315)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD21	2	0.91
(1,315)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD22	2	0.91
(1,315)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD23	2	0.91
(1,315)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD21	2	0.91
(1,315)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD22	2	0.91
(1,315)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD23	2	0.91
(1,294)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HD3	2	0.91
(1,294)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HD3	2	0.91
(1,294)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HD3	6	0.91
(1,294)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HD3	6	0.91
(1,272)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HE3	4	0.91
(1,205)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HG3	5	0.91
(1,53)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD11	1	0.91
(1,53)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD12	1	0.91
(1,53)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD13	1	0.91
(1,53)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD11	9	0.91
(1,53)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD12	9	0.91

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,53)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD13	9	0.91
(1,53)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD11	10	0.91
(1,53)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD12	10	0.91
(1,53)	1:7:A:LEU:HB3	1:7:A:LEU:HD13	10	0.91
(3,202)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD21	10	0.9
(3,202)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD22	10	0.9
(3,202)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD23	10	0.9
(3,196)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:HD1	2	0.9
(3,196)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:HD2	2	0.9
(3,196)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:HD1	2	0.9
(3,196)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:HD2	2	0.9
(3,196)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:HD1	2	0.9
(3,196)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:HD2	2	0.9
(3,194)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:H	10	0.9
(3,194)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:H	10	0.9
(3,194)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:H	10	0.9
(3,175)	1:7:A:LEU:HD21	1:8:A:TYR:HB2	3	0.9
(3,175)	1:7:A:LEU:HD22	1:8:A:TYR:HB2	3	0.9
(3,175)	1:7:A:LEU:HD23	1:8:A:TYR:HB2	3	0.9
(3,175)	1:7:A:LEU:HD21	1:8:A:TYR:HB2	9	0.9
(3,175)	1:7:A:LEU:HD22	1:8:A:TYR:HB2	9	0.9
(3,175)	1:7:A:LEU:HD23	1:8:A:TYR:HB2	9	0.9
(3,171)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	8	0.9
(3,171)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	8	0.9
(3,171)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	8	0.9
(3,128)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:H	7	0.9
(3,128)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:H	9	0.9
(3,114)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	6	0.9
(3,114)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	6	0.9
(3,112)	1:21:A:ARG:HG2	1:22:A:PRO:HD3	4	0.9
(3,70)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD21	5	0.9
(3,70)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD22	5	0.9
(3,70)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD23	5	0.9
(3,70)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD21	5	0.9
(3,70)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD22	5	0.9
(3,70)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD23	5	0.9
(3,53)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE1	7	0.9
(3,53)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE2	7	0.9
(3,53)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE1	9	0.9
(3,53)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE2	9	0.9
(3,52)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HE3	8	0.9
(3,44)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	6	0.9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,24)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD11	8	0.9
(3,24)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD12	8	0.9
(3,24)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD13	8	0.9
(1,671)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD21	10	0.9
(1,671)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD22	10	0.9
(1,671)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD23	10	0.9
(1,649)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:HD1	2	0.9
(1,649)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:HD2	2	0.9
(1,649)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:HD1	2	0.9
(1,649)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:HD2	2	0.9
(1,649)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:HD1	2	0.9
(1,649)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:HD2	2	0.9
(1,635)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:H	10	0.9
(1,635)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:H	10	0.9
(1,635)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:H	10	0.9
(1,592)	1:7:A:LEU:HD21	1:8:A:TYR:HB2	3	0.9
(1,592)	1:7:A:LEU:HD22	1:8:A:TYR:HB2	3	0.9
(1,592)	1:7:A:LEU:HD23	1:8:A:TYR:HB2	3	0.9
(1,592)	1:7:A:LEU:HD21	1:8:A:TYR:HB2	9	0.9
(1,592)	1:7:A:LEU:HD22	1:8:A:TYR:HB2	9	0.9
(1,592)	1:7:A:LEU:HD23	1:8:A:TYR:HB2	9	0.9
(1,586)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	8	0.9
(1,586)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	8	0.9
(1,586)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	8	0.9
(1,469)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:H	7	0.9
(1,469)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:H	9	0.9
(1,440)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	6	0.9
(1,440)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	6	0.9
(1,431)	1:21:A:ARG:HG2	1:22:A:PRO:HD3	4	0.9
(1,315)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD21	5	0.9
(1,315)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD22	5	0.9
(1,315)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD23	5	0.9
(1,315)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD21	5	0.9
(1,315)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD22	5	0.9
(1,315)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD23	5	0.9
(1,274)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE1	7	0.9
(1,274)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE2	7	0.9
(1,274)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE1	9	0.9
(1,274)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE2	9	0.9
(1,272)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HE3	8	0.9
(1,249)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	6	0.9
(1,123)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD11	8	0.9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,123)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD12	8	0.9
(1,123)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD13	8	0.9
(3,196)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:HD1	1	0.89
(3,196)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:HD2	1	0.89
(3,196)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:HD1	1	0.89
(3,196)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:HD2	1	0.89
(3,196)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:HD1	1	0.89
(3,196)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:HD2	1	0.89
(3,175)	1:7:A:LEU:HD21	1:8:A:TYR:HB2	4	0.89
(3,175)	1:7:A:LEU:HD22	1:8:A:TYR:HB2	4	0.89
(3,175)	1:7:A:LEU:HD23	1:8:A:TYR:HB2	4	0.89
(3,171)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	10	0.89
(3,171)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	10	0.89
(3,171)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	10	0.89
(3,166)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HA	4	0.89
(3,166)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HA	4	0.89
(3,166)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HA	4	0.89
(3,75)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	3	0.89
(3,44)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	2	0.89
(2,245)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD11	7	0.89
(2,245)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD12	7	0.89
(2,245)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD13	7	0.89
(2,245)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD11	7	0.89
(2,245)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD12	7	0.89
(2,245)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD13	7	0.89
(2,239)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HG	9	0.89
(2,239)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HG	9	0.89
(1,649)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:HD1	1	0.89
(1,649)	1:7:A:LEU:HD11	1:8:A:TYR:HD2	1	0.89
(1,649)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:HD1	1	0.89
(1,649)	1:7:A:LEU:HD12	1:8:A:TYR:HD2	1	0.89
(1,649)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:HD1	1	0.89
(1,649)	1:7:A:LEU:HD13	1:8:A:TYR:HD2	1	0.89
(1,592)	1:7:A:LEU:HD21	1:8:A:TYR:HB2	4	0.89
(1,592)	1:7:A:LEU:HD22	1:8:A:TYR:HB2	4	0.89
(1,592)	1:7:A:LEU:HD23	1:8:A:TYR:HB2	4	0.89
(1,586)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	10	0.89
(1,586)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	10	0.89
(1,586)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	10	0.89
(1,579)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HA	4	0.89
(1,579)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HA	4	0.89
(1,579)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HA	4	0.89

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,330)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	3	0.89
(1,314)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD11	7	0.89
(1,314)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD12	7	0.89
(1,314)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD13	7	0.89
(1,314)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD11	7	0.89
(1,314)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD12	7	0.89
(1,314)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD13	7	0.89
(1,306)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HG	9	0.89
(1,306)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HG	9	0.89
(1,249)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	2	0.89
(3,194)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:H	8	0.88
(3,194)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:H	8	0.88
(3,194)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:H	8	0.88
(3,175)	1:7:A:LEU:HD21	1:8:A:TYR:HB2	2	0.88
(3,175)	1:7:A:LEU:HD22	1:8:A:TYR:HB2	2	0.88
(3,175)	1:7:A:LEU:HD23	1:8:A:TYR:HB2	2	0.88
(3,175)	1:7:A:LEU:HD21	1:8:A:TYR:HB2	7	0.88
(3,175)	1:7:A:LEU:HD22	1:8:A:TYR:HB2	7	0.88
(3,175)	1:7:A:LEU:HD23	1:8:A:TYR:HB2	7	0.88
(3,171)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	1	0.88
(3,171)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	1	0.88
(3,171)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	1	0.88
(3,93)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD21	5	0.88
(3,93)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD22	5	0.88
(3,93)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD23	5	0.88
(3,75)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	10	0.88
(3,70)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD21	4	0.88
(3,70)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD22	4	0.88
(3,70)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD23	4	0.88
(3,70)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD21	4	0.88
(3,70)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD22	4	0.88
(3,70)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD23	4	0.88
(3,44)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	4	0.88
(2,267)	1:11:A:TRP:HZ3	1:17:A:PRO:HG2	1	0.88
(2,233)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HD3	5	0.88
(2,233)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HD3	5	0.88
(2,137)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD2	5	0.88
(1,635)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:H	8	0.88
(1,635)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:H	8	0.88
(1,635)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:H	8	0.88
(1,592)	1:7:A:LEU:HD21	1:8:A:TYR:HB2	2	0.88
(1,592)	1:7:A:LEU:HD22	1:8:A:TYR:HB2	2	0.88

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,592)	1:7:A:LEU:HD23	1:8:A:TYR:HB2	2	0.88
(1,592)	1:7:A:LEU:HD21	1:8:A:TYR:HB2	7	0.88
(1,592)	1:7:A:LEU:HD22	1:8:A:TYR:HB2	7	0.88
(1,592)	1:7:A:LEU:HD23	1:8:A:TYR:HB2	7	0.88
(1,586)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	1	0.88
(1,586)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	1	0.88
(1,586)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	1	0.88
(1,367)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD21	5	0.88
(1,367)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD22	5	0.88
(1,367)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD23	5	0.88
(1,351)	1:11:A:TRP:HZ3	1:17:A:PRO:HG2	1	0.88
(1,330)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	10	0.88
(1,315)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD21	4	0.88
(1,315)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD22	4	0.88
(1,315)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD23	4	0.88
(1,315)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD21	4	0.88
(1,315)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD22	4	0.88
(1,315)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD23	4	0.88
(1,294)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HD3	5	0.88
(1,294)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HD3	5	0.88
(1,249)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	4	0.88
(1,168)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD2	5	0.88
(3,171)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	3	0.87
(3,171)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	3	0.87
(3,171)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	3	0.87
(3,171)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	4	0.87
(3,171)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	4	0.87
(3,171)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	4	0.87
(3,152)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD3	7	0.87
(3,152)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD3	7	0.87
(3,44)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	5	0.87
(3,44)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	9	0.87
(2,93)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD11	10	0.87
(2,93)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD12	10	0.87
(2,93)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD13	10	0.87
(1,586)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	3	0.87
(1,586)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	3	0.87
(1,586)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	3	0.87
(1,586)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	4	0.87
(1,586)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	4	0.87
(1,586)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	4	0.87
(1,543)	1:3:A:GLU:HG2	1:6:A:ARG:HD3	7	0.87

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,543)	1:3:A:GLU:HG3	1:6:A:ARG:HD3	7	0.87
(1,249)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	5	0.87
(1,249)	1:24:A:PRO:HA	1:25:A:SER:H	9	0.87
(1,113)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD11	10	0.87
(1,113)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD12	10	0.87
(1,113)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD13	10	0.87
(3,207)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD21	2	0.86
(3,207)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD22	2	0.86
(3,207)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD23	2	0.86
(3,202)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD21	9	0.86
(3,202)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD22	9	0.86
(3,202)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD23	9	0.86
(3,175)	1:7:A:LEU:HD21	1:8:A:TYR:HB2	1	0.86
(3,175)	1:7:A:LEU:HD22	1:8:A:TYR:HB2	1	0.86
(3,175)	1:7:A:LEU:HD23	1:8:A:TYR:HB2	1	0.86
(3,171)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	2	0.86
(3,171)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	2	0.86
(3,171)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	2	0.86
(3,171)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	5	0.86
(3,171)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	5	0.86
(3,171)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	5	0.86
(3,75)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	2	0.86
(3,71)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB2	8	0.86
(3,71)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB3	8	0.86
(2,473)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:HB2	4	0.86
(2,473)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:HB2	4	0.86
(1,682)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:HB2	4	0.86
(1,682)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:HB2	4	0.86
(1,679)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD21	2	0.86
(1,679)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD22	2	0.86
(1,679)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD23	2	0.86
(1,671)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD21	9	0.86
(1,671)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD22	9	0.86
(1,671)	1:9:A:ILE:HG13	1:12:A:LEU:HD23	9	0.86
(1,592)	1:7:A:LEU:HD21	1:8:A:TYR:HB2	1	0.86
(1,592)	1:7:A:LEU:HD22	1:8:A:TYR:HB2	1	0.86
(1,592)	1:7:A:LEU:HD23	1:8:A:TYR:HB2	1	0.86
(1,586)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	2	0.86
(1,586)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	2	0.86
(1,586)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	2	0.86
(1,586)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	5	0.86
(1,586)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	5	0.86

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,586)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	5	0.86
(1,330)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	2	0.86
(1,319)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB2	8	0.86
(1,319)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB3	8	0.86
(3,171)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	6	0.85
(3,171)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	6	0.85
(3,171)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	6	0.85
(3,171)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	7	0.85
(3,171)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	7	0.85
(3,171)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	7	0.85
(3,112)	1:21:A:ARG:HG2	1:22:A:PRO:HD3	3	0.85
(3,91)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD11	9	0.85
(3,91)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD12	9	0.85
(3,91)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD13	9	0.85
(3,52)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HE3	10	0.85
(2,267)	1:11:A:TRP:HZ3	1:17:A:PRO:HG2	4	0.85
(2,267)	1:11:A:TRP:HZ3	1:17:A:PRO:HG2	7	0.85
(2,267)	1:11:A:TRP:HZ3	1:17:A:PRO:HG2	9	0.85
(2,264)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	5	0.85
(2,245)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD11	9	0.85
(2,245)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD12	9	0.85
(2,245)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD13	9	0.85
(2,245)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD11	9	0.85
(2,245)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD12	9	0.85
(2,245)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD13	9	0.85
(2,84)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:H	8	0.85
(1,586)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	6	0.85
(1,586)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	6	0.85
(1,586)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	6	0.85
(1,586)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	7	0.85
(1,586)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	7	0.85
(1,586)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	7	0.85
(1,431)	1:21:A:ARG:HG2	1:22:A:PRO:HD3	3	0.85
(1,365)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD11	9	0.85
(1,365)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD12	9	0.85
(1,365)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD13	9	0.85
(1,351)	1:11:A:TRP:HZ3	1:17:A:PRO:HG2	4	0.85
(1,351)	1:11:A:TRP:HZ3	1:17:A:PRO:HG2	7	0.85
(1,351)	1:11:A:TRP:HZ3	1:17:A:PRO:HG2	9	0.85
(1,346)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	5	0.85
(1,314)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD11	9	0.85
(1,314)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD12	9	0.85

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,314)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD13	9	0.85
(1,314)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD11	9	0.85
(1,314)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD12	9	0.85
(1,314)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD13	9	0.85
(1,272)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HE3	10	0.85
(1,102)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:H	8	0.85
(3,128)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:H	10	0.84
(3,91)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD11	7	0.84
(3,91)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD12	7	0.84
(3,91)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD13	7	0.84
(2,93)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD11	8	0.84
(2,93)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD12	8	0.84
(2,93)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD13	8	0.84
(2,84)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:H	10	0.84
(1,469)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:H	10	0.84
(1,365)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD11	7	0.84
(1,365)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD12	7	0.84
(1,365)	1:11:A:TRP:HZ2	1:12:A:LEU:HD13	7	0.84
(1,113)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD11	8	0.84
(1,113)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD12	8	0.84
(1,113)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD13	8	0.84
(1,102)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:H	10	0.84
(3,207)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD21	7	0.83
(3,207)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD22	7	0.83
(3,207)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD23	7	0.83
(3,171)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	9	0.83
(3,171)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	9	0.83
(3,171)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	9	0.83
(3,53)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE1	5	0.83
(3,53)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE2	5	0.83
(2,473)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:HB2	7	0.83
(2,473)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:HB2	7	0.83
(2,239)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HG	7	0.83
(2,239)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HG	7	0.83
(1,682)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:HB2	7	0.83
(1,682)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:HB2	7	0.83
(1,679)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD21	7	0.83
(1,679)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD22	7	0.83
(1,679)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD23	7	0.83
(1,586)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HB2	9	0.83
(1,586)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HB2	9	0.83
(1,586)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HB2	9	0.83

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,306)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HG	7	0.83
(1,306)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HG	7	0.83
(1,274)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE1	5	0.83
(1,274)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE2	5	0.83
(3,166)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HA	6	0.82
(3,166)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HA	6	0.82
(3,166)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HA	6	0.82
(3,104)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	7	0.82
(3,75)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	1	0.82
(3,75)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	4	0.82
(3,75)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	8	0.82
(3,53)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE1	2	0.82
(3,53)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE2	2	0.82
(3,15)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	9	0.82
(3,15)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	9	0.82
(3,15)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	9	0.82
(2,93)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD11	7	0.82
(2,93)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD12	7	0.82
(2,93)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD13	7	0.82
(1,579)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HA	6	0.82
(1,579)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HA	6	0.82
(1,579)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HA	6	0.82
(1,405)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	7	0.82
(1,330)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	1	0.82
(1,330)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	4	0.82
(1,330)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	8	0.82
(1,274)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE1	2	0.82
(1,274)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE2	2	0.82
(1,113)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD11	7	0.82
(1,113)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD12	7	0.82
(1,113)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD13	7	0.82
(1,73)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	9	0.82
(1,73)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	9	0.82
(1,73)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	9	0.82
(3,151)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HG3	5	0.81
(3,130)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG21	4	0.81
(3,130)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG22	4	0.81
(3,130)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG23	4	0.81
(3,128)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:H	8	0.81
(3,53)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE1	1	0.81
(3,53)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE2	1	0.81
(2,329)	1:22:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD3	2	0.81

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,267)	1:11:A:TRP:HZ3	1:17:A:PRO:HG2	2	0.81
(2,93)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD11	9	0.81
(2,93)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD12	9	0.81
(2,93)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD13	9	0.81
(1,541)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HG3	5	0.81
(1,476)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG21	4	0.81
(1,476)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG22	4	0.81
(1,476)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG23	4	0.81
(1,469)	1:9:A:ILE:HG12	1:12:A:LEU:H	8	0.81
(1,447)	1:22:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD3	2	0.81
(1,351)	1:11:A:TRP:HZ3	1:17:A:PRO:HG2	2	0.81
(1,274)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE1	1	0.81
(1,274)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE2	1	0.81
(1,113)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD11	9	0.81
(1,113)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD12	9	0.81
(1,113)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD13	9	0.81
(3,138)	1:12:A:LEU:HD21	1:14:A:ASP:H	3	0.8
(3,138)	1:12:A:LEU:HD22	1:14:A:ASP:H	3	0.8
(3,138)	1:12:A:LEU:HD23	1:14:A:ASP:H	3	0.8
(3,130)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG21	8	0.8
(3,130)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG22	8	0.8
(3,130)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG23	8	0.8
(3,114)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	5	0.8
(3,114)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	5	0.8
(3,104)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	8	0.8
(3,82)	1:11:A:TRP:HE3	1:16:A:GLY:HA2	5	0.8
(3,75)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	7	0.8
(3,75)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	9	0.8
(3,25)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD21	6	0.8
(3,25)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD22	6	0.8
(3,25)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD23	6	0.8
(2,468)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HB3	6	0.8
(2,329)	1:22:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD3	1	0.8
(2,329)	1:22:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD3	4	0.8
(2,264)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	6	0.8
(1,669)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HB3	6	0.8
(1,498)	1:12:A:LEU:HD21	1:14:A:ASP:H	3	0.8
(1,498)	1:12:A:LEU:HD22	1:14:A:ASP:H	3	0.8
(1,498)	1:12:A:LEU:HD23	1:14:A:ASP:H	3	0.8
(1,476)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG21	8	0.8
(1,476)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG22	8	0.8
(1,476)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG23	8	0.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,447)	1:22:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD3	1	0.8
(1,447)	1:22:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD3	4	0.8
(1,440)	1:22:A:PRO:HG2	1:23:A:PRO:HD3	5	0.8
(1,440)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD3	5	0.8
(1,405)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	8	0.8
(1,346)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	6	0.8
(1,343)	1:11:A:TRP:HE3	1:16:A:GLY:HA2	5	0.8
(1,330)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	7	0.8
(1,330)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HD2	9	0.8
(1,124)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD21	6	0.8
(1,124)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD22	6	0.8
(1,124)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD23	6	0.8
(3,130)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG21	10	0.79
(3,130)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG22	10	0.79
(3,130)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG23	10	0.79
(3,113)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD2	6	0.79
(3,104)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	1	0.79
(3,104)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	9	0.79
(3,53)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE1	6	0.79
(3,53)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE2	6	0.79
(3,25)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD21	4	0.79
(3,25)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD22	4	0.79
(3,25)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD23	4	0.79
(3,24)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD11	10	0.79
(3,24)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD12	10	0.79
(3,24)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD13	10	0.79
(2,473)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:HB2	5	0.79
(2,473)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:HB2	5	0.79
(2,329)	1:22:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD3	3	0.79
(2,316)	1:14:A:ASP:HB2	1:19:A:SER:HB2	10	0.79
(2,264)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	3	0.79
(2,256)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HE3	5	0.79
(2,84)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:H	9	0.79
(1,682)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:HB2	5	0.79
(1,682)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:HB2	5	0.79
(1,476)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG21	10	0.79
(1,476)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG22	10	0.79
(1,476)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG23	10	0.79
(1,447)	1:22:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD3	3	0.79
(1,439)	1:22:A:PRO:HG3	1:23:A:PRO:HD2	6	0.79
(1,427)	1:14:A:ASP:HB2	1:19:A:SER:HB2	10	0.79
(1,405)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	1	0.79

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,405)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	9	0.79
(1,346)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	3	0.79
(1,331)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HE3	5	0.79
(1,274)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE1	6	0.79
(1,274)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE2	6	0.79
(1,124)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD21	4	0.79
(1,124)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD22	4	0.79
(1,124)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD23	4	0.79
(1,123)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD11	10	0.79
(1,123)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD12	10	0.79
(1,123)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD13	10	0.79
(1,102)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:H	9	0.79
(3,130)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG21	6	0.78
(3,130)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG22	6	0.78
(3,130)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG23	6	0.78
(3,124)	1:9:A:ILE:H	1:10:A:GLN:HB3	8	0.78
(3,92)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD11	2	0.78
(3,92)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD12	2	0.78
(3,92)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD13	2	0.78
(3,53)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE1	3	0.78
(3,53)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE2	3	0.78
(3,25)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD21	3	0.78
(3,25)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD22	3	0.78
(3,25)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD23	3	0.78
(3,15)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	5	0.78
(3,15)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	5	0.78
(3,15)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	5	0.78
(2,473)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:HB2	9	0.78
(2,473)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:HB2	9	0.78
(2,468)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HB3	5	0.78
(2,137)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD2	4	0.78
(2,137)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD2	7	0.78
(2,137)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD2	9	0.78
(2,137)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD2	10	0.78
(1,682)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:HB2	9	0.78
(1,682)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:HB2	9	0.78
(1,669)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HB3	5	0.78
(1,476)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG21	6	0.78
(1,476)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG22	6	0.78
(1,476)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG23	6	0.78
(1,461)	1:9:A:ILE:H	1:10:A:GLN:HB3	8	0.78
(1,366)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD11	2	0.78

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,366)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD12	2	0.78
(1,366)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD13	2	0.78
(1,274)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE1	3	0.78
(1,274)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HE2	3	0.78
(1,168)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD2	4	0.78
(1,168)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD2	7	0.78
(1,168)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD2	9	0.78
(1,168)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD2	10	0.78
(1,124)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD21	3	0.78
(1,124)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD22	3	0.78
(1,124)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD23	3	0.78
(1,73)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	5	0.78
(1,73)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	5	0.78
(1,73)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	5	0.78
(3,130)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG21	9	0.77
(3,130)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG22	9	0.77
(3,130)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG23	9	0.77
(3,119)	1:14:A:ASP:HA	1:16:A:GLY:H	7	0.77
(3,104)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	4	0.77
(3,92)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD11	3	0.77
(3,92)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD12	3	0.77
(3,92)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD13	3	0.77
(3,25)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD21	2	0.77
(3,25)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD22	2	0.77
(3,25)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD23	2	0.77
(3,15)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	1	0.77
(3,15)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	1	0.77
(3,15)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	1	0.77
(3,15)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	4	0.77
(3,15)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	4	0.77
(3,15)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	4	0.77
(2,329)	1:22:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD3	10	0.77
(2,256)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HE3	3	0.77
(2,171)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HG3	6	0.77
(2,137)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD2	2	0.77
(2,84)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:H	7	0.77
(2,31)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HD2	7	0.77
(1,476)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG21	9	0.77
(1,476)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG22	9	0.77
(1,476)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG23	9	0.77
(1,448)	1:14:A:ASP:HA	1:16:A:GLY:H	7	0.77
(1,447)	1:22:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD3	10	0.77

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,405)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	4	0.77
(1,366)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD11	3	0.77
(1,366)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD12	3	0.77
(1,366)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD13	3	0.77
(1,331)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HE3	3	0.77
(1,205)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HG3	6	0.77
(1,168)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD2	2	0.77
(1,124)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD21	2	0.77
(1,124)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD22	2	0.77
(1,124)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD23	2	0.77
(1,102)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:H	7	0.77
(1,73)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	1	0.77
(1,73)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	1	0.77
(1,73)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	1	0.77
(1,73)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	4	0.77
(1,73)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	4	0.77
(1,73)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	4	0.77
(1,35)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HD2	7	0.77
(3,124)	1:9:A:ILE:H	1:10:A:GLN:HB3	10	0.76
(3,104)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	2	0.76
(3,104)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	3	0.76
(3,68)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	8	0.76
(3,68)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	8	0.76
(3,68)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	8	0.76
(3,68)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	8	0.76
(3,68)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	8	0.76
(3,68)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	8	0.76
(3,52)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HE3	7	0.76
(3,25)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD21	1	0.76
(3,25)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD22	1	0.76
(3,25)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD23	1	0.76
(3,15)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	2	0.76
(3,15)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	2	0.76
(3,15)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	2	0.76
(3,15)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	3	0.76
(3,15)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	3	0.76
(3,15)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	3	0.76
(3,15)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	6	0.76
(3,15)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	6	0.76
(3,15)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	6	0.76
(3,3)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HB	9	0.76
(2,473)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:HB2	1	0.76

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,473)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:HB2	1	0.76
(2,473)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:HB2	2	0.76
(2,473)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:HB2	2	0.76
(2,468)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HB3	4	0.76
(2,256)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HE3	6	0.76
(2,246)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD21	3	0.76
(2,246)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD22	3	0.76
(2,246)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD23	3	0.76
(2,246)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD21	3	0.76
(2,246)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD22	3	0.76
(2,246)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD23	3	0.76
(2,246)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD21	6	0.76
(2,246)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD22	6	0.76
(2,246)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD23	6	0.76
(2,246)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD21	6	0.76
(2,246)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD22	6	0.76
(2,246)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD23	6	0.76
(2,137)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD2	1	0.76
(2,137)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD2	8	0.76
(1,682)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:HB2	1	0.76
(1,682)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:HB2	1	0.76
(1,682)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:HB2	2	0.76
(1,682)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:HB2	2	0.76
(1,669)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HB3	4	0.76
(1,461)	1:9:A:ILE:H	1:10:A:GLN:HB3	10	0.76
(1,405)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	2	0.76
(1,405)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	3	0.76
(1,331)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HE3	6	0.76
(1,316)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD21	3	0.76
(1,316)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD22	3	0.76
(1,316)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD23	3	0.76
(1,316)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD21	3	0.76
(1,316)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD22	3	0.76
(1,316)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD23	3	0.76
(1,316)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD21	6	0.76
(1,316)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD22	6	0.76
(1,316)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD23	6	0.76
(1,316)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD21	6	0.76
(1,316)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD22	6	0.76
(1,316)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD23	6	0.76
(1,311)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	8	0.76
(1,311)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	8	0.76

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,311)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	8	0.76
(1,311)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	8	0.76
(1,311)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	8	0.76
(1,311)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	8	0.76
(1,272)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HE3	7	0.76
(1,168)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD2	1	0.76
(1,168)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD2	8	0.76
(1,124)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD21	1	0.76
(1,124)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD22	1	0.76
(1,124)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD23	1	0.76
(1,73)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	2	0.76
(1,73)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	2	0.76
(1,73)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	2	0.76
(1,73)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	3	0.76
(1,73)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	3	0.76
(1,73)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	3	0.76
(1,73)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	6	0.76
(1,73)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	6	0.76
(1,73)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	6	0.76
(1,19)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HB	9	0.76
(3,144)	1:5:A:VAL:HB	1:6:A:ARG:H	1	0.75
(3,144)	1:5:A:VAL:HB	1:6:A:ARG:H	2	0.75
(3,144)	1:5:A:VAL:HB	1:6:A:ARG:H	7	0.75
(3,130)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG21	2	0.75
(3,130)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG22	2	0.75
(3,130)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG23	2	0.75
(3,130)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG21	5	0.75
(3,130)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG22	5	0.75
(3,130)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG23	5	0.75
(3,68)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	10	0.75
(3,68)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	10	0.75
(3,68)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	10	0.75
(3,68)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	10	0.75
(3,68)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	10	0.75
(3,68)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	10	0.75
(3,26)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE2	1	0.75
(3,26)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE3	1	0.75
(3,25)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD21	5	0.75
(3,25)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD22	5	0.75
(3,25)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD23	5	0.75
(3,3)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HB	1	0.75
(3,3)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HB	2	0.75

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,3)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HB	5	0.75
(3,3)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HB	7	0.75
(2,256)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HE3	8	0.75
(2,84)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:H	5	0.75
(1,513)	1:5:A:VAL:HB	1:6:A:ARG:H	1	0.75
(1,513)	1:5:A:VAL:HB	1:6:A:ARG:H	2	0.75
(1,513)	1:5:A:VAL:HB	1:6:A:ARG:H	7	0.75
(1,476)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG21	2	0.75
(1,476)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG22	2	0.75
(1,476)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG23	2	0.75
(1,476)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG21	5	0.75
(1,476)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG22	5	0.75
(1,476)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG23	5	0.75
(1,331)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HE3	8	0.75
(1,311)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	10	0.75
(1,311)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	10	0.75
(1,311)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	10	0.75
(1,311)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	10	0.75
(1,311)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	10	0.75
(1,311)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	10	0.75
(1,126)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE2	1	0.75
(1,126)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE3	1	0.75
(1,124)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD21	5	0.75
(1,124)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD22	5	0.75
(1,124)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD23	5	0.75
(1,102)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:H	5	0.75
(1,19)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HB	1	0.75
(1,19)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HB	2	0.75
(1,19)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HB	5	0.75
(1,19)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HB	7	0.75
(3,144)	1:5:A:VAL:HB	1:6:A:ARG:H	5	0.74
(3,130)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG21	1	0.74
(3,130)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG22	1	0.74
(3,130)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG23	1	0.74
(3,130)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG21	3	0.74
(3,130)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG22	3	0.74
(3,130)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG23	3	0.74
(3,94)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB2	8	0.74
(3,52)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HE3	9	0.74
(3,15)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	10	0.74
(3,15)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	10	0.74
(3,15)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	10	0.74

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,3)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HB	6	0.74
(2,322)	1:21:A:ARG:HB3	1:22:A:PRO:HD2	3	0.74
(2,137)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD2	6	0.74
(2,84)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:H	4	0.74
(2,84)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:H	6	0.74
(1,513)	1:5:A:VAL:HB	1:6:A:ARG:H	5	0.74
(1,476)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG21	1	0.74
(1,476)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG22	1	0.74
(1,476)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG23	1	0.74
(1,476)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG21	3	0.74
(1,476)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG22	3	0.74
(1,476)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HG23	3	0.74
(1,434)	1:21:A:ARG:HB3	1:22:A:PRO:HD2	3	0.74
(1,369)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB2	8	0.74
(1,272)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HE3	9	0.74
(1,168)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD2	6	0.74
(1,102)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:H	4	0.74
(1,102)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:H	6	0.74
(1,73)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	10	0.74
(1,73)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	10	0.74
(1,73)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	10	0.74
(1,19)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HB	6	0.74
(3,144)	1:5:A:VAL:HB	1:6:A:ARG:H	4	0.73
(3,144)	1:5:A:VAL:HB	1:6:A:ARG:H	6	0.73
(3,144)	1:5:A:VAL:HB	1:6:A:ARG:H	9	0.73
(3,119)	1:14:A:ASP:HA	1:16:A:GLY:H	9	0.73
(3,104)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	10	0.73
(3,26)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE2	9	0.73
(3,26)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE3	9	0.73
(3,26)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE2	10	0.73
(3,26)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE3	10	0.73
(2,444)	1:14:A:ASP:HB2	1:16:A:GLY:H	1	0.73
(2,256)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HE3	1	0.73
(2,137)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD2	3	0.73
(1,639)	1:14:A:ASP:HB2	1:16:A:GLY:H	1	0.73
(1,513)	1:5:A:VAL:HB	1:6:A:ARG:H	4	0.73
(1,513)	1:5:A:VAL:HB	1:6:A:ARG:H	6	0.73
(1,513)	1:5:A:VAL:HB	1:6:A:ARG:H	9	0.73
(1,448)	1:14:A:ASP:HA	1:16:A:GLY:H	9	0.73
(1,405)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	10	0.73
(1,331)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HE3	1	0.73
(1,168)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD2	3	0.73

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,126)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE2	9	0.73
(1,126)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE3	9	0.73
(1,126)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE2	10	0.73
(1,126)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE3	10	0.73
(3,179)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD11	7	0.72
(3,179)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD12	7	0.72
(3,179)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD13	7	0.72
(3,179)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	7	0.72
(3,179)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	7	0.72
(3,179)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	7	0.72
(3,154)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HB2	8	0.72
(3,144)	1:5:A:VAL:HB	1:6:A:ARG:H	8	0.72
(3,20)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD11	5	0.72
(3,20)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD12	5	0.72
(3,20)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD13	5	0.72
(2,367)	1:9:A:ILE:HG12	1:10:A:GLN:H	9	0.72
(2,267)	1:11:A:TRP:HZ3	1:17:A:PRO:HG2	3	0.72
(2,264)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	10	0.72
(2,256)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HE3	2	0.72
(2,256)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HE3	4	0.72
(2,256)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HE3	10	0.72
(2,181)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD3	8	0.72
(1,598)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD11	7	0.72
(1,598)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD12	7	0.72
(1,598)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD13	7	0.72
(1,598)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	7	0.72
(1,598)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	7	0.72
(1,598)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	7	0.72
(1,550)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HB2	8	0.72
(1,513)	1:5:A:VAL:HB	1:6:A:ARG:H	8	0.72
(1,509)	1:9:A:ILE:HG12	1:10:A:GLN:H	9	0.72
(1,351)	1:11:A:TRP:HZ3	1:17:A:PRO:HG2	3	0.72
(1,346)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	10	0.72
(1,331)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HE3	2	0.72
(1,331)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HE3	4	0.72
(1,331)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HE3	10	0.72
(1,217)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD3	8	0.72
(1,108)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD11	5	0.72
(1,108)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD12	5	0.72
(1,108)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD13	5	0.72
(3,179)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD11	1	0.71
(3,179)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD12	1	0.71

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,179)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD13	1	0.71
(3,179)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	1	0.71
(3,179)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	1	0.71
(3,179)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	1	0.71
(3,144)	1:5:A:VAL:HB	1:6:A:ARG:H	3	0.71
(3,92)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD11	1	0.71
(3,92)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD12	1	0.71
(3,92)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD13	1	0.71
(3,92)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD11	4	0.71
(3,92)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD12	4	0.71
(3,92)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD13	4	0.71
(3,92)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD11	6	0.71
(3,92)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD12	6	0.71
(3,92)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD13	6	0.71
(3,20)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD11	4	0.71
(3,20)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD12	4	0.71
(3,20)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD13	4	0.71
(3,15)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	8	0.71
(3,15)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	8	0.71
(3,15)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	8	0.71
(3,3)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HB	4	0.71
(2,473)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:HB2	3	0.71
(2,473)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:HB2	3	0.71
(2,468)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HB3	1	0.71
(2,468)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HB3	2	0.71
(2,468)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HB3	9	0.71
(2,444)	1:14:A:ASP:HB2	1:16:A:GLY:H	2	0.71
(2,264)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	8	0.71
(2,246)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD21	5	0.71
(2,246)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD22	5	0.71
(2,246)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD23	5	0.71
(2,246)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD21	5	0.71
(2,246)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD22	5	0.71
(2,246)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD23	5	0.71
(2,181)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD3	7	0.71
(2,181)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD3	9	0.71
(2,84)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:H	1	0.71
(1,682)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:HB2	3	0.71
(1,682)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:HB2	3	0.71
(1,669)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HB3	1	0.71
(1,669)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HB3	2	0.71
(1,669)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HB3	9	0.71

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,639)	1:14:A:ASP:HB2	1:16:A:GLY:H	2	0.71
(1,598)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD11	1	0.71
(1,598)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD12	1	0.71
(1,598)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD13	1	0.71
(1,598)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	1	0.71
(1,598)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	1	0.71
(1,598)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	1	0.71
(1,513)	1:5:A:VAL:HB	1:6:A:ARG:H	3	0.71
(1,366)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD11	1	0.71
(1,366)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD12	1	0.71
(1,366)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD13	1	0.71
(1,366)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD11	4	0.71
(1,366)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD12	4	0.71
(1,366)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD13	4	0.71
(1,366)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD11	6	0.71
(1,366)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD12	6	0.71
(1,366)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD13	6	0.71
(1,346)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	8	0.71
(1,316)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD21	5	0.71
(1,316)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD22	5	0.71
(1,316)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD23	5	0.71
(1,316)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD21	5	0.71
(1,316)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD22	5	0.71
(1,316)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD23	5	0.71
(1,217)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD3	7	0.71
(1,217)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD3	9	0.71
(1,108)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD11	4	0.71
(1,108)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD12	4	0.71
(1,108)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD13	4	0.71
(1,102)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:H	1	0.71
(1,73)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	8	0.71
(1,73)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	8	0.71
(1,73)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	8	0.71
(1,19)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HB	4	0.71
(3,144)	1:5:A:VAL:HB	1:6:A:ARG:H	10	0.7
(3,141)	1:4:A:ALA:HB1	1:6:A:ARG:H	3	0.7
(3,141)	1:4:A:ALA:HB2	1:6:A:ARG:H	3	0.7
(3,141)	1:4:A:ALA:HB3	1:6:A:ARG:H	3	0.7
(3,82)	1:11:A:TRP:HE3	1:16:A:GLY:HA2	8	0.7
(2,468)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HB3	3	0.7
(2,367)	1:9:A:ILE:HG12	1:10:A:GLN:H	8	0.7
(2,367)	1:9:A:ILE:HG12	1:10:A:GLN:H	10	0.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,84)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:H	2	0.7
(1,669)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HB3	3	0.7
(1,513)	1:5:A:VAL:HB	1:6:A:ARG:H	10	0.7
(1,509)	1:9:A:ILE:HG12	1:10:A:GLN:H	8	0.7
(1,509)	1:9:A:ILE:HG12	1:10:A:GLN:H	10	0.7
(1,504)	1:4:A:ALA:HB1	1:6:A:ARG:H	3	0.7
(1,504)	1:4:A:ALA:HB2	1:6:A:ARG:H	3	0.7
(1,504)	1:4:A:ALA:HB3	1:6:A:ARG:H	3	0.7
(1,343)	1:11:A:TRP:HE3	1:16:A:GLY:HA2	8	0.7
(1,102)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:H	2	0.7
(3,179)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD11	6	0.69
(3,179)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD12	6	0.69
(3,179)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD13	6	0.69
(3,179)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	6	0.69
(3,179)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	6	0.69
(3,179)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	6	0.69
(3,138)	1:12:A:LEU:HD21	1:14:A:ASP:H	6	0.69
(3,138)	1:12:A:LEU:HD22	1:14:A:ASP:H	6	0.69
(3,138)	1:12:A:LEU:HD23	1:14:A:ASP:H	6	0.69
(3,26)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE2	5	0.69
(3,26)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE3	5	0.69
(2,468)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HB3	7	0.69
(2,444)	1:14:A:ASP:HB2	1:16:A:GLY:H	4	0.69
(2,367)	1:9:A:ILE:HG12	1:10:A:GLN:H	7	0.69
(2,267)	1:11:A:TRP:HZ3	1:17:A:PRO:HG2	10	0.69
(2,264)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	2	0.69
(2,246)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD21	1	0.69
(2,246)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD22	1	0.69
(2,246)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD23	1	0.69
(2,246)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD21	1	0.69
(2,246)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD22	1	0.69
(2,246)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD23	1	0.69
(2,246)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD21	2	0.69
(2,246)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD22	2	0.69
(2,246)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD23	2	0.69
(2,246)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD21	2	0.69
(2,246)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD22	2	0.69
(2,246)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD23	2	0.69
(2,84)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:H	3	0.69
(1,669)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HB3	7	0.69
(1,639)	1:14:A:ASP:HB2	1:16:A:GLY:H	4	0.69
(1,598)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD11	6	0.69

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,598)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD12	6	0.69
(1,598)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD13	6	0.69
(1,598)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	6	0.69
(1,598)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	6	0.69
(1,598)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	6	0.69
(1,509)	1:9:A:ILE:HG12	1:10:A:GLN:H	7	0.69
(1,498)	1:12:A:LEU:HD21	1:14:A:ASP:H	6	0.69
(1,498)	1:12:A:LEU:HD22	1:14:A:ASP:H	6	0.69
(1,498)	1:12:A:LEU:HD23	1:14:A:ASP:H	6	0.69
(1,351)	1:11:A:TRP:HZ3	1:17:A:PRO:HG2	10	0.69
(1,346)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	2	0.69
(1,316)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD21	1	0.69
(1,316)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD22	1	0.69
(1,316)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD23	1	0.69
(1,316)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD21	1	0.69
(1,316)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD22	1	0.69
(1,316)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD23	1	0.69
(1,316)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD21	2	0.69
(1,316)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD22	2	0.69
(1,316)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD23	2	0.69
(1,316)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD21	2	0.69
(1,316)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD22	2	0.69
(1,316)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD23	2	0.69
(1,126)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE2	5	0.69
(1,126)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE3	5	0.69
(1,102)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:H	3	0.69
(3,179)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD11	2	0.68
(3,179)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD12	2	0.68
(3,179)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD13	2	0.68
(3,179)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	2	0.68
(3,179)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	2	0.68
(3,179)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	2	0.68
(3,179)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD11	5	0.68
(3,179)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD12	5	0.68
(3,179)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD13	5	0.68
(3,179)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	5	0.68
(3,179)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	5	0.68
(3,179)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	5	0.68
(3,141)	1:4:A:ALA:HB1	1:6:A:ARG:H	10	0.68
(3,141)	1:4:A:ALA:HB2	1:6:A:ARG:H	10	0.68
(3,141)	1:4:A:ALA:HB3	1:6:A:ARG:H	10	0.68
(3,20)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD11	1	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,20)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD12	1	0.68
(3,20)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD13	1	0.68
(3,20)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD11	2	0.68
(3,20)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD12	2	0.68
(3,20)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD13	2	0.68
(3,20)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD11	6	0.68
(3,20)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD12	6	0.68
(3,20)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD13	6	0.68
(3,15)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	7	0.68
(3,15)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	7	0.68
(3,15)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	7	0.68
(2,472)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HD2	10	0.68
(2,472)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HD2	10	0.68
(2,472)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HD2	10	0.68
(2,367)	1:9:A:ILE:HG12	1:10:A:GLN:H	3	0.68
(2,367)	1:9:A:ILE:HG12	1:10:A:GLN:H	6	0.68
(2,264)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	1	0.68
(2,246)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD21	4	0.68
(2,246)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD22	4	0.68
(2,246)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD23	4	0.68
(2,246)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD21	4	0.68
(2,246)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD22	4	0.68
(2,246)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD23	4	0.68
(2,195)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD2	2	0.68
(2,195)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD2	9	0.68
(1,678)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HD2	10	0.68
(1,678)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HD2	10	0.68
(1,678)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HD2	10	0.68
(1,598)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD11	2	0.68
(1,598)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD12	2	0.68
(1,598)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD13	2	0.68
(1,598)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	2	0.68
(1,598)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	2	0.68
(1,598)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	2	0.68
(1,598)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD11	5	0.68
(1,598)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD12	5	0.68
(1,598)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD13	5	0.68
(1,598)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	5	0.68
(1,598)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	5	0.68
(1,598)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	5	0.68
(1,509)	1:9:A:ILE:HG12	1:10:A:GLN:H	3	0.68
(1,509)	1:9:A:ILE:HG12	1:10:A:GLN:H	6	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,504)	1:4:A:ALA:HB1	1:6:A:ARG:H	10	0.68
(1,504)	1:4:A:ALA:HB2	1:6:A:ARG:H	10	0.68
(1,504)	1:4:A:ALA:HB3	1:6:A:ARG:H	10	0.68
(1,346)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	1	0.68
(1,316)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD21	4	0.68
(1,316)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD22	4	0.68
(1,316)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HD23	4	0.68
(1,316)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD21	4	0.68
(1,316)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD22	4	0.68
(1,316)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HD23	4	0.68
(1,235)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD2	2	0.68
(1,235)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD2	9	0.68
(1,108)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD11	1	0.68
(1,108)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD12	1	0.68
(1,108)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD13	1	0.68
(1,108)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD11	2	0.68
(1,108)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD12	2	0.68
(1,108)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD13	2	0.68
(1,108)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD11	6	0.68
(1,108)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD12	6	0.68
(1,108)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD13	6	0.68
(1,73)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD11	7	0.68
(1,73)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD12	7	0.68
(1,73)	1:9:A:ILE:HA	1:9:A:ILE:HD13	7	0.68
(3,131)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD11	3	0.67
(3,131)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD12	3	0.67
(3,131)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD13	3	0.67
(3,92)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD11	5	0.67
(3,92)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD12	5	0.67
(3,92)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD13	5	0.67
(3,3)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HB	3	0.67
(2,449)	1:15:A:GLY:HA2	1:16:A:GLY:H	5	0.67
(2,367)	1:9:A:ILE:HG12	1:10:A:GLN:H	1	0.67
(2,367)	1:9:A:ILE:HG12	1:10:A:GLN:H	2	0.67
(2,367)	1:9:A:ILE:HG12	1:10:A:GLN:H	4	0.67
(2,367)	1:9:A:ILE:HG12	1:10:A:GLN:H	5	0.67
(2,322)	1:21:A:ARG:HB3	1:22:A:PRO:HD2	4	0.67
(2,267)	1:11:A:TRP:HZ3	1:17:A:PRO:HG2	6	0.67
(2,264)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	9	0.67
(2,195)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD2	4	0.67
(2,195)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD2	5	0.67
(1,644)	1:15:A:GLY:HA2	1:16:A:GLY:H	5	0.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,509)	1:9:A:ILE:HG12	1:10:A:GLN:H	1	0.67
(1,509)	1:9:A:ILE:HG12	1:10:A:GLN:H	2	0.67
(1,509)	1:9:A:ILE:HG12	1:10:A:GLN:H	4	0.67
(1,509)	1:9:A:ILE:HG12	1:10:A:GLN:H	5	0.67
(1,477)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD11	3	0.67
(1,477)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD12	3	0.67
(1,477)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD13	3	0.67
(1,434)	1:21:A:ARG:HB3	1:22:A:PRO:HD2	4	0.67
(1,366)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD11	5	0.67
(1,366)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD12	5	0.67
(1,366)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD13	5	0.67
(1,351)	1:11:A:TRP:HZ3	1:17:A:PRO:HG2	6	0.67
(1,346)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	9	0.67
(1,235)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD2	4	0.67
(1,235)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD2	5	0.67
(1,19)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HB	3	0.67
(3,131)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD11	2	0.66
(3,131)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD12	2	0.66
(3,131)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD13	2	0.66
(3,62)	1:11:A:TRP:HD1	1:24:A:PRO:HD3	10	0.66
(3,3)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HB	8	0.66
(2,473)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:HB2	6	0.66
(2,473)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:HB2	6	0.66
(2,468)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HB3	8	0.66
(2,322)	1:21:A:ARG:HB3	1:22:A:PRO:HD2	1	0.66
(2,267)	1:11:A:TRP:HZ3	1:17:A:PRO:HG2	8	0.66
(2,264)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	4	0.66
(2,264)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	7	0.66
(1,682)	1:8:A:TYR:HD1	1:11:A:TRP:HB2	6	0.66
(1,682)	1:8:A:TYR:HD2	1:11:A:TRP:HB2	6	0.66
(1,669)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HB3	8	0.66
(1,477)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD11	2	0.66
(1,477)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD12	2	0.66
(1,477)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD13	2	0.66
(1,434)	1:21:A:ARG:HB3	1:22:A:PRO:HD2	1	0.66
(1,351)	1:11:A:TRP:HZ3	1:17:A:PRO:HG2	8	0.66
(1,346)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	4	0.66
(1,346)	1:11:A:TRP:HZ2	1:17:A:PRO:HB2	7	0.66
(1,295)	1:11:A:TRP:HD1	1:24:A:PRO:HD3	10	0.66
(1,19)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HB	8	0.66
(3,141)	1:4:A:ALA:HB1	1:6:A:ARG:H	8	0.65
(3,141)	1:4:A:ALA:HB2	1:6:A:ARG:H	8	0.65

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,141)	1:4:A:ALA:HB3	1:6:A:ARG:H	8	0.65
(3,131)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD11	1	0.65
(3,131)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD12	1	0.65
(3,131)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD13	1	0.65
(3,131)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD11	4	0.65
(3,131)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD12	4	0.65
(3,131)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD13	4	0.65
(3,131)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD11	5	0.65
(3,131)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD12	5	0.65
(3,131)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD13	5	0.65
(3,20)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD11	3	0.65
(3,20)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD12	3	0.65
(3,20)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD13	3	0.65
(3,17)	1:10:A:GLN:HE22	1:10:A:GLN:HG2	6	0.65
(3,17)	1:10:A:GLN:HE22	1:10:A:GLN:HG3	6	0.65
(3,3)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HB	10	0.65
(2,322)	1:21:A:ARG:HB3	1:22:A:PRO:HD2	2	0.65
(2,267)	1:11:A:TRP:HZ3	1:17:A:PRO:HG2	5	0.65
(2,195)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD2	6	0.65
(1,504)	1:4:A:ALA:HB1	1:6:A:ARG:H	8	0.65
(1,504)	1:4:A:ALA:HB2	1:6:A:ARG:H	8	0.65
(1,504)	1:4:A:ALA:HB3	1:6:A:ARG:H	8	0.65
(1,477)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD11	1	0.65
(1,477)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD12	1	0.65
(1,477)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD13	1	0.65
(1,477)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD11	4	0.65
(1,477)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD12	4	0.65
(1,477)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD13	4	0.65
(1,477)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD11	5	0.65
(1,477)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD12	5	0.65
(1,477)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD13	5	0.65
(1,434)	1:21:A:ARG:HB3	1:22:A:PRO:HD2	2	0.65
(1,351)	1:11:A:TRP:HZ3	1:17:A:PRO:HG2	5	0.65
(1,235)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD2	6	0.65
(1,108)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD11	3	0.65
(1,108)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD12	3	0.65
(1,108)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD13	3	0.65
(1,88)	1:10:A:GLN:HE22	1:10:A:GLN:HG2	6	0.65
(1,88)	1:10:A:GLN:HE22	1:10:A:GLN:HG3	6	0.65
(1,19)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HB	10	0.65
(3,179)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD11	4	0.64
(3,179)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD12	4	0.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,179)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD13	4	0.64
(3,179)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	4	0.64
(3,179)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	4	0.64
(3,179)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	4	0.64
(3,94)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB2	7	0.64
(3,81)	1:11:A:TRP:HZ2	1:16:A:GLY:HA2	8	0.64
(3,62)	1:11:A:TRP:HD1	1:24:A:PRO:HD3	8	0.64
(3,37)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD2	7	0.64
(3,17)	1:10:A:GLN:HE22	1:10:A:GLN:HG2	4	0.64
(3,17)	1:10:A:GLN:HE22	1:10:A:GLN:HG3	4	0.64
(3,17)	1:10:A:GLN:HE22	1:10:A:GLN:HG2	5	0.64
(3,17)	1:10:A:GLN:HE22	1:10:A:GLN:HG3	5	0.64
(2,195)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD2	1	0.64
(2,195)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD2	10	0.64
(2,192)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HD2	1	0.64
(2,192)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HD2	6	0.64
(2,192)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HD2	9	0.64
(2,154)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD3	8	0.64
(1,598)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD11	4	0.64
(1,598)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD12	4	0.64
(1,598)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD13	4	0.64
(1,598)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	4	0.64
(1,598)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	4	0.64
(1,598)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	4	0.64
(1,369)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB2	7	0.64
(1,341)	1:11:A:TRP:HZ2	1:16:A:GLY:HA2	8	0.64
(1,295)	1:11:A:TRP:HD1	1:24:A:PRO:HD3	8	0.64
(1,235)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD2	1	0.64
(1,235)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD2	10	0.64
(1,230)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HD2	1	0.64
(1,230)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HD2	6	0.64
(1,230)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HD2	9	0.64
(1,220)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD2	7	0.64
(1,187)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD3	8	0.64
(1,88)	1:10:A:GLN:HE22	1:10:A:GLN:HG2	4	0.64
(1,88)	1:10:A:GLN:HE22	1:10:A:GLN:HG3	4	0.64
(1,88)	1:10:A:GLN:HE22	1:10:A:GLN:HG2	5	0.64
(1,88)	1:10:A:GLN:HE22	1:10:A:GLN:HG3	5	0.64
(3,179)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD11	9	0.63
(3,179)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD12	9	0.63
(3,179)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD13	9	0.63
(3,179)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	9	0.63

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,179)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	9	0.63
(3,179)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	9	0.63
(3,131)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD11	6	0.63
(3,131)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD12	6	0.63
(3,131)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD13	6	0.63
(3,126)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HB2	9	0.63
(3,94)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB2	3	0.63
(3,37)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD2	9	0.63
(3,17)	1:10:A:GLN:HE22	1:10:A:GLN:HG2	1	0.63
(3,17)	1:10:A:GLN:HE22	1:10:A:GLN:HG3	1	0.63
(3,17)	1:10:A:GLN:HE22	1:10:A:GLN:HG2	2	0.63
(3,17)	1:10:A:GLN:HE22	1:10:A:GLN:HG3	2	0.63
(3,17)	1:10:A:GLN:HE22	1:10:A:GLN:HG2	10	0.63
(3,17)	1:10:A:GLN:HE22	1:10:A:GLN:HG3	10	0.63
(2,468)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HB3	10	0.63
(2,195)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD2	3	0.63
(2,195)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD2	8	0.63
(2,192)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HD2	2	0.63
(2,192)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HD2	4	0.63
(2,192)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HD2	5	0.63
(1,669)	1:7:A:LEU:HB3	1:24:A:PRO:HB3	10	0.63
(1,598)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD11	9	0.63
(1,598)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD12	9	0.63
(1,598)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD13	9	0.63
(1,598)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	9	0.63
(1,598)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	9	0.63
(1,598)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	9	0.63
(1,477)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD11	6	0.63
(1,477)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD12	6	0.63
(1,477)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD13	6	0.63
(1,466)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HB2	9	0.63
(1,369)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB2	3	0.63
(1,235)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD2	3	0.63
(1,235)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD2	8	0.63
(1,230)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HD2	2	0.63
(1,230)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HD2	4	0.63
(1,230)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HD2	5	0.63
(1,220)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD2	9	0.63
(1,88)	1:10:A:GLN:HE22	1:10:A:GLN:HG2	1	0.63
(1,88)	1:10:A:GLN:HE22	1:10:A:GLN:HG3	1	0.63
(1,88)	1:10:A:GLN:HE22	1:10:A:GLN:HG2	2	0.63
(1,88)	1:10:A:GLN:HE22	1:10:A:GLN:HG3	2	0.63

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,88)	1:10:A:GLN:HE22	1:10:A:GLN:HG2	10	0.63
(1,88)	1:10:A:GLN:HE22	1:10:A:GLN:HG3	10	0.63
(3,127)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:H	4	0.62
(3,81)	1:11:A:TRP:HZ2	1:16:A:GLY:HA2	6	0.62
(3,17)	1:10:A:GLN:HE22	1:10:A:GLN:HG2	3	0.62
(3,17)	1:10:A:GLN:HE22	1:10:A:GLN:HG3	3	0.62
(3,17)	1:10:A:GLN:HE22	1:10:A:GLN:HG2	9	0.62
(3,17)	1:10:A:GLN:HE22	1:10:A:GLN:HG3	9	0.62
(3,16)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG2	1	0.62
(3,16)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	1	0.62
(2,195)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD2	7	0.62
(2,192)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HD2	3	0.62
(2,192)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HD2	7	0.62
(2,192)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HD2	8	0.62
(1,468)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:H	4	0.62
(1,341)	1:11:A:TRP:HZ2	1:16:A:GLY:HA2	6	0.62
(1,235)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HD2	7	0.62
(1,230)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HD2	3	0.62
(1,230)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HD2	7	0.62
(1,230)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HD2	8	0.62
(1,88)	1:10:A:GLN:HE22	1:10:A:GLN:HG2	3	0.62
(1,88)	1:10:A:GLN:HE22	1:10:A:GLN:HG3	3	0.62
(1,88)	1:10:A:GLN:HE22	1:10:A:GLN:HG2	9	0.62
(1,88)	1:10:A:GLN:HE22	1:10:A:GLN:HG3	9	0.62
(1,82)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG2	1	0.62
(1,82)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	1	0.62
(3,187)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG13	9	0.61
(3,187)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG13	9	0.61
(3,187)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG13	9	0.61
(3,187)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG13	10	0.61
(3,187)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG13	10	0.61
(3,187)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG13	10	0.61
(3,81)	1:11:A:TRP:HZ2	1:16:A:GLY:HA2	3	0.61
(3,37)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD2	8	0.61
(3,17)	1:10:A:GLN:HE22	1:10:A:GLN:HG2	7	0.61
(3,17)	1:10:A:GLN:HE22	1:10:A:GLN:HG3	7	0.61
(3,17)	1:10:A:GLN:HE22	1:10:A:GLN:HG2	8	0.61
(3,17)	1:10:A:GLN:HE22	1:10:A:GLN:HG3	8	0.61
(3,16)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG2	5	0.61
(3,16)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	5	0.61
(3,16)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG2	6	0.61
(3,16)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	6	0.61

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,256)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HE3	7	0.61
(2,256)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HE3	9	0.61
(2,192)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HD2	10	0.61
(2,181)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD3	3	0.61
(1,618)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG13	9	0.61
(1,618)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG13	9	0.61
(1,618)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG13	9	0.61
(1,618)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG13	10	0.61
(1,618)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG13	10	0.61
(1,618)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG13	10	0.61
(1,341)	1:11:A:TRP:HZ2	1:16:A:GLY:HA2	3	0.61
(1,331)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HE3	7	0.61
(1,331)	1:11:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:HE3	9	0.61
(1,230)	1:24:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HD2	10	0.61
(1,220)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD2	8	0.61
(1,217)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD3	3	0.61
(1,88)	1:10:A:GLN:HE22	1:10:A:GLN:HG2	7	0.61
(1,88)	1:10:A:GLN:HE22	1:10:A:GLN:HG3	7	0.61
(1,88)	1:10:A:GLN:HE22	1:10:A:GLN:HG2	8	0.61
(1,88)	1:10:A:GLN:HE22	1:10:A:GLN:HG3	8	0.61
(1,82)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG2	5	0.61
(1,82)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	5	0.61
(1,82)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG2	6	0.61
(1,82)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	6	0.61
(3,62)	1:11:A:TRP:HD1	1:24:A:PRO:HD3	9	0.6
(3,37)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD2	10	0.6
(3,16)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG2	2	0.6
(3,16)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	2	0.6
(2,181)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD3	1	0.6
(1,295)	1:11:A:TRP:HD1	1:24:A:PRO:HD3	9	0.6
(1,220)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD2	10	0.6
(1,217)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD3	1	0.6
(1,82)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG2	2	0.6
(1,82)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	2	0.6
(3,187)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG13	8	0.59
(3,187)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG13	8	0.59
(3,187)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG13	8	0.59
(3,80)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HD3	4	0.59
(2,329)	1:22:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD3	9	0.59
(2,239)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HG	8	0.59
(2,239)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HG	8	0.59
(2,239)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HG	10	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,239)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HG	10	0.59
(2,181)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD3	2	0.59
(2,181)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD3	4	0.59
(2,181)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD3	10	0.59
(2,154)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD3	7	0.59
(2,104)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HE2	5	0.59
(2,104)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HE3	5	0.59
(2,104)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HE3	5	0.59
(1,618)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG13	8	0.59
(1,618)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG13	8	0.59
(1,618)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG13	8	0.59
(1,447)	1:22:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD3	9	0.59
(1,339)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HD3	4	0.59
(1,306)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HG	8	0.59
(1,306)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HG	8	0.59
(1,306)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HG	10	0.59
(1,306)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HG	10	0.59
(1,217)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD3	2	0.59
(1,217)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD3	4	0.59
(1,217)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD3	10	0.59
(1,187)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD3	7	0.59
(1,131)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HE2	5	0.59
(1,131)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HE3	5	0.59
(1,131)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HE3	5	0.59
(3,80)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HD3	1	0.58
(3,37)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD2	2	0.58
(3,37)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD2	3	0.58
(3,16)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG2	3	0.58
(3,16)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	3	0.58
(3,12)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD21	3	0.58
(3,12)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD22	3	0.58
(3,12)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD23	3	0.58
(2,410)	1:23:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HD3	8	0.58
(2,329)	1:22:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD3	7	0.58
(2,329)	1:22:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD3	8	0.58
(2,283)	1:11:A:TRP:HE1	1:23:A:PRO:HD2	6	0.58
(2,154)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD3	4	0.58
(2,154)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD3	10	0.58
(1,570)	1:23:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HD3	8	0.58
(1,447)	1:22:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD3	7	0.58
(1,447)	1:22:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD3	8	0.58
(1,380)	1:11:A:TRP:HE1	1:23:A:PRO:HD2	6	0.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,339)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HD3	1	0.58
(1,220)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD2	2	0.58
(1,220)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD2	3	0.58
(1,187)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD3	4	0.58
(1,187)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD3	10	0.58
(1,82)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG2	3	0.58
(1,82)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	3	0.58
(1,59)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD21	3	0.58
(1,59)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD22	3	0.58
(1,59)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD23	3	0.58
(3,62)	1:11:A:TRP:HD1	1:24:A:PRO:HD3	7	0.57
(3,37)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD2	1	0.57
(3,37)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD2	4	0.57
(2,154)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD3	9	0.57
(2,104)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HE2	1	0.57
(2,104)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HE3	1	0.57
(2,104)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HE3	1	0.57
(2,104)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HE2	10	0.57
(2,104)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HE3	10	0.57
(2,104)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HE3	10	0.57
(1,295)	1:11:A:TRP:HD1	1:24:A:PRO:HD3	7	0.57
(1,220)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD2	1	0.57
(1,220)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD2	4	0.57
(1,187)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD3	9	0.57
(1,131)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HE2	1	0.57
(1,131)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HE3	1	0.57
(1,131)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HE3	1	0.57
(1,131)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HE2	10	0.57
(1,131)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HE3	10	0.57
(1,131)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HE3	10	0.57
(3,181)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:HD21	8	0.56
(3,181)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:HD22	8	0.56
(3,181)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:HD23	8	0.56
(3,133)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:H	7	0.56
(3,127)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:H	2	0.56
(3,127)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:H	5	0.56
(3,127)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:H	9	0.56
(3,94)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB2	10	0.56
(3,80)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HD3	2	0.56
(3,80)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HD3	10	0.56
(3,16)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG2	9	0.56
(3,16)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	9	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,16)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG2	10	0.56
(3,16)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	10	0.56
(3,12)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD21	8	0.56
(3,12)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD22	8	0.56
(3,12)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD23	8	0.56
(2,410)	1:23:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HD3	1	0.56
(2,301)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HB2	6	0.56
(2,133)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG2	5	0.56
(1,603)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:HD21	8	0.56
(1,603)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:HD22	8	0.56
(1,603)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:HD23	8	0.56
(1,570)	1:23:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HD3	1	0.56
(1,481)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:H	7	0.56
(1,468)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:H	2	0.56
(1,468)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:H	5	0.56
(1,468)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:H	9	0.56
(1,404)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HB2	6	0.56
(1,369)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB2	10	0.56
(1,339)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HD3	2	0.56
(1,339)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HD3	10	0.56
(1,164)	1:17:A:PRO:HA	1:17:A:PRO:HG2	5	0.56
(1,82)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG2	9	0.56
(1,82)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	9	0.56
(1,82)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG2	10	0.56
(1,82)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	10	0.56
(1,59)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD21	8	0.56
(1,59)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD22	8	0.56
(1,59)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD23	8	0.56
(3,187)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG13	6	0.55
(3,187)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG13	6	0.55
(3,187)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG13	6	0.55
(3,133)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:H	8	0.55
(3,127)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:H	1	0.55
(3,127)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:H	6	0.55
(3,127)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:H	7	0.55
(3,124)	1:9:A:ILE:H	1:10:A:GLN:HB3	9	0.55
(3,104)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	5	0.55
(3,94)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB2	1	0.55
(3,94)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB2	9	0.55
(3,68)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	7	0.55
(3,68)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	7	0.55
(3,68)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	7	0.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,68)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	7	0.55
(3,68)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	7	0.55
(3,68)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	7	0.55
(3,26)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE2	7	0.55
(3,26)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE3	7	0.55
(3,16)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG2	4	0.55
(3,16)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	4	0.55
(3,12)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD21	6	0.55
(3,12)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD22	6	0.55
(3,12)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD23	6	0.55
(2,358)	1:7:A:LEU:HB3	1:8:A:TYR:H	3	0.55
(2,301)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HB2	5	0.55
(2,283)	1:11:A:TRP:HE1	1:23:A:PRO:HD2	3	0.55
(1,618)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG13	6	0.55
(1,618)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG13	6	0.55
(1,618)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG13	6	0.55
(1,493)	1:7:A:LEU:HB3	1:8:A:TYR:H	3	0.55
(1,481)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:H	8	0.55
(1,468)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:H	1	0.55
(1,468)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:H	6	0.55
(1,468)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:H	7	0.55
(1,461)	1:9:A:ILE:H	1:10:A:GLN:HB3	9	0.55
(1,405)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	5	0.55
(1,404)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HB2	5	0.55
(1,380)	1:11:A:TRP:HE1	1:23:A:PRO:HD2	3	0.55
(1,369)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB2	1	0.55
(1,369)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB2	9	0.55
(1,311)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	7	0.55
(1,311)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	7	0.55
(1,311)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	7	0.55
(1,311)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	7	0.55
(1,311)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	7	0.55
(1,311)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	7	0.55
(1,126)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE2	7	0.55
(1,126)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE3	7	0.55
(1,82)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG2	4	0.55
(1,82)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	4	0.55
(1,59)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD21	6	0.55
(1,59)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD22	6	0.55
(1,59)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD23	6	0.55
(3,142)	1:13:A:LYS:HD2	1:14:A:ASP:H	6	0.54
(3,142)	1:13:A:LYS:HD3	1:14:A:ASP:H	6	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,127)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:H	3	0.54
(3,106)	1:13:A:LYS:HB2	1:14:A:ASP:HA	3	0.54
(3,106)	1:13:A:LYS:HB3	1:14:A:ASP:HA	3	0.54
(3,94)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB2	6	0.54
(3,62)	1:11:A:TRP:HD1	1:24:A:PRO:HD3	2	0.54
(3,26)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE2	2	0.54
(3,26)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE3	2	0.54
(3,16)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG2	7	0.54
(3,16)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	7	0.54
(3,16)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG2	8	0.54
(3,16)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	8	0.54
(3,12)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD21	5	0.54
(3,12)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD22	5	0.54
(3,12)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD23	5	0.54
(2,444)	1:14:A:ASP:HB2	1:16:A:GLY:H	5	0.54
(2,410)	1:23:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HD3	3	0.54
(2,410)	1:23:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HD3	7	0.54
(2,358)	1:7:A:LEU:HB3	1:8:A:TYR:H	5	0.54
(2,358)	1:7:A:LEU:HB3	1:8:A:TYR:H	6	0.54
(2,180)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD2	2	0.54
(2,154)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD3	1	0.54
(2,154)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD3	3	0.54
(2,104)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HE2	3	0.54
(2,104)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HE3	3	0.54
(2,104)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HE3	3	0.54
(2,104)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HE2	8	0.54
(2,104)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HE3	8	0.54
(2,104)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HE3	8	0.54
(1,639)	1:14:A:ASP:HB2	1:16:A:GLY:H	5	0.54
(1,570)	1:23:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HD3	3	0.54
(1,570)	1:23:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HD3	7	0.54
(1,507)	1:13:A:LYS:HD2	1:14:A:ASP:H	6	0.54
(1,507)	1:13:A:LYS:HD3	1:14:A:ASP:H	6	0.54
(1,493)	1:7:A:LEU:HB3	1:8:A:TYR:H	5	0.54
(1,493)	1:7:A:LEU:HB3	1:8:A:TYR:H	6	0.54
(1,468)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:H	3	0.54
(1,407)	1:13:A:LYS:HB2	1:14:A:ASP:HA	3	0.54
(1,407)	1:13:A:LYS:HB3	1:14:A:ASP:HA	3	0.54
(1,369)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB2	6	0.54
(1,295)	1:11:A:TRP:HD1	1:24:A:PRO:HD3	2	0.54
(1,216)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD2	2	0.54
(1,187)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD3	1	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,187)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD3	3	0.54
(1,131)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HE2	3	0.54
(1,131)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HE3	3	0.54
(1,131)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HE3	3	0.54
(1,131)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HE2	8	0.54
(1,131)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HE3	8	0.54
(1,131)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HE3	8	0.54
(1,126)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE2	2	0.54
(1,126)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE3	2	0.54
(1,82)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG2	7	0.54
(1,82)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	7	0.54
(1,82)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG2	8	0.54
(1,82)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HG3	8	0.54
(1,59)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD21	5	0.54
(1,59)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD22	5	0.54
(1,59)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD23	5	0.54
(3,187)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG13	3	0.53
(3,187)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG13	3	0.53
(3,187)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG13	3	0.53
(3,141)	1:4:A:ALA:HB1	1:6:A:ARG:H	4	0.53
(3,141)	1:4:A:ALA:HB2	1:6:A:ARG:H	4	0.53
(3,141)	1:4:A:ALA:HB3	1:6:A:ARG:H	4	0.53
(3,138)	1:12:A:LEU:HD21	1:14:A:ASP:H	10	0.53
(3,138)	1:12:A:LEU:HD22	1:14:A:ASP:H	10	0.53
(3,138)	1:12:A:LEU:HD23	1:14:A:ASP:H	10	0.53
(3,133)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:H	9	0.53
(3,131)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD11	9	0.53
(3,131)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD12	9	0.53
(3,131)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD13	9	0.53
(3,94)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB2	2	0.53
(3,82)	1:11:A:TRP:HE3	1:16:A:GLY:HA2	3	0.53
(3,81)	1:11:A:TRP:HZ2	1:16:A:GLY:HA2	5	0.53
(3,12)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD21	1	0.53
(3,12)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD22	1	0.53
(3,12)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD23	1	0.53
(3,12)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD21	2	0.53
(3,12)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD22	2	0.53
(3,12)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD23	2	0.53
(3,12)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD21	4	0.53
(3,12)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD22	4	0.53
(3,12)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD23	4	0.53
(2,410)	1:23:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HD3	4	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,410)	1:23:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HD3	5	0.53
(2,410)	1:23:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HD3	10	0.53
(2,358)	1:7:A:LEU:HB3	1:8:A:TYR:H	1	0.53
(2,358)	1:7:A:LEU:HB3	1:8:A:TYR:H	2	0.53
(2,358)	1:7:A:LEU:HB3	1:8:A:TYR:H	4	0.53
(2,249)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB2	4	0.53
(2,249)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB2	4	0.53
(2,180)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD2	4	0.53
(2,104)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HE2	9	0.53
(2,104)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HE3	9	0.53
(2,104)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HE3	9	0.53
(1,618)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG13	3	0.53
(1,618)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG13	3	0.53
(1,618)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG13	3	0.53
(1,570)	1:23:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HD3	4	0.53
(1,570)	1:23:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HD3	5	0.53
(1,570)	1:23:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HD3	10	0.53
(1,504)	1:4:A:ALA:HB1	1:6:A:ARG:H	4	0.53
(1,504)	1:4:A:ALA:HB2	1:6:A:ARG:H	4	0.53
(1,504)	1:4:A:ALA:HB3	1:6:A:ARG:H	4	0.53
(1,498)	1:12:A:LEU:HD21	1:14:A:ASP:H	10	0.53
(1,498)	1:12:A:LEU:HD22	1:14:A:ASP:H	10	0.53
(1,498)	1:12:A:LEU:HD23	1:14:A:ASP:H	10	0.53
(1,493)	1:7:A:LEU:HB3	1:8:A:TYR:H	1	0.53
(1,493)	1:7:A:LEU:HB3	1:8:A:TYR:H	2	0.53
(1,493)	1:7:A:LEU:HB3	1:8:A:TYR:H	4	0.53
(1,481)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:H	9	0.53
(1,477)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD11	9	0.53
(1,477)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD12	9	0.53
(1,477)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD13	9	0.53
(1,369)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB2	2	0.53
(1,343)	1:11:A:TRP:HE3	1:16:A:GLY:HA2	3	0.53
(1,341)	1:11:A:TRP:HZ2	1:16:A:GLY:HA2	5	0.53
(1,321)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB2	4	0.53
(1,321)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB2	4	0.53
(1,216)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD2	4	0.53
(1,131)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HE2	9	0.53
(1,131)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HE3	9	0.53
(1,131)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HE3	9	0.53
(1,59)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD21	1	0.53
(1,59)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD22	1	0.53
(1,59)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD23	1	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,59)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD21	2	0.53
(1,59)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD22	2	0.53
(1,59)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD23	2	0.53
(1,59)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD21	4	0.53
(1,59)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD22	4	0.53
(1,59)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD23	4	0.53
(3,187)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG13	4	0.52
(3,187)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG13	4	0.52
(3,187)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG13	4	0.52
(3,181)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:HD21	10	0.52
(3,181)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:HD22	10	0.52
(3,181)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:HD23	10	0.52
(3,168)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD21	3	0.52
(3,168)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD22	3	0.52
(3,168)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD23	3	0.52
(3,142)	1:13:A:LYS:HD2	1:14:A:ASP:H	4	0.52
(3,142)	1:13:A:LYS:HD3	1:14:A:ASP:H	4	0.52
(3,141)	1:4:A:ALA:HB1	1:6:A:ARG:H	1	0.52
(3,141)	1:4:A:ALA:HB2	1:6:A:ARG:H	1	0.52
(3,141)	1:4:A:ALA:HB3	1:6:A:ARG:H	1	0.52
(3,141)	1:4:A:ALA:HB1	1:6:A:ARG:H	2	0.52
(3,141)	1:4:A:ALA:HB2	1:6:A:ARG:H	2	0.52
(3,141)	1:4:A:ALA:HB3	1:6:A:ARG:H	2	0.52
(3,141)	1:4:A:ALA:HB1	1:6:A:ARG:H	5	0.52
(3,141)	1:4:A:ALA:HB2	1:6:A:ARG:H	5	0.52
(3,141)	1:4:A:ALA:HB3	1:6:A:ARG:H	5	0.52
(3,141)	1:4:A:ALA:HB1	1:6:A:ARG:H	6	0.52
(3,141)	1:4:A:ALA:HB2	1:6:A:ARG:H	6	0.52
(3,141)	1:4:A:ALA:HB3	1:6:A:ARG:H	6	0.52
(3,141)	1:4:A:ALA:HB1	1:6:A:ARG:H	7	0.52
(3,141)	1:4:A:ALA:HB2	1:6:A:ARG:H	7	0.52
(3,141)	1:4:A:ALA:HB3	1:6:A:ARG:H	7	0.52
(3,141)	1:4:A:ALA:HB1	1:6:A:ARG:H	9	0.52
(3,141)	1:4:A:ALA:HB2	1:6:A:ARG:H	9	0.52
(3,141)	1:4:A:ALA:HB3	1:6:A:ARG:H	9	0.52
(3,127)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:H	10	0.52
(3,126)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HB2	5	0.52
(3,105)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG3	1	0.52
(3,105)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG3	4	0.52
(3,102)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:HD1	9	0.52
(3,102)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:HD2	9	0.52
(3,68)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	3	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,68)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	3	0.52
(3,68)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	3	0.52
(3,68)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	3	0.52
(3,68)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	3	0.52
(3,68)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	3	0.52
(3,55)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HD2	3	0.52
(3,46)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG2	6	0.52
(3,26)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE2	3	0.52
(3,26)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE3	3	0.52
(3,12)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD21	7	0.52
(3,12)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD22	7	0.52
(3,12)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD23	7	0.52
(3,12)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD21	10	0.52
(3,12)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD22	10	0.52
(3,12)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD23	10	0.52
(2,410)	1:23:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HD3	6	0.52
(2,180)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD2	1	0.52
(2,180)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD2	10	0.52
(1,618)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG13	4	0.52
(1,618)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG13	4	0.52
(1,618)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG13	4	0.52
(1,603)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:HD21	10	0.52
(1,603)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:HD22	10	0.52
(1,603)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:HD23	10	0.52
(1,581)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD21	3	0.52
(1,581)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD22	3	0.52
(1,581)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD23	3	0.52
(1,570)	1:23:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HD3	6	0.52
(1,507)	1:13:A:LYS:HD2	1:14:A:ASP:H	4	0.52
(1,507)	1:13:A:LYS:HD3	1:14:A:ASP:H	4	0.52
(1,504)	1:4:A:ALA:HB1	1:6:A:ARG:H	1	0.52
(1,504)	1:4:A:ALA:HB2	1:6:A:ARG:H	1	0.52
(1,504)	1:4:A:ALA:HB3	1:6:A:ARG:H	1	0.52
(1,504)	1:4:A:ALA:HB1	1:6:A:ARG:H	2	0.52
(1,504)	1:4:A:ALA:HB2	1:6:A:ARG:H	2	0.52
(1,504)	1:4:A:ALA:HB3	1:6:A:ARG:H	2	0.52
(1,504)	1:4:A:ALA:HB1	1:6:A:ARG:H	5	0.52
(1,504)	1:4:A:ALA:HB2	1:6:A:ARG:H	5	0.52
(1,504)	1:4:A:ALA:HB3	1:6:A:ARG:H	5	0.52
(1,504)	1:4:A:ALA:HB1	1:6:A:ARG:H	6	0.52
(1,504)	1:4:A:ALA:HB2	1:6:A:ARG:H	6	0.52
(1,504)	1:4:A:ALA:HB3	1:6:A:ARG:H	6	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,504)	1:4:A:ALA:HB1	1:6:A:ARG:H	7	0.52
(1,504)	1:4:A:ALA:HB2	1:6:A:ARG:H	7	0.52
(1,504)	1:4:A:ALA:HB3	1:6:A:ARG:H	7	0.52
(1,504)	1:4:A:ALA:HB1	1:6:A:ARG:H	9	0.52
(1,504)	1:4:A:ALA:HB2	1:6:A:ARG:H	9	0.52
(1,504)	1:4:A:ALA:HB3	1:6:A:ARG:H	9	0.52
(1,468)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:H	10	0.52
(1,466)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HB2	5	0.52
(1,406)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG3	1	0.52
(1,406)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG3	4	0.52
(1,402)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:HD1	9	0.52
(1,402)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:HD2	9	0.52
(1,311)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	3	0.52
(1,311)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	3	0.52
(1,311)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	3	0.52
(1,311)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	3	0.52
(1,311)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	3	0.52
(1,311)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	3	0.52
(1,277)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HD2	3	0.52
(1,259)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG2	6	0.52
(1,216)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD2	1	0.52
(1,216)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD2	10	0.52
(1,126)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE2	3	0.52
(1,126)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE3	3	0.52
(1,59)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD21	7	0.52
(1,59)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD22	7	0.52
(1,59)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD23	7	0.52
(1,59)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD21	10	0.52
(1,59)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD22	10	0.52
(1,59)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD23	10	0.52
(3,208)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD11	4	0.51
(3,208)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD12	4	0.51
(3,208)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD13	4	0.51
(3,208)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD11	6	0.51
(3,208)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD12	6	0.51
(3,208)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD13	6	0.51
(3,187)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG13	5	0.51
(3,187)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG13	5	0.51
(3,187)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG13	5	0.51
(3,187)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG13	7	0.51
(3,187)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG13	7	0.51
(3,187)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG13	7	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,138)	1:12:A:LEU:HD21	1:14:A:ASP:H	7	0.51
(3,138)	1:12:A:LEU:HD22	1:14:A:ASP:H	7	0.51
(3,138)	1:12:A:LEU:HD23	1:14:A:ASP:H	7	0.51
(3,133)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:H	3	0.51
(3,133)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:H	10	0.51
(3,132)	1:10:A:GLN:HB3	1:12:A:LEU:H	7	0.51
(3,131)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD11	8	0.51
(3,131)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD12	8	0.51
(3,131)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD13	8	0.51
(3,126)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HB2	4	0.51
(3,112)	1:21:A:ARG:HG2	1:22:A:PRO:HD3	8	0.51
(3,105)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG3	3	0.51
(3,94)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB2	4	0.51
(3,68)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	9	0.51
(3,68)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	9	0.51
(3,68)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	9	0.51
(3,68)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	9	0.51
(3,68)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	9	0.51
(3,68)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	9	0.51
(3,67)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HG	4	0.51
(3,67)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HG	4	0.51
(3,62)	1:11:A:TRP:HD1	1:24:A:PRO:HD3	1	0.51
(3,46)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG2	10	0.51
(3,24)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD11	7	0.51
(3,24)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD12	7	0.51
(3,24)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD13	7	0.51
(3,24)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD11	9	0.51
(3,24)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD12	9	0.51
(3,24)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD13	9	0.51
(3,12)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD21	9	0.51
(3,12)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD22	9	0.51
(3,12)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD23	9	0.51
(3,4)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	3	0.51
(3,4)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	3	0.51
(3,4)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	3	0.51
(3,4)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	8	0.51
(3,4)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	8	0.51
(3,4)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	8	0.51
(3,4)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	9	0.51
(3,4)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	9	0.51
(3,4)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	9	0.51
(3,4)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	10	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,4)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	10	0.51
(3,4)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	10	0.51
(2,283)	1:11:A:TRP:HE1	1:23:A:PRO:HD2	7	0.51
(2,180)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD2	3	0.51
(2,104)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HE2	4	0.51
(2,104)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HE3	4	0.51
(2,104)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HE3	4	0.51
(2,104)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HE2	6	0.51
(2,104)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HE3	6	0.51
(2,104)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HE3	6	0.51
(1,680)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD11	4	0.51
(1,680)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD12	4	0.51
(1,680)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD13	4	0.51
(1,680)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD11	6	0.51
(1,680)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD12	6	0.51
(1,680)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD13	6	0.51
(1,618)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG13	5	0.51
(1,618)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG13	5	0.51
(1,618)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG13	5	0.51
(1,618)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG13	7	0.51
(1,618)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG13	7	0.51
(1,618)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG13	7	0.51
(1,498)	1:12:A:LEU:HD21	1:14:A:ASP:H	7	0.51
(1,498)	1:12:A:LEU:HD22	1:14:A:ASP:H	7	0.51
(1,498)	1:12:A:LEU:HD23	1:14:A:ASP:H	7	0.51
(1,481)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:H	3	0.51
(1,481)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:H	10	0.51
(1,479)	1:10:A:GLN:HB3	1:12:A:LEU:H	7	0.51
(1,477)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD11	8	0.51
(1,477)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD12	8	0.51
(1,477)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD13	8	0.51
(1,466)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HB2	4	0.51
(1,431)	1:21:A:ARG:HG2	1:22:A:PRO:HD3	8	0.51
(1,406)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG3	3	0.51
(1,380)	1:11:A:TRP:HE1	1:23:A:PRO:HD2	7	0.51
(1,369)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB2	4	0.51
(1,311)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	9	0.51
(1,311)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	9	0.51
(1,311)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	9	0.51
(1,311)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	9	0.51
(1,311)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	9	0.51
(1,311)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	9	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,305)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HG	4	0.51
(1,305)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HG	4	0.51
(1,295)	1:11:A:TRP:HD1	1:24:A:PRO:HD3	1	0.51
(1,259)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG2	10	0.51
(1,216)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD2	3	0.51
(1,131)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HE2	4	0.51
(1,131)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HE3	4	0.51
(1,131)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HE3	4	0.51
(1,131)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HE2	6	0.51
(1,131)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HE3	6	0.51
(1,131)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HE3	6	0.51
(1,123)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD11	7	0.51
(1,123)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD12	7	0.51
(1,123)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD13	7	0.51
(1,123)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD11	9	0.51
(1,123)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD12	9	0.51
(1,123)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD13	9	0.51
(1,59)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD21	9	0.51
(1,59)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD22	9	0.51
(1,59)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HD23	9	0.51
(1,21)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	3	0.51
(1,21)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	3	0.51
(1,21)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	3	0.51
(1,21)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	8	0.51
(1,21)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	8	0.51
(1,21)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	8	0.51
(1,21)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	9	0.51
(1,21)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	9	0.51
(1,21)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	9	0.51
(1,21)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	10	0.51
(1,21)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	10	0.51
(1,21)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	10	0.51
(3,187)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG13	1	0.5
(3,187)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG13	1	0.5
(3,187)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG13	1	0.5
(3,179)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD11	3	0.5
(3,179)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD12	3	0.5
(3,179)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD13	3	0.5
(3,179)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	3	0.5
(3,179)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	3	0.5
(3,179)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	3	0.5
(3,168)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD21	1	0.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,168)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD22	1	0.5
(3,168)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD23	1	0.5
(3,168)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD21	5	0.5
(3,168)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD22	5	0.5
(3,168)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD23	5	0.5
(3,138)	1:12:A:LEU:HD21	1:14:A:ASP:H	9	0.5
(3,138)	1:12:A:LEU:HD22	1:14:A:ASP:H	9	0.5
(3,138)	1:12:A:LEU:HD23	1:14:A:ASP:H	9	0.5
(3,133)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:H	2	0.5
(3,131)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD11	10	0.5
(3,131)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD12	10	0.5
(3,131)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD13	10	0.5
(3,127)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:H	8	0.5
(3,105)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG3	2	0.5
(3,105)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG3	7	0.5
(3,82)	1:11:A:TRP:HE3	1:16:A:GLY:HA2	6	0.5
(3,68)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	1	0.5
(3,68)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	1	0.5
(3,68)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	1	0.5
(3,68)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	1	0.5
(3,68)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	1	0.5
(3,68)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	1	0.5
(3,46)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG2	5	0.5
(3,46)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG2	8	0.5
(3,46)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG2	9	0.5
(3,26)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE2	8	0.5
(3,26)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE3	8	0.5
(3,4)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	1	0.5
(3,4)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	1	0.5
(3,4)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	1	0.5
(3,4)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	4	0.5
(3,4)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	4	0.5
(3,4)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	4	0.5
(3,4)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	5	0.5
(3,4)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	5	0.5
(3,4)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	5	0.5
(3,4)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	6	0.5
(3,4)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	6	0.5
(3,4)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	6	0.5
(2,104)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HE2	2	0.5
(2,104)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HE3	2	0.5
(2,104)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HE3	2	0.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,104)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HE2	7	0.5
(2,104)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HE3	7	0.5
(2,104)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HE3	7	0.5
(1,618)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG13	1	0.5
(1,618)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG13	1	0.5
(1,618)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG13	1	0.5
(1,598)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD11	3	0.5
(1,598)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD12	3	0.5
(1,598)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD13	3	0.5
(1,598)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	3	0.5
(1,598)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	3	0.5
(1,598)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	3	0.5
(1,581)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD21	1	0.5
(1,581)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD22	1	0.5
(1,581)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD23	1	0.5
(1,581)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD21	5	0.5
(1,581)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD22	5	0.5
(1,581)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD23	5	0.5
(1,498)	1:12:A:LEU:HD21	1:14:A:ASP:H	9	0.5
(1,498)	1:12:A:LEU:HD22	1:14:A:ASP:H	9	0.5
(1,498)	1:12:A:LEU:HD23	1:14:A:ASP:H	9	0.5
(1,481)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:H	2	0.5
(1,477)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD11	10	0.5
(1,477)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD12	10	0.5
(1,477)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD13	10	0.5
(1,468)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:H	8	0.5
(1,406)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG3	2	0.5
(1,406)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG3	7	0.5
(1,343)	1:11:A:TRP:HE3	1:16:A:GLY:HA2	6	0.5
(1,311)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	1	0.5
(1,311)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	1	0.5
(1,311)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	1	0.5
(1,311)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	1	0.5
(1,311)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	1	0.5
(1,311)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	1	0.5
(1,259)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG2	5	0.5
(1,259)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG2	8	0.5
(1,259)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG2	9	0.5
(1,131)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HE2	2	0.5
(1,131)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HE3	2	0.5
(1,131)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HE3	2	0.5
(1,131)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HE2	7	0.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,131)	1:13:A:LYS:HB2	1:13:A:LYS:HE3	7	0.5
(1,131)	1:13:A:LYS:HB3	1:13:A:LYS:HE3	7	0.5
(1,126)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE2	8	0.5
(1,126)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE3	8	0.5
(1,21)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	1	0.5
(1,21)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	1	0.5
(1,21)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	1	0.5
(1,21)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	4	0.5
(1,21)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	4	0.5
(1,21)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	4	0.5
(1,21)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	5	0.5
(1,21)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	5	0.5
(1,21)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	5	0.5
(1,21)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	6	0.5
(1,21)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	6	0.5
(1,21)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	6	0.5
(3,187)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG13	2	0.49
(3,187)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG13	2	0.49
(3,187)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG13	2	0.49
(3,181)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:HD21	9	0.49
(3,181)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:HD22	9	0.49
(3,181)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:HD23	9	0.49
(3,133)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:H	1	0.49
(3,126)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HB2	1	0.49
(3,126)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HB2	10	0.49
(3,105)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG3	9	0.49
(3,102)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:HD1	7	0.49
(3,102)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:HD2	7	0.49
(3,80)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HD3	3	0.49
(3,71)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB2	5	0.49
(3,71)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB3	5	0.49
(3,65)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG2	4	0.49
(3,65)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG2	4	0.49
(3,46)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG2	2	0.49
(3,46)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG2	3	0.49
(3,46)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG2	7	0.49
(3,4)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	2	0.49
(3,4)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	2	0.49
(3,4)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	2	0.49
(3,4)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	7	0.49
(3,4)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	7	0.49
(3,4)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	7	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,283)	1:11:A:TRP:HE1	1:23:A:PRO:HD2	8	0.49
(2,283)	1:11:A:TRP:HE1	1:23:A:PRO:HD2	9	0.49
(2,259)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD2	2	0.49
(2,31)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HD2	2	0.49
(2,31)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HD2	5	0.49
(1,618)	1:5:A:VAL:HG11	1:9:A:ILE:HG13	2	0.49
(1,618)	1:5:A:VAL:HG12	1:9:A:ILE:HG13	2	0.49
(1,618)	1:5:A:VAL:HG13	1:9:A:ILE:HG13	2	0.49
(1,603)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:HD21	9	0.49
(1,603)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:HD22	9	0.49
(1,603)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:HD23	9	0.49
(1,481)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:H	1	0.49
(1,466)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HB2	1	0.49
(1,466)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HB2	10	0.49
(1,406)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG3	9	0.49
(1,402)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:HD1	7	0.49
(1,402)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:HD2	7	0.49
(1,380)	1:11:A:TRP:HE1	1:23:A:PRO:HD2	8	0.49
(1,380)	1:11:A:TRP:HE1	1:23:A:PRO:HD2	9	0.49
(1,339)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HD3	3	0.49
(1,336)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD2	2	0.49
(1,319)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB2	5	0.49
(1,319)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HB3	5	0.49
(1,300)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG2	4	0.49
(1,300)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG2	4	0.49
(1,259)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG2	2	0.49
(1,259)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG2	3	0.49
(1,259)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG2	7	0.49
(1,35)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HD2	2	0.49
(1,35)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HD2	5	0.49
(1,21)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	2	0.49
(1,21)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	2	0.49
(1,21)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	2	0.49
(1,21)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG21	7	0.49
(1,21)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG22	7	0.49
(1,21)	1:5:A:VAL:H	1:5:A:VAL:HG23	7	0.49
(3,208)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD11	1	0.48
(3,208)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD12	1	0.48
(3,208)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD13	1	0.48
(3,168)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD21	2	0.48
(3,168)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD22	2	0.48
(3,168)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD23	2	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,138)	1:12:A:LEU:HD21	1:14:A:ASP:H	8	0.48
(3,138)	1:12:A:LEU:HD22	1:14:A:ASP:H	8	0.48
(3,138)	1:12:A:LEU:HD23	1:14:A:ASP:H	8	0.48
(3,133)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:H	5	0.48
(3,132)	1:10:A:GLN:HB3	1:12:A:LEU:H	9	0.48
(3,120)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:H	8	0.48
(3,105)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG3	8	0.48
(3,102)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:HD1	10	0.48
(3,102)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:HD2	10	0.48
(3,68)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	6	0.48
(3,68)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	6	0.48
(3,68)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	6	0.48
(3,68)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	6	0.48
(3,68)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	6	0.48
(3,68)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	6	0.48
(3,62)	1:11:A:TRP:HD1	1:24:A:PRO:HD3	4	0.48
(3,46)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG2	1	0.48
(3,46)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG2	4	0.48
(3,36)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG2	7	0.48
(3,36)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG3	7	0.48
(3,36)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG2	8	0.48
(3,36)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG3	8	0.48
(3,23)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HB3	7	0.48
(3,23)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HB3	9	0.48
(2,410)	1:23:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HD3	2	0.48
(2,330)	1:16:A:GLY:H	1:17:A:PRO:HD2	1	0.48
(2,283)	1:11:A:TRP:HE1	1:23:A:PRO:HD2	2	0.48
(2,259)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD2	3	0.48
(2,259)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD2	10	0.48
(2,231)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD2	5	0.48
(2,231)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD2	9	0.48
(2,31)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HD2	6	0.48
(1,680)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD11	1	0.48
(1,680)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD12	1	0.48
(1,680)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD13	1	0.48
(1,581)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD21	2	0.48
(1,581)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD22	2	0.48
(1,581)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD23	2	0.48
(1,570)	1:23:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HD3	2	0.48
(1,498)	1:12:A:LEU:HD21	1:14:A:ASP:H	8	0.48
(1,498)	1:12:A:LEU:HD22	1:14:A:ASP:H	8	0.48
(1,498)	1:12:A:LEU:HD23	1:14:A:ASP:H	8	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,481)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:H	5	0.48
(1,479)	1:10:A:GLN:HB3	1:12:A:LEU:H	9	0.48
(1,451)	1:16:A:GLY:H	1:17:A:PRO:HD2	1	0.48
(1,449)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:H	8	0.48
(1,406)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG3	8	0.48
(1,402)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:HD1	10	0.48
(1,402)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:HD2	10	0.48
(1,380)	1:11:A:TRP:HE1	1:23:A:PRO:HD2	2	0.48
(1,336)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD2	3	0.48
(1,336)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD2	10	0.48
(1,311)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	6	0.48
(1,311)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	6	0.48
(1,311)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	6	0.48
(1,311)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	6	0.48
(1,311)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	6	0.48
(1,311)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	6	0.48
(1,295)	1:11:A:TRP:HD1	1:24:A:PRO:HD3	4	0.48
(1,291)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD2	5	0.48
(1,291)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD2	9	0.48
(1,259)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG2	1	0.48
(1,259)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG2	4	0.48
(1,214)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG2	7	0.48
(1,214)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG3	7	0.48
(1,214)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG2	8	0.48
(1,214)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG3	8	0.48
(1,122)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HB3	7	0.48
(1,122)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HB3	9	0.48
(1,35)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HD2	6	0.48
(3,208)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD11	3	0.47
(3,208)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD12	3	0.47
(3,208)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD13	3	0.47
(3,208)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD11	5	0.47
(3,208)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD12	5	0.47
(3,208)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD13	5	0.47
(3,208)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD11	10	0.47
(3,208)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD12	10	0.47
(3,208)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD13	10	0.47
(3,132)	1:10:A:GLN:HB3	1:12:A:LEU:H	10	0.47
(3,126)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HB2	2	0.47
(3,124)	1:9:A:ILE:H	1:10:A:GLN:HB3	6	0.47
(3,120)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:H	10	0.47
(3,112)	1:21:A:ARG:HG2	1:22:A:PRO:HD3	7	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,112)	1:21:A:ARG:HG2	1:22:A:PRO:HD3	9	0.47
(3,106)	1:13:A:LYS:HB2	1:14:A:ASP:HA	8	0.47
(3,106)	1:13:A:LYS:HB3	1:14:A:ASP:HA	8	0.47
(3,105)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG3	10	0.47
(3,68)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	2	0.47
(3,68)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	2	0.47
(3,68)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	2	0.47
(3,68)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	2	0.47
(3,68)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	2	0.47
(3,68)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	2	0.47
(3,51)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HE21	6	0.47
(3,51)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HE21	6	0.47
(3,51)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HE21	6	0.47
(3,49)	1:10:A:GLN:HE21	1:13:A:LYS:HB2	8	0.47
(3,49)	1:10:A:GLN:HE21	1:13:A:LYS:HB3	8	0.47
(3,36)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG2	9	0.47
(3,36)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG3	9	0.47
(3,30)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HD2	10	0.47
(3,30)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HD3	10	0.47
(3,6)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HG	6	0.47
(2,472)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HD2	8	0.47
(2,472)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HD2	8	0.47
(2,472)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HD2	8	0.47
(2,330)	1:16:A:GLY:H	1:17:A:PRO:HD2	2	0.47
(2,330)	1:16:A:GLY:H	1:17:A:PRO:HD2	4	0.47
(2,275)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD21	7	0.47
(2,275)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD22	7	0.47
(2,275)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD23	7	0.47
(2,275)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD21	9	0.47
(2,275)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD22	9	0.47
(2,275)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD23	9	0.47
(2,259)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD2	1	0.47
(2,259)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD2	4	0.47
(2,231)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD2	2	0.47
(2,231)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD2	6	0.47
(2,31)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HD2	1	0.47
(1,680)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD11	3	0.47
(1,680)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD12	3	0.47
(1,680)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD13	3	0.47
(1,680)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD11	5	0.47
(1,680)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD12	5	0.47
(1,680)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD13	5	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,680)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD11	10	0.47
(1,680)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD12	10	0.47
(1,680)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD13	10	0.47
(1,678)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HD2	8	0.47
(1,678)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HD2	8	0.47
(1,678)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HD2	8	0.47
(1,479)	1:10:A:GLN:HB3	1:12:A:LEU:H	10	0.47
(1,466)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HB2	2	0.47
(1,461)	1:9:A:ILE:H	1:10:A:GLN:HB3	6	0.47
(1,451)	1:16:A:GLY:H	1:17:A:PRO:HD2	2	0.47
(1,451)	1:16:A:GLY:H	1:17:A:PRO:HD2	4	0.47
(1,449)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:H	10	0.47
(1,431)	1:21:A:ARG:HG2	1:22:A:PRO:HD3	7	0.47
(1,431)	1:21:A:ARG:HG2	1:22:A:PRO:HD3	9	0.47
(1,407)	1:13:A:LYS:HB2	1:14:A:ASP:HA	8	0.47
(1,407)	1:13:A:LYS:HB3	1:14:A:ASP:HA	8	0.47
(1,406)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG3	10	0.47
(1,368)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD21	7	0.47
(1,368)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD22	7	0.47
(1,368)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD23	7	0.47
(1,368)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD21	9	0.47
(1,368)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD22	9	0.47
(1,368)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD23	9	0.47
(1,336)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD2	1	0.47
(1,336)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD2	4	0.47
(1,311)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	2	0.47
(1,311)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	2	0.47
(1,311)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	2	0.47
(1,311)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	2	0.47
(1,311)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	2	0.47
(1,311)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	2	0.47
(1,291)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD2	2	0.47
(1,291)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD2	6	0.47
(1,269)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HE21	6	0.47
(1,269)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HE21	6	0.47
(1,269)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HE21	6	0.47
(1,265)	1:10:A:GLN:HE21	1:13:A:LYS:HB2	8	0.47
(1,265)	1:10:A:GLN:HE21	1:13:A:LYS:HB3	8	0.47
(1,214)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG2	9	0.47
(1,214)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG3	9	0.47
(1,143)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HD2	10	0.47
(1,143)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HD3	10	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,44)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HG	6	0.47
(1,35)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HD2	1	0.47
(3,208)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD11	2	0.46
(3,208)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD12	2	0.46
(3,208)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD13	2	0.46
(3,208)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD11	8	0.46
(3,208)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD12	8	0.46
(3,208)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD13	8	0.46
(3,179)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD11	8	0.46
(3,179)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD12	8	0.46
(3,179)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD13	8	0.46
(3,179)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	8	0.46
(3,179)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	8	0.46
(3,179)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	8	0.46
(3,179)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD11	10	0.46
(3,179)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD12	10	0.46
(3,179)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD13	10	0.46
(3,179)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	10	0.46
(3,179)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	10	0.46
(3,179)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	10	0.46
(3,168)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD21	6	0.46
(3,168)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD22	6	0.46
(3,168)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD23	6	0.46
(3,166)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HA	2	0.46
(3,166)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HA	2	0.46
(3,166)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HA	2	0.46
(3,166)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HA	9	0.46
(3,166)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HA	9	0.46
(3,166)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HA	9	0.46
(3,132)	1:10:A:GLN:HB3	1:12:A:LEU:H	8	0.46
(3,126)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HB2	6	0.46
(3,124)	1:9:A:ILE:H	1:10:A:GLN:HB3	1	0.46
(3,124)	1:9:A:ILE:H	1:10:A:GLN:HB3	3	0.46
(3,124)	1:9:A:ILE:H	1:10:A:GLN:HB3	4	0.46
(3,107)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	6	0.46
(3,107)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB3	6	0.46
(3,103)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG2	8	0.46
(3,103)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG3	8	0.46
(3,102)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:HD1	3	0.46
(3,102)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:HD2	3	0.46
(3,68)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	5	0.46
(3,68)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	5	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,68)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	5	0.46
(3,68)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	5	0.46
(3,68)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	5	0.46
(3,68)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	5	0.46
(3,62)	1:11:A:TRP:HD1	1:24:A:PRO:HD3	3	0.46
(3,51)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HE21	4	0.46
(3,51)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HE21	4	0.46
(3,51)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HE21	4	0.46
(3,51)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HE21	7	0.46
(3,51)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HE21	7	0.46
(3,51)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HE21	7	0.46
(3,51)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HE21	8	0.46
(3,51)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HE21	8	0.46
(3,51)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HE21	8	0.46
(3,40)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG3	2	0.46
(3,40)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG3	4	0.46
(3,40)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG3	9	0.46
(3,11)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB2	5	0.46
(3,11)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB2	6	0.46
(3,6)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HG	3	0.46
(3,6)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HG	5	0.46
(2,283)	1:11:A:TRP:HE1	1:23:A:PRO:HD2	10	0.46
(2,243)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG13	6	0.46
(2,243)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG13	6	0.46
(2,231)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD2	1	0.46
(2,231)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD2	4	0.46
(2,231)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD2	7	0.46
(2,231)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD2	10	0.46
(1,680)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD11	2	0.46
(1,680)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD12	2	0.46
(1,680)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD13	2	0.46
(1,680)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD11	8	0.46
(1,680)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD12	8	0.46
(1,680)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD13	8	0.46
(1,598)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD11	8	0.46
(1,598)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD12	8	0.46
(1,598)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD13	8	0.46
(1,598)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	8	0.46
(1,598)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	8	0.46
(1,598)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	8	0.46
(1,598)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD11	10	0.46
(1,598)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD12	10	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,598)	1:3:A:GLU:HG2	1:7:A:LEU:HD13	10	0.46
(1,598)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD11	10	0.46
(1,598)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD12	10	0.46
(1,598)	1:3:A:GLU:HG3	1:7:A:LEU:HD13	10	0.46
(1,581)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD21	6	0.46
(1,581)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD22	6	0.46
(1,581)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD23	6	0.46
(1,579)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HA	2	0.46
(1,579)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HA	2	0.46
(1,579)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HA	2	0.46
(1,579)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HA	9	0.46
(1,579)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HA	9	0.46
(1,579)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HA	9	0.46
(1,479)	1:10:A:GLN:HB3	1:12:A:LEU:H	8	0.46
(1,466)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HB2	6	0.46
(1,461)	1:9:A:ILE:H	1:10:A:GLN:HB3	1	0.46
(1,461)	1:9:A:ILE:H	1:10:A:GLN:HB3	3	0.46
(1,461)	1:9:A:ILE:H	1:10:A:GLN:HB3	4	0.46
(1,410)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	6	0.46
(1,410)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB3	6	0.46
(1,403)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG2	8	0.46
(1,403)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG3	8	0.46
(1,402)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:HD1	3	0.46
(1,402)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:HD2	3	0.46
(1,380)	1:11:A:TRP:HE1	1:23:A:PRO:HD2	10	0.46
(1,311)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	5	0.46
(1,311)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	5	0.46
(1,311)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	5	0.46
(1,311)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	5	0.46
(1,311)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	5	0.46
(1,311)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	5	0.46
(1,310)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG13	6	0.46
(1,310)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG13	6	0.46
(1,295)	1:11:A:TRP:HD1	1:24:A:PRO:HD3	3	0.46
(1,291)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD2	1	0.46
(1,291)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD2	4	0.46
(1,291)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD2	7	0.46
(1,291)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD2	10	0.46
(1,269)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HE21	4	0.46
(1,269)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HE21	4	0.46
(1,269)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HE21	4	0.46
(1,269)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HE21	7	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,269)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HE21	7	0.46
(1,269)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HE21	7	0.46
(1,269)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HE21	8	0.46
(1,269)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HE21	8	0.46
(1,269)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HE21	8	0.46
(1,234)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG3	2	0.46
(1,234)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG3	4	0.46
(1,234)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG3	9	0.46
(1,55)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB2	5	0.46
(1,55)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB2	6	0.46
(1,44)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HG	3	0.46
(1,44)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HG	5	0.46
(3,208)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD11	9	0.45
(3,208)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD12	9	0.45
(3,208)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD13	9	0.45
(3,195)	1:12:A:LEU:HB2	1:13:A:LYS:H	6	0.45
(3,181)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:HD21	7	0.45
(3,181)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:HD22	7	0.45
(3,181)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:HD23	7	0.45
(3,169)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HA	4	0.45
(3,169)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HA	4	0.45
(3,169)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HA	4	0.45
(3,169)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HA	6	0.45
(3,169)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HA	6	0.45
(3,169)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HA	6	0.45
(3,166)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HA	5	0.45
(3,166)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HA	5	0.45
(3,166)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HA	5	0.45
(3,124)	1:9:A:ILE:H	1:10:A:GLN:HB3	2	0.45
(3,124)	1:9:A:ILE:H	1:10:A:GLN:HB3	5	0.45
(3,107)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	9	0.45
(3,107)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB3	9	0.45
(3,103)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG2	7	0.45
(3,103)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG3	7	0.45
(3,102)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:HD1	1	0.45
(3,102)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:HD2	1	0.45
(3,102)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:HD1	2	0.45
(3,102)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:HD2	2	0.45
(3,102)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:HD1	5	0.45
(3,102)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:HD2	5	0.45
(3,102)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:HD1	6	0.45
(3,102)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:HD2	6	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,102)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:HD1	8	0.45
(3,102)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:HD2	8	0.45
(3,55)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HD2	4	0.45
(3,51)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HE21	2	0.45
(3,51)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HE21	2	0.45
(3,51)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HE21	2	0.45
(3,51)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HE21	3	0.45
(3,51)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HE21	3	0.45
(3,51)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HE21	3	0.45
(3,49)	1:10:A:GLN:HE21	1:13:A:LYS:HB2	3	0.45
(3,49)	1:10:A:GLN:HE21	1:13:A:LYS:HB3	3	0.45
(3,40)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG3	5	0.45
(3,30)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HD2	5	0.45
(3,30)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HD3	5	0.45
(3,30)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HD2	7	0.45
(3,30)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HD3	7	0.45
(3,23)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HB3	1	0.45
(3,23)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HB3	2	0.45
(3,23)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HB3	4	0.45
(3,23)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HB3	5	0.45
(3,23)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HB3	6	0.45
(3,11)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB2	1	0.45
(3,11)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB2	2	0.45
(3,11)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB2	3	0.45
(3,11)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB2	4	0.45
(3,6)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HG	1	0.45
(3,6)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HG	7	0.45
(3,6)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HG	8	0.45
(2,283)	1:11:A:TRP:HE1	1:23:A:PRO:HD2	4	0.45
(2,259)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD2	8	0.45
(2,243)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG13	2	0.45
(2,243)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG13	2	0.45
(2,231)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD2	3	0.45
(2,231)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD2	8	0.45
(2,183)	1:22:A:PRO:HD3	1:22:A:PRO:HG2	2	0.45
(1,680)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD11	9	0.45
(1,680)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD12	9	0.45
(1,680)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD13	9	0.45
(1,637)	1:12:A:LEU:HB2	1:13:A:LYS:H	6	0.45
(1,603)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:HD21	7	0.45
(1,603)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:HD22	7	0.45
(1,603)	1:9:A:ILE:HB	1:12:A:LEU:HD23	7	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,582)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HA	4	0.45
(1,582)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HA	4	0.45
(1,582)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HA	4	0.45
(1,582)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HA	6	0.45
(1,582)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HA	6	0.45
(1,582)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HA	6	0.45
(1,579)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HA	5	0.45
(1,579)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HA	5	0.45
(1,579)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HA	5	0.45
(1,461)	1:9:A:ILE:H	1:10:A:GLN:HB3	2	0.45
(1,461)	1:9:A:ILE:H	1:10:A:GLN:HB3	5	0.45
(1,410)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	9	0.45
(1,410)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB3	9	0.45
(1,403)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG2	7	0.45
(1,403)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG3	7	0.45
(1,402)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:HD1	1	0.45
(1,402)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:HD2	1	0.45
(1,402)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:HD1	2	0.45
(1,402)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:HD2	2	0.45
(1,402)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:HD1	5	0.45
(1,402)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:HD2	5	0.45
(1,402)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:HD1	6	0.45
(1,402)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:HD2	6	0.45
(1,402)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:HD1	8	0.45
(1,402)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:HD2	8	0.45
(1,380)	1:11:A:TRP:HE1	1:23:A:PRO:HD2	4	0.45
(1,336)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD2	8	0.45
(1,310)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG13	2	0.45
(1,310)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG13	2	0.45
(1,291)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD2	3	0.45
(1,291)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HD2	8	0.45
(1,277)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HD2	4	0.45
(1,269)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HE21	2	0.45
(1,269)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HE21	2	0.45
(1,269)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HE21	2	0.45
(1,269)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HE21	3	0.45
(1,269)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HE21	3	0.45
(1,269)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HE21	3	0.45
(1,265)	1:10:A:GLN:HE21	1:13:A:LYS:HB2	3	0.45
(1,265)	1:10:A:GLN:HE21	1:13:A:LYS:HB3	3	0.45
(1,234)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG3	5	0.45
(1,219)	1:22:A:PRO:HD3	1:22:A:PRO:HG2	2	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,143)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HD2	5	0.45
(1,143)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HD3	5	0.45
(1,143)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HD2	7	0.45
(1,143)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HD3	7	0.45
(1,122)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HB3	1	0.45
(1,122)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HB3	2	0.45
(1,122)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HB3	4	0.45
(1,122)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HB3	5	0.45
(1,122)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HB3	6	0.45
(1,55)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB2	1	0.45
(1,55)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB2	2	0.45
(1,55)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB2	3	0.45
(1,55)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB2	4	0.45
(1,44)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HG	1	0.45
(1,44)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HG	7	0.45
(1,44)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HG	8	0.45
(3,168)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD21	4	0.44
(3,168)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD22	4	0.44
(3,168)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD23	4	0.44
(3,166)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HA	1	0.44
(3,166)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HA	1	0.44
(3,166)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HA	1	0.44
(3,166)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HA	3	0.44
(3,166)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HA	3	0.44
(3,166)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HA	3	0.44
(3,166)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HA	10	0.44
(3,166)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HA	10	0.44
(3,166)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HA	10	0.44
(3,148)	1:5:A:VAL:H	1:7:A:LEU:HD21	8	0.44
(3,148)	1:5:A:VAL:H	1:7:A:LEU:HD22	8	0.44
(3,148)	1:5:A:VAL:H	1:7:A:LEU:HD23	8	0.44
(3,133)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:H	4	0.44
(3,126)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HB2	8	0.44
(3,120)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:H	2	0.44
(3,120)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:H	9	0.44
(3,107)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	8	0.44
(3,107)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB3	8	0.44
(3,107)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	10	0.44
(3,107)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB3	10	0.44
(3,105)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG3	5	0.44
(3,105)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG3	6	0.44
(3,103)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG2	9	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,103)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG3	9	0.44
(3,80)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HD3	9	0.44
(3,67)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HG	6	0.44
(3,67)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HG	6	0.44
(3,55)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HD2	1	0.44
(3,40)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG3	1	0.44
(3,40)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG3	6	0.44
(3,23)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HB3	3	0.44
(3,23)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HB3	10	0.44
(3,11)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB2	7	0.44
(3,6)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HG	2	0.44
(3,6)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HG	4	0.44
(2,414)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD21	8	0.44
(2,414)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD22	8	0.44
(2,414)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD23	8	0.44
(2,358)	1:7:A:LEU:HB3	1:8:A:TYR:H	8	0.44
(2,329)	1:22:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD3	6	0.44
(2,284)	1:11:A:TRP:HE1	1:19:A:SER:HB2	8	0.44
(2,283)	1:11:A:TRP:HE1	1:23:A:PRO:HD2	1	0.44
(2,271)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	5	0.44
(2,183)	1:22:A:PRO:HD3	1:22:A:PRO:HG2	1	0.44
(2,183)	1:22:A:PRO:HD3	1:22:A:PRO:HG2	3	0.44
(2,183)	1:22:A:PRO:HD3	1:22:A:PRO:HG2	4	0.44
(2,183)	1:22:A:PRO:HD3	1:22:A:PRO:HG2	10	0.44
(2,31)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HD2	9	0.44
(1,583)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD21	8	0.44
(1,583)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD22	8	0.44
(1,583)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD23	8	0.44
(1,581)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD21	4	0.44
(1,581)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD22	4	0.44
(1,581)	1:9:A:ILE:HA	1:12:A:LEU:HD23	4	0.44
(1,579)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HA	1	0.44
(1,579)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HA	1	0.44
(1,579)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HA	1	0.44
(1,579)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HA	3	0.44
(1,579)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HA	3	0.44
(1,579)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HA	3	0.44
(1,579)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HA	10	0.44
(1,579)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HA	10	0.44
(1,579)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HA	10	0.44
(1,533)	1:5:A:VAL:H	1:7:A:LEU:HD21	8	0.44
(1,533)	1:5:A:VAL:H	1:7:A:LEU:HD22	8	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,533)	1:5:A:VAL:H	1:7:A:LEU:HD23	8	0.44
(1,493)	1:7:A:LEU:HB3	1:8:A:TYR:H	8	0.44
(1,481)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:H	4	0.44
(1,466)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HB2	8	0.44
(1,449)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:H	2	0.44
(1,449)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:H	9	0.44
(1,447)	1:22:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD3	6	0.44
(1,410)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	8	0.44
(1,410)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB3	8	0.44
(1,410)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	10	0.44
(1,410)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB3	10	0.44
(1,406)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG3	5	0.44
(1,406)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG3	6	0.44
(1,403)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG2	9	0.44
(1,403)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG3	9	0.44
(1,381)	1:11:A:TRP:HE1	1:19:A:SER:HB2	8	0.44
(1,380)	1:11:A:TRP:HE1	1:23:A:PRO:HD2	1	0.44
(1,360)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	5	0.44
(1,339)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HD3	9	0.44
(1,305)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HG	6	0.44
(1,305)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HG	6	0.44
(1,277)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HD2	1	0.44
(1,234)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG3	1	0.44
(1,234)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG3	6	0.44
(1,219)	1:22:A:PRO:HD3	1:22:A:PRO:HG2	1	0.44
(1,219)	1:22:A:PRO:HD3	1:22:A:PRO:HG2	3	0.44
(1,219)	1:22:A:PRO:HD3	1:22:A:PRO:HG2	4	0.44
(1,219)	1:22:A:PRO:HD3	1:22:A:PRO:HG2	10	0.44
(1,122)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HB3	3	0.44
(1,122)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HB3	10	0.44
(1,55)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB2	7	0.44
(1,44)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HG	2	0.44
(1,44)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HG	4	0.44
(1,35)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HD2	9	0.44
(3,169)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HA	5	0.43
(3,169)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HA	5	0.43
(3,169)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HA	5	0.43
(3,166)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HA	7	0.43
(3,166)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HA	7	0.43
(3,166)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HA	7	0.43
(3,126)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HB2	3	0.43
(3,120)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:H	1	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,120)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:H	5	0.43
(3,119)	1:14:A:ASP:HA	1:16:A:GLY:H	8	0.43
(3,107)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	1	0.43
(3,107)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB3	1	0.43
(3,104)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	6	0.43
(3,80)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HD3	5	0.43
(3,80)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HD3	7	0.43
(3,67)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HG	3	0.43
(3,67)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HG	3	0.43
(3,67)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HG	5	0.43
(3,67)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HG	5	0.43
(3,49)	1:10:A:GLN:HE21	1:13:A:LYS:HB2	7	0.43
(3,49)	1:10:A:GLN:HE21	1:13:A:LYS:HB3	7	0.43
(3,35)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD2	9	0.43
(3,30)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HD2	1	0.43
(3,30)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HD3	1	0.43
(3,30)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HD2	2	0.43
(3,30)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HD3	2	0.43
(3,30)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HD2	3	0.43
(3,30)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HD3	3	0.43
(3,30)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HD2	8	0.43
(3,30)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HD3	8	0.43
(3,30)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HD2	9	0.43
(3,30)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HD3	9	0.43
(3,29)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HE2	9	0.43
(3,29)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HE3	9	0.43
(3,18)	1:10:A:GLN:HB3	1:10:A:GLN:HE22	3	0.43
(3,18)	1:10:A:GLN:HB3	1:10:A:GLN:HE22	7	0.43
(3,11)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB2	9	0.43
(3,6)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HG	9	0.43
(2,410)	1:23:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HD3	9	0.43
(2,259)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD2	7	0.43
(2,259)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD2	9	0.43
(2,251)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HG	8	0.43
(1,582)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HA	5	0.43
(1,582)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HA	5	0.43
(1,582)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HA	5	0.43
(1,579)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HA	7	0.43
(1,579)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HA	7	0.43
(1,579)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HA	7	0.43
(1,570)	1:23:A:PRO:HB2	1:24:A:PRO:HD3	9	0.43
(1,466)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HB2	3	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,449)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:H	1	0.43
(1,449)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:H	5	0.43
(1,448)	1:14:A:ASP:HA	1:16:A:GLY:H	8	0.43
(1,410)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	1	0.43
(1,410)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB3	1	0.43
(1,405)	1:22:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	6	0.43
(1,339)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HD3	5	0.43
(1,339)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HD3	7	0.43
(1,336)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD2	7	0.43
(1,336)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD2	9	0.43
(1,323)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HG	8	0.43
(1,305)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HG	3	0.43
(1,305)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HG	3	0.43
(1,305)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HG	5	0.43
(1,305)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HG	5	0.43
(1,265)	1:10:A:GLN:HE21	1:13:A:LYS:HB2	7	0.43
(1,265)	1:10:A:GLN:HE21	1:13:A:LYS:HB3	7	0.43
(1,206)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD2	9	0.43
(1,143)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HD2	1	0.43
(1,143)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HD3	1	0.43
(1,143)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HD2	2	0.43
(1,143)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HD3	2	0.43
(1,143)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HD2	3	0.43
(1,143)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HD3	3	0.43
(1,143)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HD2	8	0.43
(1,143)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HD3	8	0.43
(1,143)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HD2	9	0.43
(1,143)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HD3	9	0.43
(1,141)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HE2	9	0.43
(1,141)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HE3	9	0.43
(1,90)	1:10:A:GLN:HB3	1:10:A:GLN:HE22	3	0.43
(1,90)	1:10:A:GLN:HB3	1:10:A:GLN:HE22	7	0.43
(1,55)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB2	9	0.43
(1,44)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HG	9	0.43
(3,208)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD11	7	0.42
(3,208)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD12	7	0.42
(3,208)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD13	7	0.42
(3,190)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:H	7	0.42
(3,169)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HA	1	0.42
(3,169)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HA	1	0.42
(3,169)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HA	1	0.42
(3,169)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HA	2	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,169)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HA	2	0.42
(3,169)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HA	2	0.42
(3,169)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HA	7	0.42
(3,169)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HA	7	0.42
(3,169)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HA	7	0.42
(3,169)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HA	9	0.42
(3,169)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HA	9	0.42
(3,169)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HA	9	0.42
(3,166)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HA	8	0.42
(3,166)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HA	8	0.42
(3,166)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HA	8	0.42
(3,133)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:H	6	0.42
(3,132)	1:10:A:GLN:HB3	1:12:A:LEU:H	4	0.42
(3,131)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD11	7	0.42
(3,131)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD12	7	0.42
(3,131)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD13	7	0.42
(3,121)	1:16:A:GLY:H	1:18:A:SER:HB2	3	0.42
(3,121)	1:16:A:GLY:H	1:18:A:SER:HB3	3	0.42
(3,119)	1:14:A:ASP:HA	1:16:A:GLY:H	3	0.42
(3,110)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HB	7	0.42
(3,107)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	2	0.42
(3,107)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB3	2	0.42
(3,107)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	5	0.42
(3,107)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB3	5	0.42
(3,103)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG2	5	0.42
(3,103)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG3	5	0.42
(3,80)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HD3	6	0.42
(3,80)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HD3	8	0.42
(3,55)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HD2	2	0.42
(3,51)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HE21	1	0.42
(3,51)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HE21	1	0.42
(3,51)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HE21	1	0.42
(3,40)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG3	3	0.42
(3,35)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD2	7	0.42
(3,21)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD21	4	0.42
(3,21)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD22	4	0.42
(3,21)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD23	4	0.42
(3,18)	1:10:A:GLN:HB3	1:10:A:GLN:HE22	2	0.42
(3,18)	1:10:A:GLN:HB3	1:10:A:GLN:HE22	8	0.42
(3,11)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB2	8	0.42
(3,6)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HG	10	0.42
(2,399)	1:10:A:GLN:HB3	1:13:A:LYS:HD2	6	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,399)	1:10:A:GLN:HB3	1:13:A:LYS:HD3	6	0.42
(2,330)	1:16:A:GLY:H	1:17:A:PRO:HD2	10	0.42
(1,680)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD11	7	0.42
(1,680)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD12	7	0.42
(1,680)	1:3:A:GLU:HA	1:7:A:LEU:HD13	7	0.42
(1,623)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:H	7	0.42
(1,582)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HA	1	0.42
(1,582)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HA	1	0.42
(1,582)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HA	1	0.42
(1,582)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HA	2	0.42
(1,582)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HA	2	0.42
(1,582)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HA	2	0.42
(1,582)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HA	7	0.42
(1,582)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HA	7	0.42
(1,582)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HA	7	0.42
(1,582)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HA	9	0.42
(1,582)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HA	9	0.42
(1,582)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HA	9	0.42
(1,579)	1:9:A:ILE:HG21	1:10:A:GLN:HA	8	0.42
(1,579)	1:9:A:ILE:HG22	1:10:A:GLN:HA	8	0.42
(1,579)	1:9:A:ILE:HG23	1:10:A:GLN:HA	8	0.42
(1,553)	1:10:A:GLN:HB3	1:13:A:LYS:HD2	6	0.42
(1,553)	1:10:A:GLN:HB3	1:13:A:LYS:HD3	6	0.42
(1,481)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:H	6	0.42
(1,479)	1:10:A:GLN:HB3	1:12:A:LEU:H	4	0.42
(1,477)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD11	7	0.42
(1,477)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD12	7	0.42
(1,477)	1:9:A:ILE:H	1:9:A:ILE:HD13	7	0.42
(1,451)	1:16:A:GLY:H	1:17:A:PRO:HD2	10	0.42
(1,450)	1:16:A:GLY:H	1:18:A:SER:HB2	3	0.42
(1,450)	1:16:A:GLY:H	1:18:A:SER:HB3	3	0.42
(1,448)	1:14:A:ASP:HA	1:16:A:GLY:H	3	0.42
(1,418)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HB	7	0.42
(1,410)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	2	0.42
(1,410)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB3	2	0.42
(1,410)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	5	0.42
(1,410)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB3	5	0.42
(1,403)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG2	5	0.42
(1,403)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG3	5	0.42
(1,339)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HD3	6	0.42
(1,339)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HD3	8	0.42
(1,277)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HD2	2	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,269)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HE21	1	0.42
(1,269)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HE21	1	0.42
(1,269)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HE21	1	0.42
(1,234)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG3	3	0.42
(1,206)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD2	7	0.42
(1,116)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD21	4	0.42
(1,116)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD22	4	0.42
(1,116)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD23	4	0.42
(1,90)	1:10:A:GLN:HB3	1:10:A:GLN:HE22	2	0.42
(1,90)	1:10:A:GLN:HB3	1:10:A:GLN:HE22	8	0.42
(1,55)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB2	8	0.42
(1,44)	1:7:A:LEU:HA	1:7:A:LEU:HG	10	0.42
(3,195)	1:12:A:LEU:HB2	1:13:A:LYS:H	3	0.41
(3,148)	1:5:A:VAL:H	1:7:A:LEU:HD21	10	0.41
(3,148)	1:5:A:VAL:H	1:7:A:LEU:HD22	10	0.41
(3,148)	1:5:A:VAL:H	1:7:A:LEU:HD23	10	0.41
(3,107)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	4	0.41
(3,107)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB3	4	0.41
(3,107)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	7	0.41
(3,107)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB3	7	0.41
(3,55)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HD2	10	0.41
(3,51)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HE21	5	0.41
(3,51)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HE21	5	0.41
(3,51)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HE21	5	0.41
(3,51)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HE21	9	0.41
(3,51)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HE21	9	0.41
(3,51)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HE21	9	0.41
(3,51)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HE21	10	0.41
(3,51)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HE21	10	0.41
(3,51)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HE21	10	0.41
(3,49)	1:10:A:GLN:HE21	1:13:A:LYS:HB2	2	0.41
(3,49)	1:10:A:GLN:HE21	1:13:A:LYS:HB3	2	0.41
(3,40)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG3	8	0.41
(3,40)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG3	10	0.41
(3,29)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HE2	2	0.41
(3,29)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HE3	2	0.41
(3,29)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HE2	7	0.41
(3,29)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HE3	7	0.41
(3,29)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HE2	10	0.41
(3,29)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HE3	10	0.41
(3,24)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD11	5	0.41
(3,24)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD12	5	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,24)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD13	5	0.41
(3,23)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HB3	8	0.41
(3,21)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD21	1	0.41
(3,21)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD22	1	0.41
(3,21)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD23	1	0.41
(3,21)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD21	2	0.41
(3,21)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD22	2	0.41
(3,21)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD23	2	0.41
(3,21)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD21	3	0.41
(3,21)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD22	3	0.41
(3,21)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD23	3	0.41
(3,21)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD21	6	0.41
(3,21)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD22	6	0.41
(3,21)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD23	6	0.41
(3,18)	1:10:A:GLN:HB3	1:10:A:GLN:HE22	1	0.41
(3,18)	1:10:A:GLN:HB3	1:10:A:GLN:HE22	9	0.41
(2,414)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD21	10	0.41
(2,414)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD22	10	0.41
(2,414)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD23	10	0.41
(2,358)	1:7:A:LEU:HB3	1:8:A:TYR:H	7	0.41
(2,283)	1:11:A:TRP:HE1	1:23:A:PRO:HD2	5	0.41
(2,271)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	9	0.41
(2,236)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	4	0.41
(2,236)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	4	0.41
(2,236)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	8	0.41
(2,236)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	8	0.41
(2,236)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	10	0.41
(2,236)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	10	0.41
(1,637)	1:12:A:LEU:HB2	1:13:A:LYS:H	3	0.41
(1,583)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD21	10	0.41
(1,583)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD22	10	0.41
(1,583)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD23	10	0.41
(1,533)	1:5:A:VAL:H	1:7:A:LEU:HD21	10	0.41
(1,533)	1:5:A:VAL:H	1:7:A:LEU:HD22	10	0.41
(1,533)	1:5:A:VAL:H	1:7:A:LEU:HD23	10	0.41
(1,493)	1:7:A:LEU:HB3	1:8:A:TYR:H	7	0.41
(1,410)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	4	0.41
(1,410)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB3	4	0.41
(1,410)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	7	0.41
(1,410)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB3	7	0.41
(1,380)	1:11:A:TRP:HE1	1:23:A:PRO:HD2	5	0.41
(1,360)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	9	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,301)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	4	0.41
(1,301)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	4	0.41
(1,301)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	8	0.41
(1,301)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	8	0.41
(1,301)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	10	0.41
(1,301)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	10	0.41
(1,277)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HD2	10	0.41
(1,269)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HE21	5	0.41
(1,269)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HE21	5	0.41
(1,269)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HE21	5	0.41
(1,269)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HE21	9	0.41
(1,269)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HE21	9	0.41
(1,269)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HE21	9	0.41
(1,269)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HE21	10	0.41
(1,269)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HE21	10	0.41
(1,269)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HE21	10	0.41
(1,265)	1:10:A:GLN:HE21	1:13:A:LYS:HB2	2	0.41
(1,265)	1:10:A:GLN:HE21	1:13:A:LYS:HB3	2	0.41
(1,234)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG3	8	0.41
(1,234)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG3	10	0.41
(1,141)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HE2	2	0.41
(1,141)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HE3	2	0.41
(1,141)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HE2	7	0.41
(1,141)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HE3	7	0.41
(1,141)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HE2	10	0.41
(1,141)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HE3	10	0.41
(1,123)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD11	5	0.41
(1,123)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD12	5	0.41
(1,123)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD13	5	0.41
(1,122)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HB3	8	0.41
(1,116)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD21	1	0.41
(1,116)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD22	1	0.41
(1,116)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD23	1	0.41
(1,116)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD21	2	0.41
(1,116)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD22	2	0.41
(1,116)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD23	2	0.41
(1,116)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD21	3	0.41
(1,116)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD22	3	0.41
(1,116)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD23	3	0.41
(1,116)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD21	6	0.41
(1,116)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD22	6	0.41
(1,116)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD23	6	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,90)	1:10:A:GLN:HB3	1:10:A:GLN:HE22	1	0.41
(1,90)	1:10:A:GLN:HB3	1:10:A:GLN:HE22	9	0.41
(3,195)	1:12:A:LEU:HB2	1:13:A:LYS:H	4	0.4
(3,169)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HA	3	0.4
(3,169)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HA	3	0.4
(3,169)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HA	3	0.4
(3,123)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HB	1	0.4
(3,123)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HB	7	0.4
(3,123)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HB	9	0.4
(3,107)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	3	0.4
(3,107)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB3	3	0.4
(3,94)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB2	5	0.4
(3,89)	1:11:A:TRP:HZ3	1:24:A:PRO:HG3	3	0.4
(3,67)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HG	1	0.4
(3,67)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HG	1	0.4
(3,67)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HG	9	0.4
(3,67)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HG	9	0.4
(3,40)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG3	7	0.4
(3,35)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD2	8	0.4
(3,24)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD11	4	0.4
(3,24)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD12	4	0.4
(3,24)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD13	4	0.4
(3,22)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD11	4	0.4
(3,22)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD12	4	0.4
(3,22)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD13	4	0.4
(3,21)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD21	5	0.4
(3,21)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD22	5	0.4
(3,21)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD23	5	0.4
(3,18)	1:10:A:GLN:HB3	1:10:A:GLN:HE22	4	0.4
(3,18)	1:10:A:GLN:HB3	1:10:A:GLN:HE22	5	0.4
(3,18)	1:10:A:GLN:HB3	1:10:A:GLN:HE22	6	0.4
(3,18)	1:10:A:GLN:HB3	1:10:A:GLN:HE22	10	0.4
(3,11)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB2	10	0.4
(3,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	8	0.4
(3,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	8	0.4
(3,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	8	0.4
(3,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	10	0.4
(3,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	10	0.4
(3,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	10	0.4
(2,466)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HD3	8	0.4
(2,394)	1:23:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG3	6	0.4
(2,390)	1:23:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	1	0.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,330)	1:16:A:GLY:H	1:17:A:PRO:HD2	5	0.4
(2,271)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	6	0.4
(2,259)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD2	6	0.4
(2,243)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG13	5	0.4
(2,243)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG13	5	0.4
(1,666)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HD3	8	0.4
(1,637)	1:12:A:LEU:HB2	1:13:A:LYS:H	4	0.4
(1,582)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HA	3	0.4
(1,582)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HA	3	0.4
(1,582)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HA	3	0.4
(1,547)	1:23:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG3	6	0.4
(1,538)	1:23:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	1	0.4
(1,459)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HB	1	0.4
(1,459)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HB	7	0.4
(1,459)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HB	9	0.4
(1,451)	1:16:A:GLY:H	1:17:A:PRO:HD2	5	0.4
(1,410)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB2	3	0.4
(1,410)	1:2:A:GLU:HA	1:3:A:GLU:HB3	3	0.4
(1,369)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HB2	5	0.4
(1,360)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	6	0.4
(1,358)	1:11:A:TRP:HZ3	1:24:A:PRO:HG3	3	0.4
(1,336)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD2	6	0.4
(1,310)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG13	5	0.4
(1,310)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG13	5	0.4
(1,305)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HG	1	0.4
(1,305)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HG	1	0.4
(1,305)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HG	9	0.4
(1,305)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HG	9	0.4
(1,234)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG3	7	0.4
(1,206)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD2	8	0.4
(1,123)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD11	4	0.4
(1,123)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD12	4	0.4
(1,123)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD13	4	0.4
(1,117)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD11	4	0.4
(1,117)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD12	4	0.4
(1,117)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD13	4	0.4
(1,116)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD21	5	0.4
(1,116)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD22	5	0.4
(1,116)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HD23	5	0.4
(1,90)	1:10:A:GLN:HB3	1:10:A:GLN:HE22	4	0.4
(1,90)	1:10:A:GLN:HB3	1:10:A:GLN:HE22	5	0.4
(1,90)	1:10:A:GLN:HB3	1:10:A:GLN:HE22	6	0.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,90)	1:10:A:GLN:HB3	1:10:A:GLN:HE22	10	0.4
(1,55)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB2	10	0.4
(1,15)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	8	0.4
(1,15)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	8	0.4
(1,15)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	8	0.4
(1,15)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	10	0.4
(1,15)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	10	0.4
(1,15)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	10	0.4
(3,195)	1:12:A:LEU:HB2	1:13:A:LYS:H	7	0.39
(3,190)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:H	10	0.39
(3,188)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:HA3	3	0.39
(3,188)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:HA3	3	0.39
(3,188)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:HA3	3	0.39
(3,169)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HA	10	0.39
(3,169)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HA	10	0.39
(3,169)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HA	10	0.39
(3,132)	1:10:A:GLN:HB3	1:12:A:LEU:H	6	0.39
(3,126)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HB2	7	0.39
(3,123)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HB	2	0.39
(3,123)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HB	4	0.39
(3,123)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HB	5	0.39
(3,120)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:H	3	0.39
(3,120)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:H	4	0.39
(3,81)	1:11:A:TRP:HZ2	1:16:A:GLY:HA2	2	0.39
(3,77)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HA	6	0.39
(3,68)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	4	0.39
(3,68)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	4	0.39
(3,68)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	4	0.39
(3,68)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	4	0.39
(3,68)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	4	0.39
(3,68)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	4	0.39
(3,67)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HG	2	0.39
(3,67)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HG	2	0.39
(3,49)	1:10:A:GLN:HE21	1:13:A:LYS:HB2	9	0.39
(3,49)	1:10:A:GLN:HE21	1:13:A:LYS:HB3	9	0.39
(3,49)	1:10:A:GLN:HE21	1:13:A:LYS:HB2	10	0.39
(3,49)	1:10:A:GLN:HE21	1:13:A:LYS:HB3	10	0.39
(3,29)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HE2	1	0.39
(3,29)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HE3	1	0.39
(3,29)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HE2	3	0.39
(3,29)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HE3	3	0.39
(3,29)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HE2	8	0.39

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,29)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HE3	8	0.39
(3,24)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD11	6	0.39
(3,24)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD12	6	0.39
(3,24)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD13	6	0.39
(3,22)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD11	1	0.39
(3,22)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD12	1	0.39
(3,22)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD13	1	0.39
(3,22)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD11	6	0.39
(3,22)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD12	6	0.39
(3,22)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD13	6	0.39
(2,427)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HB2	3	0.39
(2,427)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HB2	3	0.39
(2,427)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HB2	3	0.39
(2,399)	1:10:A:GLN:HB3	1:13:A:LYS:HD2	4	0.39
(2,399)	1:10:A:GLN:HB3	1:13:A:LYS:HD3	4	0.39
(2,390)	1:23:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	8	0.39
(2,390)	1:23:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	10	0.39
(2,284)	1:11:A:TRP:HE1	1:19:A:SER:HB2	7	0.39
(2,278)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD21	6	0.39
(2,278)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD22	6	0.39
(2,278)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD23	6	0.39
(2,271)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	2	0.39
(2,251)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HG	10	0.39
(2,249)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB2	8	0.39
(2,249)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB2	8	0.39
(2,243)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG13	3	0.39
(2,243)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG13	3	0.39
(2,154)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD3	2	0.39
(1,637)	1:12:A:LEU:HB2	1:13:A:LYS:H	7	0.39
(1,623)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:H	10	0.39
(1,621)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:HA3	3	0.39
(1,621)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:HA3	3	0.39
(1,621)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:HA3	3	0.39
(1,612)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HB2	3	0.39
(1,612)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HB2	3	0.39
(1,612)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HB2	3	0.39
(1,582)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HA	10	0.39
(1,582)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HA	10	0.39
(1,582)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HA	10	0.39
(1,553)	1:10:A:GLN:HB3	1:13:A:LYS:HD2	4	0.39
(1,553)	1:10:A:GLN:HB3	1:13:A:LYS:HD3	4	0.39
(1,538)	1:23:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	8	0.39

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,538)	1:23:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	10	0.39
(1,479)	1:10:A:GLN:HB3	1:12:A:LEU:H	6	0.39
(1,466)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HB2	7	0.39
(1,459)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HB	2	0.39
(1,459)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HB	4	0.39
(1,459)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HB	5	0.39
(1,449)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:H	3	0.39
(1,449)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:H	4	0.39
(1,381)	1:11:A:TRP:HE1	1:19:A:SER:HB2	7	0.39
(1,372)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD21	6	0.39
(1,372)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD22	6	0.39
(1,372)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD23	6	0.39
(1,360)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	2	0.39
(1,341)	1:11:A:TRP:HZ2	1:16:A:GLY:HA2	2	0.39
(1,333)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HA	6	0.39
(1,323)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HG	10	0.39
(1,321)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB2	8	0.39
(1,321)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB2	8	0.39
(1,311)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD1	4	0.39
(1,311)	1:5:A:VAL:HG11	1:8:A:TYR:HD2	4	0.39
(1,311)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD1	4	0.39
(1,311)	1:5:A:VAL:HG12	1:8:A:TYR:HD2	4	0.39
(1,311)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD1	4	0.39
(1,311)	1:5:A:VAL:HG13	1:8:A:TYR:HD2	4	0.39
(1,310)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG13	3	0.39
(1,310)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG13	3	0.39
(1,305)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HG	2	0.39
(1,305)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HG	2	0.39
(1,265)	1:10:A:GLN:HE21	1:13:A:LYS:HB2	9	0.39
(1,265)	1:10:A:GLN:HE21	1:13:A:LYS:HB3	9	0.39
(1,265)	1:10:A:GLN:HE21	1:13:A:LYS:HB2	10	0.39
(1,265)	1:10:A:GLN:HE21	1:13:A:LYS:HB3	10	0.39
(1,187)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD3	2	0.39
(1,141)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HE2	1	0.39
(1,141)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HE3	1	0.39
(1,141)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HE2	3	0.39
(1,141)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HE3	3	0.39
(1,141)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HE2	8	0.39
(1,141)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HE3	8	0.39
(1,123)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD11	6	0.39
(1,123)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD12	6	0.39
(1,123)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD13	6	0.39

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,117)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD11	1	0.39
(1,117)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD12	1	0.39
(1,117)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD13	1	0.39
(1,117)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD11	6	0.39
(1,117)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD12	6	0.39
(1,117)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD13	6	0.39
(3,195)	1:12:A:LEU:HB2	1:13:A:LYS:H	2	0.38
(3,190)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:H	8	0.38
(3,190)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:H	9	0.38
(3,125)	1:7:A:LEU:H	1:10:A:GLN:HB3	10	0.38
(3,123)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HB	6	0.38
(3,121)	1:16:A:GLY:H	1:18:A:SER:HB2	6	0.38
(3,121)	1:16:A:GLY:H	1:18:A:SER:HB3	6	0.38
(3,110)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HB	4	0.38
(3,66)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB3	4	0.38
(3,66)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB3	4	0.38
(3,65)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG2	10	0.38
(3,65)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG2	10	0.38
(3,49)	1:10:A:GLN:HE21	1:13:A:LYS:HB2	1	0.38
(3,49)	1:10:A:GLN:HE21	1:13:A:LYS:HB3	1	0.38
(3,49)	1:10:A:GLN:HE21	1:13:A:LYS:HB2	6	0.38
(3,49)	1:10:A:GLN:HE21	1:13:A:LYS:HB3	6	0.38
(3,37)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD2	5	0.38
(3,36)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG2	3	0.38
(3,36)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG3	3	0.38
(3,36)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG2	10	0.38
(3,36)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG3	10	0.38
(3,28)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HG2	2	0.38
(3,28)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HG2	2	0.38
(3,28)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HG2	7	0.38
(3,28)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HG2	7	0.38
(3,28)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HG2	9	0.38
(3,28)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HG2	9	0.38
(3,24)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD11	1	0.38
(3,24)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD12	1	0.38
(3,24)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD13	1	0.38
(3,24)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD11	2	0.38
(3,24)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD12	2	0.38
(3,24)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD13	2	0.38
(3,22)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD11	2	0.38
(3,22)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD12	2	0.38
(3,22)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD13	2	0.38

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,22)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD11	5	0.38
(3,22)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD12	5	0.38
(3,22)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD13	5	0.38
(2,414)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD21	9	0.38
(2,414)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD22	9	0.38
(2,414)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD23	9	0.38
(2,394)	1:23:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG3	1	0.38
(2,394)	1:23:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG3	2	0.38
(2,394)	1:23:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG3	4	0.38
(2,394)	1:23:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG3	8	0.38
(2,394)	1:23:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG3	9	0.38
(2,390)	1:23:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	4	0.38
(2,390)	1:23:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	7	0.38
(2,278)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD21	3	0.38
(2,278)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD22	3	0.38
(2,278)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD23	3	0.38
(2,271)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	4	0.38
(2,271)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	7	0.38
(2,271)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	8	0.38
(2,271)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	10	0.38
(2,243)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG13	1	0.38
(2,243)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG13	1	0.38
(2,154)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD3	6	0.38
(2,141)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HG3	5	0.38
(2,118)	1:14:A:ASP:H	1:14:A:ASP:HB3	9	0.38
(1,637)	1:12:A:LEU:HB2	1:13:A:LYS:H	2	0.38
(1,623)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:H	8	0.38
(1,623)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:H	9	0.38
(1,583)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD21	9	0.38
(1,583)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD22	9	0.38
(1,583)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD23	9	0.38
(1,547)	1:23:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG3	1	0.38
(1,547)	1:23:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG3	2	0.38
(1,547)	1:23:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG3	4	0.38
(1,547)	1:23:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG3	8	0.38
(1,547)	1:23:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG3	9	0.38
(1,538)	1:23:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	4	0.38
(1,538)	1:23:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	7	0.38
(1,463)	1:7:A:LEU:H	1:10:A:GLN:HB3	10	0.38
(1,459)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HB	6	0.38
(1,450)	1:16:A:GLY:H	1:18:A:SER:HB2	6	0.38
(1,450)	1:16:A:GLY:H	1:18:A:SER:HB3	6	0.38

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,418)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HB	4	0.38
(1,372)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD21	3	0.38
(1,372)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD22	3	0.38
(1,372)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD23	3	0.38
(1,360)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	4	0.38
(1,360)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	7	0.38
(1,360)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	8	0.38
(1,360)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	10	0.38
(1,310)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG13	1	0.38
(1,310)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG13	1	0.38
(1,302)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB3	4	0.38
(1,302)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB3	4	0.38
(1,300)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG2	10	0.38
(1,300)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG2	10	0.38
(1,265)	1:10:A:GLN:HE21	1:13:A:LYS:HB2	1	0.38
(1,265)	1:10:A:GLN:HE21	1:13:A:LYS:HB3	1	0.38
(1,265)	1:10:A:GLN:HE21	1:13:A:LYS:HB2	6	0.38
(1,265)	1:10:A:GLN:HE21	1:13:A:LYS:HB3	6	0.38
(1,220)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD2	5	0.38
(1,214)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG2	3	0.38
(1,214)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG3	3	0.38
(1,214)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG2	10	0.38
(1,214)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG3	10	0.38
(1,187)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD3	6	0.38
(1,172)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HG3	5	0.38
(1,149)	1:14:A:ASP:H	1:14:A:ASP:HB3	9	0.38
(1,137)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HG2	2	0.38
(1,137)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HG2	2	0.38
(1,137)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HG2	7	0.38
(1,137)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HG2	7	0.38
(1,137)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HG2	9	0.38
(1,137)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HG2	9	0.38
(1,123)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD11	1	0.38
(1,123)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD12	1	0.38
(1,123)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD13	1	0.38
(1,123)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD11	2	0.38
(1,123)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD12	2	0.38
(1,123)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD13	2	0.38
(1,117)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD11	2	0.38
(1,117)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD12	2	0.38
(1,117)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD13	2	0.38
(1,117)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD11	5	0.38

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,117)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD12	5	0.38
(1,117)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD13	5	0.38
(3,195)	1:12:A:LEU:HB2	1:13:A:LYS:H	9	0.37
(3,169)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HA	8	0.37
(3,169)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HA	8	0.37
(3,169)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HA	8	0.37
(3,132)	1:10:A:GLN:HB3	1:12:A:LEU:H	2	0.37
(3,125)	1:7:A:LEU:H	1:10:A:GLN:HB3	7	0.37
(3,125)	1:7:A:LEU:H	1:10:A:GLN:HB3	8	0.37
(3,119)	1:14:A:ASP:HA	1:16:A:GLY:H	6	0.37
(3,112)	1:21:A:ARG:HG2	1:22:A:PRO:HD3	6	0.37
(3,106)	1:13:A:LYS:HB2	1:14:A:ASP:HA	6	0.37
(3,106)	1:13:A:LYS:HB3	1:14:A:ASP:HA	6	0.37
(3,106)	1:13:A:LYS:HB2	1:14:A:ASP:HA	9	0.37
(3,106)	1:13:A:LYS:HB3	1:14:A:ASP:HA	9	0.37
(3,89)	1:11:A:TRP:HZ3	1:24:A:PRO:HG3	1	0.37
(3,81)	1:11:A:TRP:HZ2	1:16:A:GLY:HA2	1	0.37
(3,77)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HA	5	0.37
(3,73)	1:11:A:TRP:HZ3	1:17:A:PRO:HA	5	0.37
(3,65)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG2	8	0.37
(3,65)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG2	8	0.37
(3,37)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD2	6	0.37
(3,36)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG2	1	0.37
(3,36)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG3	1	0.37
(3,36)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG2	4	0.37
(3,36)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG3	4	0.37
(3,28)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HG2	1	0.37
(3,28)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HG2	1	0.37
(3,28)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HG2	3	0.37
(3,28)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HG2	3	0.37
(3,28)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HG2	8	0.37
(3,28)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HG2	8	0.37
(3,28)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HG2	10	0.37
(3,28)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HG2	10	0.37
(3,24)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD11	3	0.37
(3,24)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD12	3	0.37
(3,24)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD13	3	0.37
(3,22)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD11	3	0.37
(3,22)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD12	3	0.37
(3,22)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD13	3	0.37
(2,427)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HB2	8	0.37
(2,427)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HB2	8	0.37

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,427)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HB2	8	0.37
(2,394)	1:23:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG3	3	0.37
(2,394)	1:23:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG3	5	0.37
(2,394)	1:23:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG3	7	0.37
(2,390)	1:23:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	3	0.37
(2,390)	1:23:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	6	0.37
(2,329)	1:22:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD3	5	0.37
(2,278)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD21	2	0.37
(2,278)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD22	2	0.37
(2,278)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD23	2	0.37
(2,278)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD21	4	0.37
(2,278)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD22	4	0.37
(2,278)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD23	4	0.37
(2,271)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	1	0.37
(2,209)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HG2	4	0.37
(2,209)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HG3	4	0.37
(2,209)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HG2	5	0.37
(2,209)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HG3	5	0.37
(1,637)	1:12:A:LEU:HB2	1:13:A:LYS:H	9	0.37
(1,612)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HB2	8	0.37
(1,612)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HB2	8	0.37
(1,612)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HB2	8	0.37
(1,582)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HA	8	0.37
(1,582)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HA	8	0.37
(1,582)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HA	8	0.37
(1,547)	1:23:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG3	3	0.37
(1,547)	1:23:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG3	5	0.37
(1,547)	1:23:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG3	7	0.37
(1,538)	1:23:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	3	0.37
(1,538)	1:23:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	6	0.37
(1,479)	1:10:A:GLN:HB3	1:12:A:LEU:H	2	0.37
(1,463)	1:7:A:LEU:H	1:10:A:GLN:HB3	7	0.37
(1,463)	1:7:A:LEU:H	1:10:A:GLN:HB3	8	0.37
(1,448)	1:14:A:ASP:HA	1:16:A:GLY:H	6	0.37
(1,447)	1:22:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD3	5	0.37
(1,431)	1:21:A:ARG:HG2	1:22:A:PRO:HD3	6	0.37
(1,407)	1:13:A:LYS:HB2	1:14:A:ASP:HA	6	0.37
(1,407)	1:13:A:LYS:HB3	1:14:A:ASP:HA	6	0.37
(1,407)	1:13:A:LYS:HB2	1:14:A:ASP:HA	9	0.37
(1,407)	1:13:A:LYS:HB3	1:14:A:ASP:HA	9	0.37
(1,372)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD21	2	0.37
(1,372)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD22	2	0.37

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,372)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD23	2	0.37
(1,372)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD21	4	0.37
(1,372)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD22	4	0.37
(1,372)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD23	4	0.37
(1,360)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	1	0.37
(1,358)	1:11:A:TRP:HZ3	1:24:A:PRO:HG3	1	0.37
(1,341)	1:11:A:TRP:HZ2	1:16:A:GLY:HA2	1	0.37
(1,333)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HA	5	0.37
(1,326)	1:11:A:TRP:HZ3	1:17:A:PRO:HA	5	0.37
(1,300)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG2	8	0.37
(1,300)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG2	8	0.37
(1,253)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HG2	4	0.37
(1,253)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HG3	4	0.37
(1,253)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HG2	5	0.37
(1,253)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HG3	5	0.37
(1,220)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD2	6	0.37
(1,214)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG2	1	0.37
(1,214)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG3	1	0.37
(1,214)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG2	4	0.37
(1,214)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG3	4	0.37
(1,137)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HG2	1	0.37
(1,137)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HG2	1	0.37
(1,137)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HG2	3	0.37
(1,137)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HG2	3	0.37
(1,137)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HG2	8	0.37
(1,137)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HG2	8	0.37
(1,137)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HG2	10	0.37
(1,137)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HG2	10	0.37
(1,123)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD11	3	0.37
(1,123)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD12	3	0.37
(1,123)	1:12:A:LEU:H	1:12:A:LEU:HD13	3	0.37
(1,117)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD11	3	0.37
(1,117)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD12	3	0.37
(1,117)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD13	3	0.37
(3,163)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	7	0.36
(3,163)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	7	0.36
(3,163)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	7	0.36
(3,148)	1:5:A:VAL:H	1:7:A:LEU:HD21	9	0.36
(3,148)	1:5:A:VAL:H	1:7:A:LEU:HD22	9	0.36
(3,148)	1:5:A:VAL:H	1:7:A:LEU:HD23	9	0.36
(3,132)	1:10:A:GLN:HB3	1:12:A:LEU:H	1	0.36
(3,132)	1:10:A:GLN:HB3	1:12:A:LEU:H	3	0.36

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,132)	1:10:A:GLN:HB3	1:12:A:LEU:H	5	0.36
(3,120)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:H	6	0.36
(3,110)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HB	2	0.36
(3,110)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HB	5	0.36
(3,110)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HB	9	0.36
(3,106)	1:13:A:LYS:HB2	1:14:A:ASP:HA	2	0.36
(3,106)	1:13:A:LYS:HB3	1:14:A:ASP:HA	2	0.36
(3,106)	1:13:A:LYS:HB2	1:14:A:ASP:HA	7	0.36
(3,106)	1:13:A:LYS:HB3	1:14:A:ASP:HA	7	0.36
(3,103)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG2	6	0.36
(3,103)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG3	6	0.36
(3,102)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:HD1	4	0.36
(3,102)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:HD2	4	0.36
(3,89)	1:11:A:TRP:HZ3	1:24:A:PRO:HG3	6	0.36
(3,77)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HA	3	0.36
(3,55)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HD2	8	0.36
(3,54)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HD1	4	0.36
(3,54)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HD2	4	0.36
(3,36)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG2	2	0.36
(3,36)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG3	2	0.36
(3,35)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD2	3	0.36
(3,34)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG2	6	0.36
(3,34)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HG2	6	0.36
(3,28)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HG2	5	0.36
(3,28)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HG2	5	0.36
(2,466)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HD3	3	0.36
(2,466)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HD3	6	0.36
(2,457)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HG2	8	0.36
(2,441)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD11	6	0.36
(2,441)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD12	6	0.36
(2,441)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD13	6	0.36
(2,427)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HB2	10	0.36
(2,427)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HB2	10	0.36
(2,427)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HB2	10	0.36
(2,414)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD21	7	0.36
(2,414)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD22	7	0.36
(2,414)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD23	7	0.36
(2,394)	1:23:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG3	10	0.36
(2,390)	1:23:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	5	0.36
(2,278)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD21	1	0.36
(2,278)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD22	1	0.36
(2,278)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD23	1	0.36

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,275)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD21	8	0.36
(2,275)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD22	8	0.36
(2,275)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD23	8	0.36
(2,209)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HG2	7	0.36
(2,209)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HG3	7	0.36
(2,209)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HG2	9	0.36
(2,209)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HG3	9	0.36
(2,96)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD21	8	0.36
(2,96)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD22	8	0.36
(2,96)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD23	8	0.36
(2,96)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD21	10	0.36
(2,96)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD22	10	0.36
(2,96)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD23	10	0.36
(2,31)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HD2	4	0.36
(1,666)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HD3	3	0.36
(1,666)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HD3	6	0.36
(1,654)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HG2	8	0.36
(1,634)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD11	6	0.36
(1,634)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD12	6	0.36
(1,634)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD13	6	0.36
(1,612)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HB2	10	0.36
(1,612)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HB2	10	0.36
(1,612)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HB2	10	0.36
(1,583)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD21	7	0.36
(1,583)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD22	7	0.36
(1,583)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:LEU:HD23	7	0.36
(1,575)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	7	0.36
(1,575)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	7	0.36
(1,575)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	7	0.36
(1,547)	1:23:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG3	10	0.36
(1,538)	1:23:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	5	0.36
(1,533)	1:5:A:VAL:H	1:7:A:LEU:HD21	9	0.36
(1,533)	1:5:A:VAL:H	1:7:A:LEU:HD22	9	0.36
(1,533)	1:5:A:VAL:H	1:7:A:LEU:HD23	9	0.36
(1,479)	1:10:A:GLN:HB3	1:12:A:LEU:H	1	0.36
(1,479)	1:10:A:GLN:HB3	1:12:A:LEU:H	3	0.36
(1,479)	1:10:A:GLN:HB3	1:12:A:LEU:H	5	0.36
(1,449)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:H	6	0.36
(1,418)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HB	2	0.36
(1,418)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HB	5	0.36
(1,418)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HB	9	0.36
(1,407)	1:13:A:LYS:HB2	1:14:A:ASP:HA	2	0.36

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,407)	1:13:A:LYS:HB3	1:14:A:ASP:HA	2	0.36
(1,407)	1:13:A:LYS:HB2	1:14:A:ASP:HA	7	0.36
(1,407)	1:13:A:LYS:HB3	1:14:A:ASP:HA	7	0.36
(1,403)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG2	6	0.36
(1,403)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HG3	6	0.36
(1,402)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:HD1	4	0.36
(1,402)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:HD2	4	0.36
(1,372)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD21	1	0.36
(1,372)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD22	1	0.36
(1,372)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD23	1	0.36
(1,368)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD21	8	0.36
(1,368)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD22	8	0.36
(1,368)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD23	8	0.36
(1,358)	1:11:A:TRP:HZ3	1:24:A:PRO:HG3	6	0.36
(1,333)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HA	3	0.36
(1,277)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HD2	8	0.36
(1,275)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HD1	4	0.36
(1,275)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HD2	4	0.36
(1,253)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HG2	7	0.36
(1,253)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HG3	7	0.36
(1,253)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HG2	9	0.36
(1,253)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HG3	9	0.36
(1,214)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG2	2	0.36
(1,214)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HG3	2	0.36
(1,206)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD2	3	0.36
(1,199)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG2	6	0.36
(1,199)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HG2	6	0.36
(1,137)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HG2	5	0.36
(1,137)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HG2	5	0.36
(1,118)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD21	8	0.36
(1,118)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD22	8	0.36
(1,118)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD23	8	0.36
(1,118)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD21	10	0.36
(1,118)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD22	10	0.36
(1,118)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD23	10	0.36
(1,35)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HD2	4	0.36
(3,195)	1:12:A:LEU:HB2	1:13:A:LYS:H	1	0.35
(3,164)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HA	1	0.35
(3,164)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HA	1	0.35
(3,164)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HA	1	0.35
(3,164)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HA	2	0.35
(3,164)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HA	2	0.35

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,164)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HA	2	0.35
(3,164)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HA	5	0.35
(3,164)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HA	5	0.35
(3,164)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HA	5	0.35
(3,164)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HA	6	0.35
(3,164)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HA	6	0.35
(3,164)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HA	6	0.35
(3,164)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HA	9	0.35
(3,164)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HA	9	0.35
(3,164)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HA	9	0.35
(3,123)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HB	8	0.35
(3,106)	1:13:A:LYS:HB2	1:14:A:ASP:HA	5	0.35
(3,106)	1:13:A:LYS:HB3	1:14:A:ASP:HA	5	0.35
(3,81)	1:11:A:TRP:HZ2	1:16:A:GLY:HA2	10	0.35
(3,77)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HA	4	0.35
(3,49)	1:10:A:GLN:HE21	1:13:A:LYS:HB2	4	0.35
(3,49)	1:10:A:GLN:HE21	1:13:A:LYS:HB3	4	0.35
(3,49)	1:10:A:GLN:HE21	1:13:A:LYS:HB2	5	0.35
(3,49)	1:10:A:GLN:HE21	1:13:A:LYS:HB3	5	0.35
(3,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	3	0.35
(3,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	3	0.35
(3,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	3	0.35
(2,457)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HG2	1	0.35
(2,441)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD11	3	0.35
(2,441)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD12	3	0.35
(2,441)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD13	3	0.35
(2,441)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD11	4	0.35
(2,441)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD12	4	0.35
(2,441)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD13	4	0.35
(2,441)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD11	5	0.35
(2,441)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD12	5	0.35
(2,441)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD13	5	0.35
(2,390)	1:23:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	2	0.35
(2,390)	1:23:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	9	0.35
(2,330)	1:16:A:GLY:H	1:17:A:PRO:HD2	9	0.35
(2,314)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HD2	7	0.35
(2,284)	1:11:A:TRP:HE1	1:19:A:SER:HB2	9	0.35
(2,275)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD21	10	0.35
(2,275)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD22	10	0.35
(2,275)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD23	10	0.35
(2,271)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	3	0.35
(2,249)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB2	10	0.35

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,249)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB2	10	0.35
(2,209)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HG2	1	0.35
(2,209)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HG3	1	0.35
(2,209)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HG2	6	0.35
(2,209)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HG3	6	0.35
(2,209)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HG2	8	0.35
(2,209)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HG3	8	0.35
(2,209)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HG2	10	0.35
(2,209)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HG3	10	0.35
(2,118)	1:14:A:ASP:H	1:14:A:ASP:HB3	7	0.35
(2,118)	1:14:A:ASP:H	1:14:A:ASP:HB3	8	0.35
(2,115)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HG3	6	0.35
(2,24)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HD3	4	0.35
(1,654)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HG2	1	0.35
(1,637)	1:12:A:LEU:HB2	1:13:A:LYS:H	1	0.35
(1,634)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD11	3	0.35
(1,634)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD12	3	0.35
(1,634)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD13	3	0.35
(1,634)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD11	4	0.35
(1,634)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD12	4	0.35
(1,634)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD13	4	0.35
(1,634)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD11	5	0.35
(1,634)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD12	5	0.35
(1,634)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD13	5	0.35
(1,577)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HA	1	0.35
(1,577)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HA	1	0.35
(1,577)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HA	1	0.35
(1,577)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HA	2	0.35
(1,577)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HA	2	0.35
(1,577)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HA	2	0.35
(1,577)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HA	5	0.35
(1,577)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HA	5	0.35
(1,577)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HA	5	0.35
(1,577)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HA	6	0.35
(1,577)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HA	6	0.35
(1,577)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HA	6	0.35
(1,577)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HA	9	0.35
(1,577)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HA	9	0.35
(1,577)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HA	9	0.35
(1,538)	1:23:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	2	0.35
(1,538)	1:23:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD3	9	0.35
(1,459)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HB	8	0.35

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,451)	1:16:A:GLY:H	1:17:A:PRO:HD2	9	0.35
(1,424)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HD2	7	0.35
(1,407)	1:13:A:LYS:HB2	1:14:A:ASP:HA	5	0.35
(1,407)	1:13:A:LYS:HB3	1:14:A:ASP:HA	5	0.35
(1,381)	1:11:A:TRP:HE1	1:19:A:SER:HB2	9	0.35
(1,368)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD21	10	0.35
(1,368)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD22	10	0.35
(1,368)	1:11:A:TRP:HH2	1:12:A:LEU:HD23	10	0.35
(1,360)	1:11:A:TRP:HH2	1:23:A:PRO:HG2	3	0.35
(1,341)	1:11:A:TRP:HZ2	1:16:A:GLY:HA2	10	0.35
(1,333)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HA	4	0.35
(1,321)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB2	10	0.35
(1,321)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB2	10	0.35
(1,265)	1:10:A:GLN:HE21	1:13:A:LYS:HB2	4	0.35
(1,265)	1:10:A:GLN:HE21	1:13:A:LYS:HB3	4	0.35
(1,265)	1:10:A:GLN:HE21	1:13:A:LYS:HB2	5	0.35
(1,265)	1:10:A:GLN:HE21	1:13:A:LYS:HB3	5	0.35
(1,253)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HG2	1	0.35
(1,253)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HG3	1	0.35
(1,253)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HG2	6	0.35
(1,253)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HG3	6	0.35
(1,253)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HG2	8	0.35
(1,253)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HG3	8	0.35
(1,253)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HG2	10	0.35
(1,253)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HG3	10	0.35
(1,149)	1:14:A:ASP:H	1:14:A:ASP:HB3	7	0.35
(1,149)	1:14:A:ASP:H	1:14:A:ASP:HB3	8	0.35
(1,145)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HG3	6	0.35
(1,28)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HD3	4	0.35
(1,15)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	3	0.35
(1,15)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	3	0.35
(1,15)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	3	0.35
(3,195)	1:12:A:LEU:HB2	1:13:A:LYS:H	8	0.34
(3,190)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:H	5	0.34
(3,164)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HA	7	0.34
(3,164)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HA	7	0.34
(3,164)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HA	7	0.34
(3,163)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	2	0.34
(3,163)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	2	0.34
(3,163)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	2	0.34
(3,163)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	3	0.34
(3,163)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	3	0.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,163)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	3	0.34
(3,148)	1:5:A:VAL:H	1:7:A:LEU:HD21	3	0.34
(3,148)	1:5:A:VAL:H	1:7:A:LEU:HD22	3	0.34
(3,148)	1:5:A:VAL:H	1:7:A:LEU:HD23	3	0.34
(3,135)	1:7:A:LEU:HB2	1:8:A:TYR:H	5	0.34
(3,123)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HB	3	0.34
(3,123)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HB	10	0.34
(3,106)	1:13:A:LYS:HB2	1:14:A:ASP:HA	1	0.34
(3,106)	1:13:A:LYS:HB3	1:14:A:ASP:HA	1	0.34
(3,106)	1:13:A:LYS:HB2	1:14:A:ASP:HA	10	0.34
(3,106)	1:13:A:LYS:HB3	1:14:A:ASP:HA	10	0.34
(3,99)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:H	10	0.34
(3,89)	1:11:A:TRP:HZ3	1:24:A:PRO:HG3	4	0.34
(3,89)	1:11:A:TRP:HZ3	1:24:A:PRO:HG3	8	0.34
(3,87)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HB2	7	0.34
(3,87)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HB2	10	0.34
(3,82)	1:11:A:TRP:HE3	1:16:A:GLY:HA2	1	0.34
(3,67)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HG	7	0.34
(3,67)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HG	7	0.34
(3,62)	1:11:A:TRP:HD1	1:24:A:PRO:HD3	5	0.34
(3,35)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD2	4	0.34
(2,457)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HG2	2	0.34
(2,457)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HG2	4	0.34
(2,457)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HG2	5	0.34
(2,457)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HG2	10	0.34
(2,429)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HG3	4	0.34
(2,429)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HG3	4	0.34
(2,429)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HG3	4	0.34
(2,347)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:H	9	0.34
(2,347)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:H	9	0.34
(2,347)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:H	9	0.34
(2,330)	1:16:A:GLY:H	1:17:A:PRO:HD2	7	0.34
(2,314)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HD2	9	0.34
(2,303)	1:11:A:TRP:HA	1:14:A:ASP:HB3	8	0.34
(2,265)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HB2	3	0.34
(2,209)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HG2	2	0.34
(2,209)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HG3	2	0.34
(2,96)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD21	7	0.34
(2,96)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD22	7	0.34
(2,96)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD23	7	0.34
(2,96)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD21	9	0.34
(2,96)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD22	9	0.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,96)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD23	9	0.34
(1,654)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HG2	2	0.34
(1,654)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HG2	4	0.34
(1,654)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HG2	5	0.34
(1,654)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HG2	10	0.34
(1,637)	1:12:A:LEU:HB2	1:13:A:LYS:H	8	0.34
(1,623)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:H	5	0.34
(1,614)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HG3	4	0.34
(1,614)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HG3	4	0.34
(1,614)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HG3	4	0.34
(1,577)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HA	7	0.34
(1,577)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HA	7	0.34
(1,577)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HA	7	0.34
(1,575)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	2	0.34
(1,575)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	2	0.34
(1,575)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	2	0.34
(1,575)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	3	0.34
(1,575)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	3	0.34
(1,575)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	3	0.34
(1,533)	1:5:A:VAL:H	1:7:A:LEU:HD21	3	0.34
(1,533)	1:5:A:VAL:H	1:7:A:LEU:HD22	3	0.34
(1,533)	1:5:A:VAL:H	1:7:A:LEU:HD23	3	0.34
(1,491)	1:7:A:LEU:HB2	1:8:A:TYR:H	5	0.34
(1,478)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:H	9	0.34
(1,478)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:H	9	0.34
(1,478)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:H	9	0.34
(1,459)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HB	3	0.34
(1,459)	1:4:A:ALA:H	1:5:A:VAL:HB	10	0.34
(1,451)	1:16:A:GLY:H	1:17:A:PRO:HD2	7	0.34
(1,424)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HD2	9	0.34
(1,409)	1:11:A:TRP:HA	1:14:A:ASP:HB3	8	0.34
(1,407)	1:13:A:LYS:HB2	1:14:A:ASP:HA	1	0.34
(1,407)	1:13:A:LYS:HB3	1:14:A:ASP:HA	1	0.34
(1,407)	1:13:A:LYS:HB2	1:14:A:ASP:HA	10	0.34
(1,407)	1:13:A:LYS:HB3	1:14:A:ASP:HA	10	0.34
(1,388)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:H	10	0.34
(1,358)	1:11:A:TRP:HZ3	1:24:A:PRO:HG3	4	0.34
(1,358)	1:11:A:TRP:HZ3	1:24:A:PRO:HG3	8	0.34
(1,354)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HB2	7	0.34
(1,354)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HB2	10	0.34
(1,347)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HB2	3	0.34
(1,343)	1:11:A:TRP:HE3	1:16:A:GLY:HA2	1	0.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,305)	1:8:A:TYR:HE1	1:12:A:LEU:HG	7	0.34
(1,305)	1:8:A:TYR:HE2	1:12:A:LEU:HG	7	0.34
(1,295)	1:11:A:TRP:HD1	1:24:A:PRO:HD3	5	0.34
(1,253)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HG2	2	0.34
(1,253)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HG3	2	0.34
(1,206)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD2	4	0.34
(1,118)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD21	7	0.34
(1,118)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD22	7	0.34
(1,118)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD23	7	0.34
(1,118)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD21	9	0.34
(1,118)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD22	9	0.34
(1,118)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD23	9	0.34
(3,195)	1:12:A:LEU:HB2	1:13:A:LYS:H	5	0.33
(3,190)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:H	1	0.33
(3,190)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:H	4	0.33
(3,188)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:HA3	6	0.33
(3,188)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:HA3	6	0.33
(3,188)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:HA3	6	0.33
(3,164)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HA	4	0.33
(3,164)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HA	4	0.33
(3,164)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HA	4	0.33
(3,125)	1:7:A:LEU:H	1:10:A:GLN:HB3	9	0.33
(3,112)	1:21:A:ARG:HG2	1:22:A:PRO:HD3	5	0.33
(3,110)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HB	1	0.33
(3,89)	1:11:A:TRP:HZ3	1:24:A:PRO:HG3	2	0.33
(3,89)	1:11:A:TRP:HZ3	1:24:A:PRO:HG3	7	0.33
(3,87)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HB2	9	0.33
(3,81)	1:11:A:TRP:HZ2	1:16:A:GLY:HA2	4	0.33
(3,62)	1:11:A:TRP:HD1	1:24:A:PRO:HD3	6	0.33
(3,35)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD2	1	0.33
(3,29)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HE2	5	0.33
(3,29)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HE3	5	0.33
(3,5)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HD3	3	0.33
(2,430)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HG3	4	0.33
(2,430)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HG3	4	0.33
(2,430)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HG3	4	0.33
(2,347)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:H	7	0.33
(2,347)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:H	7	0.33
(2,347)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:H	7	0.33
(2,305)	1:3:A:GLU:HA	1:6:A:ARG:HG3	1	0.33
(2,305)	1:3:A:GLU:HA	1:6:A:ARG:HG3	9	0.33
(2,280)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HG3	5	0.33

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,278)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD21	5	0.33
(2,278)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD22	5	0.33
(2,278)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD23	5	0.33
(2,270)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	8	0.33
(2,270)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	9	0.33
(2,259)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD2	5	0.33
(2,154)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD3	5	0.33
(2,31)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HD2	10	0.33
(1,637)	1:12:A:LEU:HB2	1:13:A:LYS:H	5	0.33
(1,623)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:H	1	0.33
(1,623)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:H	4	0.33
(1,621)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:HA3	6	0.33
(1,621)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:HA3	6	0.33
(1,621)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:HA3	6	0.33
(1,615)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HG3	4	0.33
(1,615)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HG3	4	0.33
(1,615)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HG3	4	0.33
(1,577)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HA	4	0.33
(1,577)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HA	4	0.33
(1,577)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HA	4	0.33
(1,478)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:H	7	0.33
(1,478)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:H	7	0.33
(1,478)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:H	7	0.33
(1,463)	1:7:A:LEU:H	1:10:A:GLN:HB3	9	0.33
(1,431)	1:21:A:ARG:HG2	1:22:A:PRO:HD3	5	0.33
(1,418)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HB	1	0.33
(1,413)	1:3:A:GLU:HA	1:6:A:ARG:HG3	1	0.33
(1,413)	1:3:A:GLU:HA	1:6:A:ARG:HG3	9	0.33
(1,374)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HG3	5	0.33
(1,372)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD21	5	0.33
(1,372)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD22	5	0.33
(1,372)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HD23	5	0.33
(1,359)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	8	0.33
(1,359)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	9	0.33
(1,358)	1:11:A:TRP:HZ3	1:24:A:PRO:HG3	2	0.33
(1,358)	1:11:A:TRP:HZ3	1:24:A:PRO:HG3	7	0.33
(1,354)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HB2	9	0.33
(1,341)	1:11:A:TRP:HZ2	1:16:A:GLY:HA2	4	0.33
(1,336)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HD2	5	0.33
(1,295)	1:11:A:TRP:HD1	1:24:A:PRO:HD3	6	0.33
(1,206)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD2	1	0.33
(1,187)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD3	5	0.33

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,141)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HE2	5	0.33
(1,141)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HE3	5	0.33
(1,36)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HD3	3	0.33
(1,35)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HD2	10	0.33
(3,198)	1:19:A:SER:HB2	1:21:A:ARG:HG3	1	0.32
(3,198)	1:19:A:SER:HB2	1:21:A:ARG:HG3	4	0.32
(3,190)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:H	2	0.32
(3,163)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	1	0.32
(3,163)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	1	0.32
(3,163)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	1	0.32
(3,135)	1:7:A:LEU:HB2	1:8:A:TYR:H	2	0.32
(3,135)	1:7:A:LEU:HB2	1:8:A:TYR:H	3	0.32
(3,82)	1:11:A:TRP:HE3	1:16:A:GLY:HA2	4	0.32
(3,77)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HA	1	0.32
(3,47)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG3	3	0.32
(3,35)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD2	2	0.32
(3,34)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG2	5	0.32
(3,34)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HG2	5	0.32
(3,32)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HG3	5	0.32
(3,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	4	0.32
(3,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	4	0.32
(3,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	4	0.32
(2,457)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HG2	7	0.32
(2,457)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HG2	9	0.32
(2,441)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD11	1	0.32
(2,441)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD12	1	0.32
(2,441)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD13	1	0.32
(2,441)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD11	2	0.32
(2,441)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD12	2	0.32
(2,441)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD13	2	0.32
(2,430)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HG3	2	0.32
(2,430)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HG3	2	0.32
(2,430)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HG3	2	0.32
(2,430)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HG3	9	0.32
(2,430)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HG3	9	0.32
(2,430)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HG3	9	0.32
(2,358)	1:7:A:LEU:HB3	1:8:A:TYR:H	9	0.32
(2,358)	1:7:A:LEU:HB3	1:8:A:TYR:H	10	0.32
(2,305)	1:3:A:GLU:HA	1:6:A:ARG:HG3	6	0.32
(2,270)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	6	0.32
(2,270)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	7	0.32
(2,265)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HB2	6	0.32

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,147)	1:19:A:SER:HA	1:19:A:SER:HB3	7	0.32
(2,147)	1:19:A:SER:HA	1:19:A:SER:HB3	8	0.32
(2,147)	1:19:A:SER:HA	1:19:A:SER:HB3	9	0.32
(2,141)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HG3	1	0.32
(2,141)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HG3	3	0.32
(2,141)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HG3	6	0.32
(2,141)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HG3	7	0.32
(2,141)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HG3	9	0.32
(2,31)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HD2	3	0.32
(1,657)	1:19:A:SER:HB2	1:21:A:ARG:HG3	1	0.32
(1,657)	1:19:A:SER:HB2	1:21:A:ARG:HG3	4	0.32
(1,654)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HG2	7	0.32
(1,654)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HG2	9	0.32
(1,634)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD11	1	0.32
(1,634)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD12	1	0.32
(1,634)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD13	1	0.32
(1,634)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD11	2	0.32
(1,634)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD12	2	0.32
(1,634)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:HD13	2	0.32
(1,623)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:H	2	0.32
(1,615)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HG3	2	0.32
(1,615)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HG3	2	0.32
(1,615)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HG3	2	0.32
(1,615)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HG3	9	0.32
(1,615)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HG3	9	0.32
(1,615)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HG3	9	0.32
(1,575)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	1	0.32
(1,575)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	1	0.32
(1,575)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	1	0.32
(1,493)	1:7:A:LEU:HB3	1:8:A:TYR:H	9	0.32
(1,493)	1:7:A:LEU:HB3	1:8:A:TYR:H	10	0.32
(1,491)	1:7:A:LEU:HB2	1:8:A:TYR:H	2	0.32
(1,491)	1:7:A:LEU:HB2	1:8:A:TYR:H	3	0.32
(1,413)	1:3:A:GLU:HA	1:6:A:ARG:HG3	6	0.32
(1,359)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	6	0.32
(1,359)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	7	0.32
(1,347)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HB2	6	0.32
(1,343)	1:11:A:TRP:HE3	1:16:A:GLY:HA2	4	0.32
(1,333)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HA	1	0.32
(1,260)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG3	3	0.32
(1,206)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD2	2	0.32
(1,199)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG2	5	0.32

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,199)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HG2	5	0.32
(1,179)	1:19:A:SER:HA	1:19:A:SER:HB3	7	0.32
(1,179)	1:19:A:SER:HA	1:19:A:SER:HB3	8	0.32
(1,179)	1:19:A:SER:HA	1:19:A:SER:HB3	9	0.32
(1,174)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HG3	5	0.32
(1,172)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HG3	1	0.32
(1,172)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HG3	3	0.32
(1,172)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HG3	6	0.32
(1,172)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HG3	7	0.32
(1,172)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HG3	9	0.32
(1,35)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HD2	3	0.32
(1,15)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	4	0.32
(1,15)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	4	0.32
(1,15)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	4	0.32
(3,199)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HA	1	0.31
(3,199)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HA	1	0.31
(3,199)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HA	1	0.31
(3,199)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HA	6	0.31
(3,199)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HA	6	0.31
(3,199)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HA	6	0.31
(3,190)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:H	6	0.31
(3,164)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HA	3	0.31
(3,164)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HA	3	0.31
(3,164)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HA	3	0.31
(3,163)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	5	0.31
(3,163)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	5	0.31
(3,163)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	5	0.31
(3,148)	1:5:A:VAL:H	1:7:A:LEU:HD21	4	0.31
(3,148)	1:5:A:VAL:H	1:7:A:LEU:HD22	4	0.31
(3,148)	1:5:A:VAL:H	1:7:A:LEU:HD23	4	0.31
(3,135)	1:7:A:LEU:HB2	1:8:A:TYR:H	1	0.31
(3,135)	1:7:A:LEU:HB2	1:8:A:TYR:H	6	0.31
(3,110)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HB	6	0.31
(3,87)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HB2	8	0.31
(3,81)	1:11:A:TRP:HZ2	1:16:A:GLY:HA2	7	0.31
(3,77)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HA	2	0.31
(3,55)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HD2	7	0.31
(3,55)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HD2	9	0.31
(3,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	1	0.31
(3,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	1	0.31
(3,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	1	0.31
(3,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	2	0.31

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	2	0.31
(3,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	2	0.31
(3,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	6	0.31
(3,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	6	0.31
(3,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	6	0.31
(3,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	9	0.31
(3,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	9	0.31
(3,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	9	0.31
(2,457)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HG2	3	0.31
(2,430)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HG3	1	0.31
(2,430)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HG3	1	0.31
(2,430)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HG3	1	0.31
(2,430)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HG3	5	0.31
(2,430)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HG3	5	0.31
(2,430)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HG3	5	0.31
(2,430)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HG3	6	0.31
(2,430)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HG3	6	0.31
(2,430)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HG3	6	0.31
(2,305)	1:3:A:GLU:HA	1:6:A:ARG:HG3	4	0.31
(2,183)	1:22:A:PRO:HD3	1:22:A:PRO:HG2	7	0.31
(2,183)	1:22:A:PRO:HD3	1:22:A:PRO:HG2	8	0.31
(2,183)	1:22:A:PRO:HD3	1:22:A:PRO:HG2	9	0.31
(2,167)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HD2	8	0.31
(2,141)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HG3	2	0.31
(2,141)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HG3	4	0.31
(2,141)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HG3	8	0.31
(2,141)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HG3	10	0.31
(2,115)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HG3	4	0.31
(2,31)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HD2	8	0.31
(1,660)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HA	1	0.31
(1,660)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HA	1	0.31
(1,660)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HA	1	0.31
(1,660)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HA	6	0.31
(1,660)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HA	6	0.31
(1,660)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HA	6	0.31
(1,654)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HG2	3	0.31
(1,623)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:H	6	0.31
(1,615)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HG3	1	0.31
(1,615)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HG3	1	0.31
(1,615)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HG3	1	0.31
(1,615)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HG3	5	0.31
(1,615)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HG3	5	0.31

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,615)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HG3	5	0.31
(1,615)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HG3	6	0.31
(1,615)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HG3	6	0.31
(1,615)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HG3	6	0.31
(1,577)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HA	3	0.31
(1,577)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HA	3	0.31
(1,577)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HA	3	0.31
(1,575)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	5	0.31
(1,575)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	5	0.31
(1,575)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	5	0.31
(1,533)	1:5:A:VAL:H	1:7:A:LEU:HD21	4	0.31
(1,533)	1:5:A:VAL:H	1:7:A:LEU:HD22	4	0.31
(1,533)	1:5:A:VAL:H	1:7:A:LEU:HD23	4	0.31
(1,491)	1:7:A:LEU:HB2	1:8:A:TYR:H	1	0.31
(1,491)	1:7:A:LEU:HB2	1:8:A:TYR:H	6	0.31
(1,418)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HB	6	0.31
(1,413)	1:3:A:GLU:HA	1:6:A:ARG:HG3	4	0.31
(1,354)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HB2	8	0.31
(1,341)	1:11:A:TRP:HZ2	1:16:A:GLY:HA2	7	0.31
(1,333)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HA	2	0.31
(1,277)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HD2	7	0.31
(1,277)	1:11:A:TRP:HD1	1:22:A:PRO:HD2	9	0.31
(1,219)	1:22:A:PRO:HD3	1:22:A:PRO:HG2	7	0.31
(1,219)	1:22:A:PRO:HD3	1:22:A:PRO:HG2	8	0.31
(1,219)	1:22:A:PRO:HD3	1:22:A:PRO:HG2	9	0.31
(1,201)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HD2	8	0.31
(1,172)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HG3	2	0.31
(1,172)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HG3	4	0.31
(1,172)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HG3	8	0.31
(1,172)	1:17:A:PRO:HB2	1:17:A:PRO:HG3	10	0.31
(1,145)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HG3	4	0.31
(1,35)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HD2	8	0.31
(1,15)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	1	0.31
(1,15)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	1	0.31
(1,15)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	1	0.31
(1,15)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	2	0.31
(1,15)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	2	0.31
(1,15)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	2	0.31
(1,15)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	6	0.31
(1,15)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	6	0.31
(1,15)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	6	0.31
(1,15)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	9	0.31

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,15)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	9	0.31
(1,15)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	9	0.31
(3,199)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HA	4	0.3
(3,199)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HA	4	0.3
(3,199)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HA	4	0.3
(3,199)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HA	5	0.3
(3,199)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HA	5	0.3
(3,199)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HA	5	0.3
(3,199)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HA	7	0.3
(3,199)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HA	7	0.3
(3,199)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HA	7	0.3
(3,199)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HA	9	0.3
(3,199)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HA	9	0.3
(3,199)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HA	9	0.3
(3,198)	1:19:A:SER:HB2	1:21:A:ARG:HG3	2	0.3
(3,195)	1:12:A:LEU:HB2	1:13:A:LYS:H	10	0.3
(3,190)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:H	3	0.3
(3,156)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HB	2	0.3
(3,156)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HB	2	0.3
(3,156)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HB	2	0.3
(3,156)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HB	4	0.3
(3,156)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HB	4	0.3
(3,156)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HB	4	0.3
(3,156)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HB	6	0.3
(3,156)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HB	6	0.3
(3,156)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HB	6	0.3
(3,156)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HB	7	0.3
(3,156)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HB	7	0.3
(3,156)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HB	7	0.3
(3,148)	1:5:A:VAL:H	1:7:A:LEU:HD21	6	0.3
(3,148)	1:5:A:VAL:H	1:7:A:LEU:HD22	6	0.3
(3,148)	1:5:A:VAL:H	1:7:A:LEU:HD23	6	0.3
(3,148)	1:5:A:VAL:H	1:7:A:LEU:HD21	7	0.3
(3,148)	1:5:A:VAL:H	1:7:A:LEU:HD22	7	0.3
(3,148)	1:5:A:VAL:H	1:7:A:LEU:HD23	7	0.3
(3,135)	1:7:A:LEU:HB2	1:8:A:TYR:H	4	0.3
(3,99)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:H	9	0.3
(3,89)	1:11:A:TRP:HZ3	1:24:A:PRO:HG3	5	0.3
(3,89)	1:11:A:TRP:HZ3	1:24:A:PRO:HG3	9	0.3
(3,81)	1:11:A:TRP:HZ2	1:16:A:GLY:HA2	9	0.3
(3,39)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG2	1	0.3
(3,39)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG2	2	0.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,39)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG2	3	0.3
(3,39)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG2	4	0.3
(3,39)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG2	7	0.3
(3,39)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG2	9	0.3
(3,38)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD3	7	0.3
(3,38)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD3	8	0.3
(3,38)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD3	9	0.3
(3,22)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD11	7	0.3
(3,22)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD12	7	0.3
(3,22)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD13	7	0.3
(3,22)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD11	9	0.3
(3,22)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD12	9	0.3
(3,22)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD13	9	0.3
(3,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	5	0.3
(3,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	5	0.3
(3,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	5	0.3
(3,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	7	0.3
(3,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	7	0.3
(3,1)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	7	0.3
(2,457)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HG2	6	0.3
(2,442)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:H	7	0.3
(2,442)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:H	7	0.3
(2,442)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:H	7	0.3
(2,429)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HG3	2	0.3
(2,429)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HG3	2	0.3
(2,429)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HG3	2	0.3
(2,429)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HG3	5	0.3
(2,429)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HG3	5	0.3
(2,429)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HG3	5	0.3
(2,310)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG2	4	0.3
(2,310)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG2	6	0.3
(2,305)	1:3:A:GLU:HA	1:6:A:ARG:HG3	2	0.3
(2,305)	1:3:A:GLU:HA	1:6:A:ARG:HG3	5	0.3
(2,270)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	3	0.3
(2,209)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HG2	3	0.3
(2,209)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HG3	3	0.3
(2,114)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HG2	4	0.3
(1,660)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HA	4	0.3
(1,660)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HA	4	0.3
(1,660)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HA	4	0.3
(1,660)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HA	5	0.3
(1,660)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HA	5	0.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,660)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HA	5	0.3
(1,660)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HA	7	0.3
(1,660)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HA	7	0.3
(1,660)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HA	7	0.3
(1,660)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HA	9	0.3
(1,660)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HA	9	0.3
(1,660)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HA	9	0.3
(1,657)	1:19:A:SER:HB2	1:21:A:ARG:HG3	2	0.3
(1,654)	1:8:A:TYR:HA	1:24:A:PRO:HG2	6	0.3
(1,637)	1:12:A:LEU:HB2	1:13:A:LYS:H	10	0.3
(1,636)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:H	7	0.3
(1,636)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:H	7	0.3
(1,636)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:H	7	0.3
(1,623)	1:9:A:ILE:H	1:12:A:LEU:H	3	0.3
(1,614)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HG3	2	0.3
(1,614)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HG3	2	0.3
(1,614)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HG3	2	0.3
(1,614)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HG3	5	0.3
(1,614)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HG3	5	0.3
(1,614)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HG3	5	0.3
(1,562)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HB	2	0.3
(1,562)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HB	2	0.3
(1,562)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HB	2	0.3
(1,562)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HB	4	0.3
(1,562)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HB	4	0.3
(1,562)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HB	4	0.3
(1,562)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HB	6	0.3
(1,562)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HB	6	0.3
(1,562)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HB	6	0.3
(1,562)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HB	7	0.3
(1,562)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HB	7	0.3
(1,562)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HB	7	0.3
(1,533)	1:5:A:VAL:H	1:7:A:LEU:HD21	6	0.3
(1,533)	1:5:A:VAL:H	1:7:A:LEU:HD22	6	0.3
(1,533)	1:5:A:VAL:H	1:7:A:LEU:HD23	6	0.3
(1,533)	1:5:A:VAL:H	1:7:A:LEU:HD21	7	0.3
(1,533)	1:5:A:VAL:H	1:7:A:LEU:HD22	7	0.3
(1,533)	1:5:A:VAL:H	1:7:A:LEU:HD23	7	0.3
(1,491)	1:7:A:LEU:HB2	1:8:A:TYR:H	4	0.3
(1,420)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG2	4	0.3
(1,420)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG2	6	0.3
(1,413)	1:3:A:GLU:HA	1:6:A:ARG:HG3	2	0.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,413)	1:3:A:GLU:HA	1:6:A:ARG:HG3	5	0.3
(1,388)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:H	9	0.3
(1,359)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	3	0.3
(1,358)	1:11:A:TRP:HZ3	1:24:A:PRO:HG3	5	0.3
(1,358)	1:11:A:TRP:HZ3	1:24:A:PRO:HG3	9	0.3
(1,341)	1:11:A:TRP:HZ2	1:16:A:GLY:HA2	9	0.3
(1,253)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HG2	3	0.3
(1,253)	1:1:A:GLU:HA	1:1:A:GLU:HG3	3	0.3
(1,233)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG2	1	0.3
(1,233)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG2	2	0.3
(1,233)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG2	3	0.3
(1,233)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG2	4	0.3
(1,233)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG2	7	0.3
(1,233)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG2	9	0.3
(1,221)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD3	7	0.3
(1,221)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD3	8	0.3
(1,221)	1:22:A:PRO:HB3	1:22:A:PRO:HD3	9	0.3
(1,144)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HG2	4	0.3
(1,117)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD11	7	0.3
(1,117)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD12	7	0.3
(1,117)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD13	7	0.3
(1,117)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD11	9	0.3
(1,117)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD12	9	0.3
(1,117)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD13	9	0.3
(1,15)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	5	0.3
(1,15)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	5	0.3
(1,15)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	5	0.3
(1,15)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG11	7	0.3
(1,15)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG12	7	0.3
(1,15)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG13	7	0.3
(3,199)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HA	2	0.29
(3,199)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HA	2	0.29
(3,199)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HA	2	0.29
(3,199)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HA	10	0.29
(3,199)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HA	10	0.29
(3,199)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HA	10	0.29
(3,163)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	10	0.29
(3,163)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	10	0.29
(3,163)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	10	0.29
(3,156)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HB	1	0.29
(3,156)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HB	1	0.29
(3,156)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HB	1	0.29

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,156)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HB	9	0.29
(3,156)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HB	9	0.29
(3,156)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HB	9	0.29
(3,148)	1:5:A:VAL:H	1:7:A:LEU:HD21	5	0.29
(3,148)	1:5:A:VAL:H	1:7:A:LEU:HD22	5	0.29
(3,148)	1:5:A:VAL:H	1:7:A:LEU:HD23	5	0.29
(3,82)	1:11:A:TRP:HE3	1:16:A:GLY:HA2	2	0.29
(3,66)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB3	8	0.29
(3,66)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB3	8	0.29
(3,39)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG2	5	0.29
(3,39)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG2	6	0.29
(3,39)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG2	8	0.29
(3,39)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG2	10	0.29
(3,32)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HG3	1	0.29
(3,26)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE2	6	0.29
(3,26)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE3	6	0.29
(2,442)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:H	2	0.29
(2,442)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:H	2	0.29
(2,442)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:H	2	0.29
(2,442)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:H	5	0.29
(2,442)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:H	5	0.29
(2,442)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:H	5	0.29
(2,429)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HG3	9	0.29
(2,429)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HG3	9	0.29
(2,429)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HG3	9	0.29
(2,280)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HG3	6	0.29
(2,261)	1:11:A:TRP:HH2	1:16:A:GLY:HA2	7	0.29
(2,261)	1:11:A:TRP:HH2	1:16:A:GLY:HA2	9	0.29
(2,255)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:HZ3	9	0.29
(2,243)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG13	7	0.29
(2,243)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG13	7	0.29
(2,167)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HD2	9	0.29
(1,660)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HA	2	0.29
(1,660)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HA	2	0.29
(1,660)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HA	2	0.29
(1,660)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HA	10	0.29
(1,660)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HA	10	0.29
(1,660)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HA	10	0.29
(1,636)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:H	2	0.29
(1,636)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:H	2	0.29
(1,636)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:H	2	0.29
(1,636)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:H	5	0.29

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,636)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:H	5	0.29
(1,636)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:H	5	0.29
(1,614)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HG3	9	0.29
(1,614)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HG3	9	0.29
(1,614)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HG3	9	0.29
(1,575)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	10	0.29
(1,575)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	10	0.29
(1,575)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	10	0.29
(1,562)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HB	1	0.29
(1,562)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HB	1	0.29
(1,562)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HB	1	0.29
(1,562)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HB	9	0.29
(1,562)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HB	9	0.29
(1,562)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HB	9	0.29
(1,533)	1:5:A:VAL:H	1:7:A:LEU:HD21	5	0.29
(1,533)	1:5:A:VAL:H	1:7:A:LEU:HD22	5	0.29
(1,533)	1:5:A:VAL:H	1:7:A:LEU:HD23	5	0.29
(1,374)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:HG3	6	0.29
(1,343)	1:11:A:TRP:HE3	1:16:A:GLY:HA2	2	0.29
(1,342)	1:11:A:TRP:HH2	1:16:A:GLY:HA2	7	0.29
(1,342)	1:11:A:TRP:HH2	1:16:A:GLY:HA2	9	0.29
(1,328)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:HZ3	9	0.29
(1,310)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG13	7	0.29
(1,310)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG13	7	0.29
(1,302)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB3	8	0.29
(1,302)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB3	8	0.29
(1,233)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG2	5	0.29
(1,233)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG2	6	0.29
(1,233)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG2	8	0.29
(1,233)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG2	10	0.29
(1,201)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HD2	9	0.29
(1,174)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HG3	1	0.29
(1,126)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE2	6	0.29
(1,126)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE3	6	0.29
(3,198)	1:19:A:SER:HB2	1:21:A:ARG:HG3	3	0.28
(3,197)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HD11	1	0.28
(3,197)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HD12	1	0.28
(3,197)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HD13	1	0.28
(3,197)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HD11	1	0.28
(3,197)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HD12	1	0.28
(3,197)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HD13	1	0.28
(3,197)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HD11	2	0.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,197)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HD12	2	0.28
(3,197)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HD13	2	0.28
(3,197)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HD11	2	0.28
(3,197)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HD12	2	0.28
(3,197)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HD13	2	0.28
(3,163)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	4	0.28
(3,163)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	4	0.28
(3,163)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	4	0.28
(3,163)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	8	0.28
(3,163)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	8	0.28
(3,163)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	8	0.28
(3,148)	1:5:A:VAL:H	1:7:A:LEU:HD21	1	0.28
(3,148)	1:5:A:VAL:H	1:7:A:LEU:HD22	1	0.28
(3,148)	1:5:A:VAL:H	1:7:A:LEU:HD23	1	0.28
(3,110)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HB	3	0.28
(3,77)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HA	8	0.28
(3,77)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HA	10	0.28
(3,66)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB3	10	0.28
(3,66)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB3	10	0.28
(3,47)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG3	1	0.28
(3,47)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG3	4	0.28
(3,32)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HG3	2	0.28
(3,32)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HG3	3	0.28
(3,32)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HG3	7	0.28
(3,32)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HG3	9	0.28
(3,5)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HD3	10	0.28
(2,458)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:HG	6	0.28
(2,444)	1:14:A:ASP:HB2	1:16:A:GLY:H	10	0.28
(2,442)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:H	1	0.28
(2,442)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:H	1	0.28
(2,442)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:H	1	0.28
(2,442)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:H	4	0.28
(2,442)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:H	4	0.28
(2,442)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:H	4	0.28
(2,429)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HG3	1	0.28
(2,429)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HG3	1	0.28
(2,429)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HG3	1	0.28
(2,429)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HG3	7	0.28
(2,429)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HG3	7	0.28
(2,429)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HG3	7	0.28
(2,310)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG2	5	0.28
(2,303)	1:11:A:TRP:HA	1:14:A:ASP:HB3	6	0.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,265)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HB2	1	0.28
(2,265)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HB2	8	0.28
(2,265)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HB2	9	0.28
(2,247)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HG3	6	0.28
(2,171)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HG3	7	0.28
(2,171)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HG3	9	0.28
(2,29)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HD2	8	0.28
(1,657)	1:19:A:SER:HB2	1:21:A:ARG:HG3	3	0.28
(1,655)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:HG	6	0.28
(1,650)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HD11	1	0.28
(1,650)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HD12	1	0.28
(1,650)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HD13	1	0.28
(1,650)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HD11	1	0.28
(1,650)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HD12	1	0.28
(1,650)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HD13	1	0.28
(1,650)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HD11	2	0.28
(1,650)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HD12	2	0.28
(1,650)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HD13	2	0.28
(1,650)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HD11	2	0.28
(1,650)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HD12	2	0.28
(1,650)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HD13	2	0.28
(1,639)	1:14:A:ASP:HB2	1:16:A:GLY:H	10	0.28
(1,636)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:H	1	0.28
(1,636)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:H	1	0.28
(1,636)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:H	1	0.28
(1,636)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:H	4	0.28
(1,636)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:H	4	0.28
(1,636)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:H	4	0.28
(1,614)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HG3	1	0.28
(1,614)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HG3	1	0.28
(1,614)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HG3	1	0.28
(1,614)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HG3	7	0.28
(1,614)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HG3	7	0.28
(1,614)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HG3	7	0.28
(1,575)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	4	0.28
(1,575)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	4	0.28
(1,575)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	4	0.28
(1,575)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	8	0.28
(1,575)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	8	0.28
(1,575)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	8	0.28
(1,533)	1:5:A:VAL:H	1:7:A:LEU:HD21	1	0.28
(1,533)	1:5:A:VAL:H	1:7:A:LEU:HD22	1	0.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,533)	1:5:A:VAL:H	1:7:A:LEU:HD23	1	0.28
(1,420)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG2	5	0.28
(1,418)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HB	3	0.28
(1,409)	1:11:A:TRP:HA	1:14:A:ASP:HB3	6	0.28
(1,347)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HB2	1	0.28
(1,347)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HB2	8	0.28
(1,347)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HB2	9	0.28
(1,333)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HA	8	0.28
(1,333)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HA	10	0.28
(1,317)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HG3	6	0.28
(1,302)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB3	10	0.28
(1,302)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB3	10	0.28
(1,260)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG3	1	0.28
(1,260)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG3	4	0.28
(1,205)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HG3	7	0.28
(1,205)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HG3	9	0.28
(1,174)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HG3	2	0.28
(1,174)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HG3	3	0.28
(1,174)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HG3	7	0.28
(1,174)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HG3	9	0.28
(1,36)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HD3	10	0.28
(1,33)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HD2	8	0.28
(3,206)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HG2	10	0.27
(3,206)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HG2	10	0.27
(3,206)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HG2	10	0.27
(3,206)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HG3	10	0.27
(3,206)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HG3	10	0.27
(3,206)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HG3	10	0.27
(3,199)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HA	3	0.27
(3,199)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HA	3	0.27
(3,199)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HA	3	0.27
(3,199)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HA	8	0.27
(3,199)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HA	8	0.27
(3,199)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HA	8	0.27
(3,197)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HD11	3	0.27
(3,197)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HD12	3	0.27
(3,197)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HD13	3	0.27
(3,197)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HD11	3	0.27
(3,197)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HD12	3	0.27
(3,197)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HD13	3	0.27
(3,197)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HD11	7	0.27
(3,197)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HD12	7	0.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,197)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HD13	7	0.27
(3,197)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HD11	7	0.27
(3,197)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HD12	7	0.27
(3,197)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HD13	7	0.27
(3,174)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA2	8	0.27
(3,174)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA2	8	0.27
(3,174)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA2	8	0.27
(3,163)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	6	0.27
(3,163)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	6	0.27
(3,163)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	6	0.27
(3,156)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HB	5	0.27
(3,156)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HB	5	0.27
(3,156)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HB	5	0.27
(3,99)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:H	7	0.27
(3,89)	1:11:A:TRP:HZ3	1:24:A:PRO:HG3	10	0.27
(3,64)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HE1	7	0.27
(3,64)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HE2	7	0.27
(3,56)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HA	4	0.27
(3,56)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HA	4	0.27
(3,32)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HG3	4	0.27
(3,32)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HG3	6	0.27
(3,32)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HG3	8	0.27
(3,32)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HG3	10	0.27
(2,442)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:H	9	0.27
(2,442)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:H	9	0.27
(2,442)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:H	9	0.27
(2,429)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HG3	6	0.27
(2,429)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HG3	6	0.27
(2,429)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HG3	6	0.27
(2,310)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG2	2	0.27
(2,310)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG2	3	0.27
(2,265)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HB2	5	0.27
(2,265)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HB2	7	0.27
(2,261)	1:11:A:TRP:HH2	1:16:A:GLY:HA2	10	0.27
(2,255)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:HZ3	8	0.27
(2,24)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HD3	9	0.27
(1,676)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HG2	10	0.27
(1,676)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HG2	10	0.27
(1,676)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HG2	10	0.27
(1,676)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HG3	10	0.27
(1,676)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HG3	10	0.27
(1,676)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HG3	10	0.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,660)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HA	3	0.27
(1,660)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HA	3	0.27
(1,660)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HA	3	0.27
(1,660)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HA	8	0.27
(1,660)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HA	8	0.27
(1,660)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HA	8	0.27
(1,650)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HD11	3	0.27
(1,650)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HD12	3	0.27
(1,650)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HD13	3	0.27
(1,650)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HD11	3	0.27
(1,650)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HD12	3	0.27
(1,650)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HD13	3	0.27
(1,650)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HD11	7	0.27
(1,650)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HD12	7	0.27
(1,650)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HD13	7	0.27
(1,650)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HD11	7	0.27
(1,650)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HD12	7	0.27
(1,650)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HD13	7	0.27
(1,636)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:H	9	0.27
(1,636)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:H	9	0.27
(1,636)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:H	9	0.27
(1,614)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HG3	6	0.27
(1,614)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HG3	6	0.27
(1,614)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HG3	6	0.27
(1,589)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA2	8	0.27
(1,589)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA2	8	0.27
(1,589)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA2	8	0.27
(1,575)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	6	0.27
(1,575)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	6	0.27
(1,575)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	6	0.27
(1,562)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HB	5	0.27
(1,562)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HB	5	0.27
(1,562)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HB	5	0.27
(1,420)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG2	2	0.27
(1,420)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG2	3	0.27
(1,388)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:H	7	0.27
(1,358)	1:11:A:TRP:HZ3	1:24:A:PRO:HG3	10	0.27
(1,347)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HB2	5	0.27
(1,347)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HB2	7	0.27
(1,342)	1:11:A:TRP:HH2	1:16:A:GLY:HA2	10	0.27
(1,328)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:HZ3	8	0.27
(1,299)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HE1	7	0.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,299)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HE2	7	0.27
(1,278)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HA	4	0.27
(1,278)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HA	4	0.27
(1,174)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HG3	4	0.27
(1,174)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HG3	6	0.27
(1,174)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HG3	8	0.27
(1,174)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HG3	10	0.27
(1,28)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HD3	9	0.27
(3,163)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	9	0.26
(3,163)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	9	0.26
(3,163)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	9	0.26
(3,148)	1:5:A:VAL:H	1:7:A:LEU:HD21	2	0.26
(3,148)	1:5:A:VAL:H	1:7:A:LEU:HD22	2	0.26
(3,148)	1:5:A:VAL:H	1:7:A:LEU:HD23	2	0.26
(3,125)	1:7:A:LEU:H	1:10:A:GLN:HB3	4	0.26
(3,110)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HB	8	0.26
(3,56)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HA	6	0.26
(3,56)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HA	6	0.26
(3,47)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG3	7	0.26
(3,47)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG3	9	0.26
(3,26)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE2	4	0.26
(3,26)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE3	4	0.26
(3,22)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD11	10	0.26
(3,22)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD12	10	0.26
(3,22)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD13	10	0.26
(2,458)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:HG	4	0.26
(2,442)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:H	6	0.26
(2,442)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:H	6	0.26
(2,442)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:H	6	0.26
(2,436)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HE3	4	0.26
(2,436)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HE3	4	0.26
(2,427)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HB2	4	0.26
(2,427)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HB2	4	0.26
(2,427)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HB2	4	0.26
(2,376)	1:14:A:ASP:HB2	1:15:A:GLY:H	3	0.26
(2,376)	1:14:A:ASP:HB2	1:15:A:GLY:H	6	0.26
(2,310)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG2	1	0.26
(2,285)	1:11:A:TRP:HE1	1:17:A:PRO:HA	5	0.26
(2,270)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	2	0.26
(2,261)	1:11:A:TRP:HH2	1:16:A:GLY:HA2	2	0.26
(2,255)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:HZ3	7	0.26
(2,167)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HD2	5	0.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,140)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD3	3	0.26
(2,114)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HG2	6	0.26
(1,655)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:HG	4	0.26
(1,636)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:H	6	0.26
(1,636)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:H	6	0.26
(1,636)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:H	6	0.26
(1,626)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HE3	4	0.26
(1,626)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HE3	4	0.26
(1,612)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HB2	4	0.26
(1,612)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HB2	4	0.26
(1,612)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HB2	4	0.26
(1,575)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG21	9	0.26
(1,575)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG22	9	0.26
(1,575)	1:3:A:GLU:HA	1:5:A:VAL:HG23	9	0.26
(1,533)	1:5:A:VAL:H	1:7:A:LEU:HD21	2	0.26
(1,533)	1:5:A:VAL:H	1:7:A:LEU:HD22	2	0.26
(1,533)	1:5:A:VAL:H	1:7:A:LEU:HD23	2	0.26
(1,521)	1:14:A:ASP:HB2	1:15:A:GLY:H	3	0.26
(1,521)	1:14:A:ASP:HB2	1:15:A:GLY:H	6	0.26
(1,463)	1:7:A:LEU:H	1:10:A:GLN:HB3	4	0.26
(1,420)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG2	1	0.26
(1,418)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HB	8	0.26
(1,383)	1:11:A:TRP:HE1	1:17:A:PRO:HA	5	0.26
(1,359)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	2	0.26
(1,342)	1:11:A:TRP:HH2	1:16:A:GLY:HA2	2	0.26
(1,328)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:HZ3	7	0.26
(1,278)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HA	6	0.26
(1,278)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HA	6	0.26
(1,260)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG3	7	0.26
(1,260)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG3	9	0.26
(1,201)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HD2	5	0.26
(1,171)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD3	3	0.26
(1,144)	1:13:A:LYS:H	1:13:A:LYS:HG2	6	0.26
(1,126)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE2	4	0.26
(1,126)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HE3	4	0.26
(1,117)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD11	10	0.26
(1,117)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD12	10	0.26
(1,117)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD13	10	0.26
(3,197)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HD11	5	0.25
(3,197)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HD12	5	0.25
(3,197)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HD13	5	0.25
(3,197)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HD11	5	0.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,197)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HD12	5	0.25
(3,197)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HD13	5	0.25
(3,184)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG12	9	0.25
(3,184)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG12	9	0.25
(3,184)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG12	9	0.25
(3,164)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HA	10	0.25
(3,164)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HA	10	0.25
(3,164)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HA	10	0.25
(3,156)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HB	3	0.25
(3,156)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HB	3	0.25
(3,156)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HB	3	0.25
(3,125)	1:7:A:LEU:H	1:10:A:GLN:HB3	6	0.25
(3,115)	1:22:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	1	0.25
(3,110)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HB	10	0.25
(3,99)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:H	8	0.25
(3,64)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HE1	1	0.25
(3,64)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HE2	1	0.25
(3,64)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HE1	3	0.25
(3,64)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HE2	3	0.25
(3,47)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG3	2	0.25
(3,47)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG3	5	0.25
(3,47)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG3	8	0.25
(2,459)	1:10:A:GLN:HA	1:13:A:LYS:HE2	9	0.25
(2,459)	1:10:A:GLN:HA	1:13:A:LYS:HE3	9	0.25
(2,433)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA3	7	0.25
(2,433)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA3	7	0.25
(2,433)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA3	7	0.25
(2,433)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA3	9	0.25
(2,433)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA3	9	0.25
(2,433)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA3	9	0.25
(2,379)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:H	1	0.25
(2,379)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:H	5	0.25
(2,379)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:H	7	0.25
(2,379)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:H	8	0.25
(2,379)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:H	10	0.25
(2,353)	1:19:A:SER:HA	1:21:A:ARG:H	5	0.25
(2,308)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	9	0.25
(2,284)	1:11:A:TRP:HE1	1:19:A:SER:HB2	6	0.25
(2,262)	1:11:A:TRP:HZ3	1:16:A:GLY:HA2	5	0.25
(2,261)	1:11:A:TRP:HH2	1:16:A:GLY:HA2	1	0.25
(2,255)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:HZ3	6	0.25
(2,243)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG13	9	0.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,243)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG13	9	0.25
(2,228)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	5	0.25
(2,228)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	8	0.25
(2,171)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HG3	8	0.25
(2,167)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HD2	7	0.25
(2,167)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HD2	10	0.25
(2,140)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD3	1	0.25
(2,140)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD3	6	0.25
(1,656)	1:10:A:GLN:HA	1:13:A:LYS:HE2	9	0.25
(1,656)	1:10:A:GLN:HA	1:13:A:LYS:HE3	9	0.25
(1,650)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HD11	5	0.25
(1,650)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HD12	5	0.25
(1,650)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HD13	5	0.25
(1,650)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HD11	5	0.25
(1,650)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HD12	5	0.25
(1,650)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HD13	5	0.25
(1,620)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA3	7	0.25
(1,620)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA3	7	0.25
(1,620)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA3	7	0.25
(1,620)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA3	9	0.25
(1,620)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA3	9	0.25
(1,620)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA3	9	0.25
(1,608)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG12	9	0.25
(1,608)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG12	9	0.25
(1,608)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG12	9	0.25
(1,577)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HA	10	0.25
(1,577)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HA	10	0.25
(1,577)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HA	10	0.25
(1,562)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HB	3	0.25
(1,562)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HB	3	0.25
(1,562)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HB	3	0.25
(1,524)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:H	1	0.25
(1,524)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:H	5	0.25
(1,524)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:H	7	0.25
(1,524)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:H	8	0.25
(1,524)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:H	10	0.25
(1,486)	1:19:A:SER:HA	1:21:A:ARG:H	5	0.25
(1,463)	1:7:A:LEU:H	1:10:A:GLN:HB3	6	0.25
(1,441)	1:22:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	1	0.25
(1,418)	1:6:A:ARG:HA	1:9:A:ILE:HB	10	0.25
(1,417)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	9	0.25
(1,388)	1:7:A:LEU:H	1:8:A:TYR:H	8	0.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,381)	1:11:A:TRP:HE1	1:19:A:SER:HB2	6	0.25
(1,344)	1:11:A:TRP:HZ3	1:16:A:GLY:HA2	5	0.25
(1,342)	1:11:A:TRP:HH2	1:16:A:GLY:HA2	1	0.25
(1,328)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:HZ3	6	0.25
(1,310)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG13	9	0.25
(1,310)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG13	9	0.25
(1,299)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HE1	1	0.25
(1,299)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HE2	1	0.25
(1,299)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HE1	3	0.25
(1,299)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HE2	3	0.25
(1,288)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	5	0.25
(1,288)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	8	0.25
(1,260)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG3	2	0.25
(1,260)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG3	5	0.25
(1,260)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG3	8	0.25
(1,205)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HG3	8	0.25
(1,201)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HD2	7	0.25
(1,201)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HD2	10	0.25
(1,171)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD3	1	0.25
(1,171)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD3	6	0.25
(3,197)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HD11	9	0.24
(3,197)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HD12	9	0.24
(3,197)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HD13	9	0.24
(3,197)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HD11	9	0.24
(3,197)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HD12	9	0.24
(3,197)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HD13	9	0.24
(3,167)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD11	8	0.24
(3,167)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD12	8	0.24
(3,167)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD13	8	0.24
(3,167)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD11	10	0.24
(3,167)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD12	10	0.24
(3,167)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD13	10	0.24
(3,161)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HA	5	0.24
(3,161)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HA	5	0.24
(3,161)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HA	5	0.24
(3,156)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HB	10	0.24
(3,156)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HB	10	0.24
(3,156)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HB	10	0.24
(3,125)	1:7:A:LEU:H	1:10:A:GLN:HB3	1	0.24
(3,125)	1:7:A:LEU:H	1:10:A:GLN:HB3	2	0.24
(3,115)	1:22:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	4	0.24
(3,82)	1:11:A:TRP:HE3	1:16:A:GLY:HA2	10	0.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,47)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG3	10	0.24
(3,34)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG2	2	0.24
(3,34)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HG2	2	0.24
(3,31)	1:13:A:LYS:HA	1:14:A:ASP:H	2	0.24
(3,31)	1:13:A:LYS:HA	1:14:A:ASP:H	4	0.24
(3,31)	1:13:A:LYS:HA	1:14:A:ASP:H	7	0.24
(3,31)	1:13:A:LYS:HA	1:14:A:ASP:H	9	0.24
(3,22)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD11	8	0.24
(3,22)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD12	8	0.24
(3,22)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD13	8	0.24
(2,459)	1:10:A:GLN:HA	1:13:A:LYS:HE2	2	0.24
(2,459)	1:10:A:GLN:HA	1:13:A:LYS:HE3	2	0.24
(2,459)	1:10:A:GLN:HA	1:13:A:LYS:HE2	7	0.24
(2,459)	1:10:A:GLN:HA	1:13:A:LYS:HE3	7	0.24
(2,459)	1:10:A:GLN:HA	1:13:A:LYS:HE2	10	0.24
(2,459)	1:10:A:GLN:HA	1:13:A:LYS:HE3	10	0.24
(2,458)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:HG	3	0.24
(2,436)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HE3	8	0.24
(2,436)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HE3	8	0.24
(2,436)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HE3	10	0.24
(2,436)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HE3	10	0.24
(2,427)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HB2	7	0.24
(2,427)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HB2	7	0.24
(2,427)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HB2	7	0.24
(2,379)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:H	4	0.24
(2,379)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:H	9	0.24
(2,330)	1:16:A:GLY:H	1:17:A:PRO:HD2	6	0.24
(2,270)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	5	0.24
(2,270)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	10	0.24
(2,265)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HB2	2	0.24
(2,261)	1:11:A:TRP:HH2	1:16:A:GLY:HA2	4	0.24
(2,261)	1:11:A:TRP:HH2	1:16:A:GLY:HA2	5	0.24
(2,255)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:HZ3	3	0.24
(2,251)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HG	9	0.24
(2,249)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB2	1	0.24
(2,249)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB2	1	0.24
(2,241)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB3	4	0.24
(2,241)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB3	4	0.24
(2,228)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	1	0.24
(2,228)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	7	0.24
(2,207)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HB2	5	0.24
(2,207)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HB3	5	0.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,140)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD3	2	0.24
(2,136)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG3	1	0.24
(2,55)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HB3	3	0.24
(2,55)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HB3	4	0.24
(2,55)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HB3	6	0.24
(1,656)	1:10:A:GLN:HA	1:13:A:LYS:HE2	2	0.24
(1,656)	1:10:A:GLN:HA	1:13:A:LYS:HE3	2	0.24
(1,656)	1:10:A:GLN:HA	1:13:A:LYS:HE2	7	0.24
(1,656)	1:10:A:GLN:HA	1:13:A:LYS:HE3	7	0.24
(1,656)	1:10:A:GLN:HA	1:13:A:LYS:HE2	10	0.24
(1,656)	1:10:A:GLN:HA	1:13:A:LYS:HE3	10	0.24
(1,655)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:HG	3	0.24
(1,650)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HD11	9	0.24
(1,650)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HD12	9	0.24
(1,650)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HD13	9	0.24
(1,650)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HD11	9	0.24
(1,650)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HD12	9	0.24
(1,650)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HD13	9	0.24
(1,626)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HE3	8	0.24
(1,626)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HE3	8	0.24
(1,626)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HE3	10	0.24
(1,626)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HE3	10	0.24
(1,612)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HB2	7	0.24
(1,612)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HB2	7	0.24
(1,612)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HB2	7	0.24
(1,580)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD11	8	0.24
(1,580)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD12	8	0.24
(1,580)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD13	8	0.24
(1,580)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD11	10	0.24
(1,580)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD12	10	0.24
(1,580)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD13	10	0.24
(1,572)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HA	5	0.24
(1,572)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HA	5	0.24
(1,572)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HA	5	0.24
(1,562)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HB	10	0.24
(1,562)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HB	10	0.24
(1,562)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HB	10	0.24
(1,524)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:H	4	0.24
(1,524)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:H	9	0.24
(1,463)	1:7:A:LEU:H	1:10:A:GLN:HB3	1	0.24
(1,463)	1:7:A:LEU:H	1:10:A:GLN:HB3	2	0.24
(1,451)	1:16:A:GLY:H	1:17:A:PRO:HD2	6	0.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,441)	1:22:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	4	0.24
(1,359)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	5	0.24
(1,359)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	10	0.24
(1,347)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HB2	2	0.24
(1,343)	1:11:A:TRP:HE3	1:16:A:GLY:HA2	10	0.24
(1,342)	1:11:A:TRP:HH2	1:16:A:GLY:HA2	4	0.24
(1,342)	1:11:A:TRP:HH2	1:16:A:GLY:HA2	5	0.24
(1,328)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:HZ3	3	0.24
(1,323)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HG	9	0.24
(1,321)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB2	1	0.24
(1,321)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB2	1	0.24
(1,308)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB3	4	0.24
(1,308)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB3	4	0.24
(1,288)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	1	0.24
(1,288)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	7	0.24
(1,260)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG3	10	0.24
(1,251)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HB2	5	0.24
(1,251)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HB3	5	0.24
(1,199)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG2	2	0.24
(1,199)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HG2	2	0.24
(1,171)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD3	2	0.24
(1,167)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG3	1	0.24
(1,146)	1:13:A:LYS:HA	1:14:A:ASP:H	2	0.24
(1,146)	1:13:A:LYS:HA	1:14:A:ASP:H	4	0.24
(1,146)	1:13:A:LYS:HA	1:14:A:ASP:H	7	0.24
(1,146)	1:13:A:LYS:HA	1:14:A:ASP:H	9	0.24
(1,117)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD11	8	0.24
(1,117)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD12	8	0.24
(1,117)	1:12:A:LEU:HB3	1:12:A:LEU:HD13	8	0.24
(1,69)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HB3	3	0.24
(1,69)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HB3	4	0.24
(1,69)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HB3	6	0.24
(3,206)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HG2	7	0.23
(3,206)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HG2	7	0.23
(3,206)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HG2	7	0.23
(3,206)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HG3	7	0.23
(3,206)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HG3	7	0.23
(3,206)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HG3	7	0.23
(3,206)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HG2	9	0.23
(3,206)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HG2	9	0.23
(3,206)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HG2	9	0.23
(3,206)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HG3	9	0.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,206)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HG3	9	0.23
(3,206)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HG3	9	0.23
(3,197)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HD11	8	0.23
(3,197)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HD12	8	0.23
(3,197)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HD13	8	0.23
(3,197)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HD11	8	0.23
(3,197)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HD12	8	0.23
(3,197)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HD13	8	0.23
(3,184)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG12	2	0.23
(3,184)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG12	2	0.23
(3,184)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG12	2	0.23
(3,184)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG12	5	0.23
(3,184)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG12	5	0.23
(3,184)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG12	5	0.23
(3,167)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD11	1	0.23
(3,167)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD12	1	0.23
(3,167)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD13	1	0.23
(3,167)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD11	3	0.23
(3,167)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD12	3	0.23
(3,167)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD13	3	0.23
(3,167)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD11	5	0.23
(3,167)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD12	5	0.23
(3,167)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD13	5	0.23
(3,156)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HB	8	0.23
(3,156)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HB	8	0.23
(3,156)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HB	8	0.23
(3,125)	1:7:A:LEU:H	1:10:A:GLN:HB3	5	0.23
(3,115)	1:22:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	2	0.23
(3,82)	1:11:A:TRP:HE3	1:16:A:GLY:HA2	7	0.23
(3,82)	1:11:A:TRP:HE3	1:16:A:GLY:HA2	9	0.23
(3,66)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB3	1	0.23
(3,66)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB3	1	0.23
(3,66)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB3	2	0.23
(3,66)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB3	2	0.23
(3,66)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB3	6	0.23
(3,66)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB3	6	0.23
(3,66)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB3	7	0.23
(3,66)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB3	7	0.23
(3,66)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB3	9	0.23
(3,66)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB3	9	0.23
(3,65)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG2	9	0.23
(3,65)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG2	9	0.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,64)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HE1	2	0.23
(3,64)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HE2	2	0.23
(3,63)	1:11:A:TRP:HD1	1:23:A:PRO:HA	5	0.23
(3,63)	1:11:A:TRP:HD1	1:23:A:PRO:HA	9	0.23
(3,34)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG2	1	0.23
(3,34)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HG2	1	0.23
(3,34)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG2	3	0.23
(3,34)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HG2	3	0.23
(3,34)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG2	4	0.23
(3,34)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HG2	4	0.23
(3,31)	1:13:A:LYS:HA	1:14:A:ASP:H	1	0.23
(3,31)	1:13:A:LYS:HA	1:14:A:ASP:H	10	0.23
(3,5)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HD3	8	0.23
(2,459)	1:10:A:GLN:HA	1:13:A:LYS:HE2	1	0.23
(2,459)	1:10:A:GLN:HA	1:13:A:LYS:HE3	1	0.23
(2,459)	1:10:A:GLN:HA	1:13:A:LYS:HE2	3	0.23
(2,459)	1:10:A:GLN:HA	1:13:A:LYS:HE3	3	0.23
(2,459)	1:10:A:GLN:HA	1:13:A:LYS:HE2	5	0.23
(2,459)	1:10:A:GLN:HA	1:13:A:LYS:HE3	5	0.23
(2,459)	1:10:A:GLN:HA	1:13:A:LYS:HE2	8	0.23
(2,459)	1:10:A:GLN:HA	1:13:A:LYS:HE3	8	0.23
(2,458)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:HG	1	0.23
(2,458)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:HG	2	0.23
(2,442)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:H	8	0.23
(2,442)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:H	8	0.23
(2,442)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:H	8	0.23
(2,427)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HB2	2	0.23
(2,427)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HB2	2	0.23
(2,427)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HB2	2	0.23
(2,427)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HB2	6	0.23
(2,427)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HB2	6	0.23
(2,427)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HB2	6	0.23
(2,382)	1:24:A:PRO:HG2	1:25:A:SER:H	2	0.23
(2,348)	1:10:A:GLN:HB2	1:12:A:LEU:H	7	0.23
(2,333)	1:16:A:GLY:H	1:17:A:PRO:HD3	6	0.23
(2,330)	1:16:A:GLY:H	1:17:A:PRO:HD2	3	0.23
(2,314)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HD2	4	0.23
(2,305)	1:3:A:GLU:HA	1:6:A:ARG:HG3	7	0.23
(2,304)	1:3:A:GLU:HA	1:6:A:ARG:HG2	8	0.23
(2,265)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HB2	4	0.23
(2,255)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:HZ3	10	0.23
(2,251)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HG	7	0.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,249)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB2	3	0.23
(2,249)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB2	3	0.23
(2,249)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB2	7	0.23
(2,249)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB2	7	0.23
(2,247)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HG3	5	0.23
(2,244)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	1	0.23
(2,244)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	1	0.23
(2,244)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	1	0.23
(2,244)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	1	0.23
(2,244)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	1	0.23
(2,244)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	1	0.23
(2,228)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	3	0.23
(2,228)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	4	0.23
(2,228)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	6	0.23
(2,228)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	10	0.23
(2,199)	1:24:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD2	7	0.23
(2,199)	1:24:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD2	8	0.23
(2,199)	1:24:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD2	10	0.23
(2,140)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD3	4	0.23
(2,136)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG3	2	0.23
(2,136)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG3	3	0.23
(2,136)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG3	4	0.23
(2,136)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG3	6	0.23
(2,136)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG3	7	0.23
(2,55)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HB3	1	0.23
(2,55)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HB3	2	0.23
(2,55)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HB3	5	0.23
(2,55)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HB3	7	0.23
(2,55)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HB3	8	0.23
(2,55)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HB3	9	0.23
(2,55)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HB3	10	0.23
(2,29)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HD2	3	0.23
(2,24)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HD3	1	0.23
(1,676)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HG2	7	0.23
(1,676)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HG2	7	0.23
(1,676)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HG2	7	0.23
(1,676)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HG3	7	0.23
(1,676)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HG3	7	0.23
(1,676)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HG3	7	0.23
(1,676)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HG2	9	0.23
(1,676)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HG2	9	0.23
(1,676)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HG2	9	0.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,676)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HG3	9	0.23
(1,676)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HG3	9	0.23
(1,676)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HG3	9	0.23
(1,656)	1:10:A:GLN:HA	1:13:A:LYS:HE2	1	0.23
(1,656)	1:10:A:GLN:HA	1:13:A:LYS:HE3	1	0.23
(1,656)	1:10:A:GLN:HA	1:13:A:LYS:HE2	3	0.23
(1,656)	1:10:A:GLN:HA	1:13:A:LYS:HE3	3	0.23
(1,656)	1:10:A:GLN:HA	1:13:A:LYS:HE2	5	0.23
(1,656)	1:10:A:GLN:HA	1:13:A:LYS:HE3	5	0.23
(1,656)	1:10:A:GLN:HA	1:13:A:LYS:HE2	8	0.23
(1,656)	1:10:A:GLN:HA	1:13:A:LYS:HE3	8	0.23
(1,655)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:HG	1	0.23
(1,655)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:HG	2	0.23
(1,650)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HD11	8	0.23
(1,650)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HD12	8	0.23
(1,650)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HD13	8	0.23
(1,650)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HD11	8	0.23
(1,650)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HD12	8	0.23
(1,650)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HD13	8	0.23
(1,636)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:H	8	0.23
(1,636)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:H	8	0.23
(1,636)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:H	8	0.23
(1,612)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HB2	2	0.23
(1,612)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HB2	2	0.23
(1,612)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HB2	2	0.23
(1,612)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HB2	6	0.23
(1,612)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HB2	6	0.23
(1,612)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HB2	6	0.23
(1,608)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG12	2	0.23
(1,608)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG12	2	0.23
(1,608)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG12	2	0.23
(1,608)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG12	5	0.23
(1,608)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG12	5	0.23
(1,608)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG12	5	0.23
(1,580)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD11	1	0.23
(1,580)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD12	1	0.23
(1,580)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD13	1	0.23
(1,580)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD11	3	0.23
(1,580)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD12	3	0.23
(1,580)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD13	3	0.23
(1,580)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD11	5	0.23
(1,580)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD12	5	0.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,580)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD13	5	0.23
(1,562)	1:4:A:ALA:HB1	1:5:A:VAL:HB	8	0.23
(1,562)	1:4:A:ALA:HB2	1:5:A:VAL:HB	8	0.23
(1,562)	1:4:A:ALA:HB3	1:5:A:VAL:HB	8	0.23
(1,528)	1:24:A:PRO:HG2	1:25:A:SER:H	2	0.23
(1,480)	1:10:A:GLN:HB2	1:12:A:LEU:H	7	0.23
(1,463)	1:7:A:LEU:H	1:10:A:GLN:HB3	5	0.23
(1,454)	1:16:A:GLY:H	1:17:A:PRO:HD3	6	0.23
(1,451)	1:16:A:GLY:H	1:17:A:PRO:HD2	3	0.23
(1,441)	1:22:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	2	0.23
(1,424)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HD2	4	0.23
(1,413)	1:3:A:GLU:HA	1:6:A:ARG:HG3	7	0.23
(1,412)	1:3:A:GLU:HA	1:6:A:ARG:HG2	8	0.23
(1,347)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HB2	4	0.23
(1,343)	1:11:A:TRP:HE3	1:16:A:GLY:HA2	7	0.23
(1,343)	1:11:A:TRP:HE3	1:16:A:GLY:HA2	9	0.23
(1,328)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:HZ3	10	0.23
(1,323)	1:11:A:TRP:HZ3	1:12:A:LEU:HG	7	0.23
(1,321)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB2	3	0.23
(1,321)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB2	3	0.23
(1,321)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB2	7	0.23
(1,321)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB2	7	0.23
(1,317)	1:11:A:TRP:HD1	1:21:A:ARG:HG3	5	0.23
(1,313)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	1	0.23
(1,313)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	1	0.23
(1,313)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	1	0.23
(1,313)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	1	0.23
(1,313)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	1	0.23
(1,313)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	1	0.23
(1,302)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB3	1	0.23
(1,302)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB3	1	0.23
(1,302)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB3	2	0.23
(1,302)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB3	2	0.23
(1,302)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB3	6	0.23
(1,302)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB3	6	0.23
(1,302)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB3	7	0.23
(1,302)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB3	7	0.23
(1,302)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB3	9	0.23
(1,302)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB3	9	0.23
(1,300)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG2	9	0.23
(1,300)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG2	9	0.23
(1,299)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HE1	2	0.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,299)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HE2	2	0.23
(1,297)	1:11:A:TRP:HD1	1:23:A:PRO:HA	5	0.23
(1,297)	1:11:A:TRP:HD1	1:23:A:PRO:HA	9	0.23
(1,288)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	3	0.23
(1,288)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	4	0.23
(1,288)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	6	0.23
(1,288)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	10	0.23
(1,240)	1:24:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD2	7	0.23
(1,240)	1:24:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD2	8	0.23
(1,240)	1:24:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD2	10	0.23
(1,199)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG2	1	0.23
(1,199)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HG2	1	0.23
(1,199)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG2	3	0.23
(1,199)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HG2	3	0.23
(1,199)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG2	4	0.23
(1,199)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HG2	4	0.23
(1,171)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD3	4	0.23
(1,167)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG3	2	0.23
(1,167)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG3	3	0.23
(1,167)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG3	4	0.23
(1,167)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG3	6	0.23
(1,167)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG3	7	0.23
(1,146)	1:13:A:LYS:HA	1:14:A:ASP:H	1	0.23
(1,146)	1:13:A:LYS:HA	1:14:A:ASP:H	10	0.23
(1,69)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HB3	1	0.23
(1,69)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HB3	2	0.23
(1,69)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HB3	5	0.23
(1,69)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HB3	7	0.23
(1,69)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HB3	8	0.23
(1,69)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HB3	9	0.23
(1,69)	1:8:A:TYR:HA	1:8:A:TYR:HB3	10	0.23
(1,36)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HD3	8	0.23
(1,33)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HD2	3	0.23
(1,28)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HD3	1	0.23
(3,184)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG12	1	0.22
(3,184)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG12	1	0.22
(3,184)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG12	1	0.22
(3,184)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG12	7	0.22
(3,184)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG12	7	0.22
(3,184)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG12	7	0.22
(3,167)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD11	7	0.22
(3,167)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD12	7	0.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,167)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD13	7	0.22
(3,167)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD11	9	0.22
(3,167)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD12	9	0.22
(3,167)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD13	9	0.22
(3,164)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HA	8	0.22
(3,164)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HA	8	0.22
(3,164)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HA	8	0.22
(3,125)	1:7:A:LEU:H	1:10:A:GLN:HB3	3	0.22
(3,115)	1:22:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	3	0.22
(3,83)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG2	3	0.22
(3,66)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB3	3	0.22
(3,66)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB3	3	0.22
(3,66)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB3	5	0.22
(3,66)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB3	5	0.22
(3,47)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG3	6	0.22
(3,31)	1:13:A:LYS:HA	1:14:A:ASP:H	5	0.22
(3,5)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HD3	7	0.22
(2,444)	1:14:A:ASP:HB2	1:16:A:GLY:H	3	0.22
(2,442)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:H	10	0.22
(2,442)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:H	10	0.22
(2,442)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:H	10	0.22
(2,430)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HG3	7	0.22
(2,430)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HG3	7	0.22
(2,430)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HG3	7	0.22
(2,427)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HB2	1	0.22
(2,427)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HB2	1	0.22
(2,427)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HB2	1	0.22
(2,427)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HB2	5	0.22
(2,427)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HB2	5	0.22
(2,427)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HB2	5	0.22
(2,427)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HB2	9	0.22
(2,427)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HB2	9	0.22
(2,427)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HB2	9	0.22
(2,382)	1:24:A:PRO:HG2	1:25:A:SER:H	4	0.22
(2,379)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:H	2	0.22
(2,379)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:H	6	0.22
(2,348)	1:10:A:GLN:HB2	1:12:A:LEU:H	9	0.22
(2,333)	1:16:A:GLY:H	1:17:A:PRO:HD3	1	0.22
(2,333)	1:16:A:GLY:H	1:17:A:PRO:HD3	3	0.22
(2,316)	1:14:A:ASP:HB2	1:19:A:SER:HB2	5	0.22
(2,314)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HD2	2	0.22
(2,310)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG2	7	0.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,310)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG2	8	0.22
(2,270)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	4	0.22
(2,244)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	4	0.22
(2,244)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	4	0.22
(2,244)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	4	0.22
(2,244)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	4	0.22
(2,244)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	4	0.22
(2,244)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	4	0.22
(2,244)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	5	0.22
(2,244)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	5	0.22
(2,244)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	5	0.22
(2,244)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	5	0.22
(2,244)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	5	0.22
(2,244)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	5	0.22
(2,228)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	2	0.22
(2,228)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	9	0.22
(2,207)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HB2	9	0.22
(2,207)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HB3	9	0.22
(2,199)	1:24:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD2	3	0.22
(2,140)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD3	7	0.22
(2,140)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD3	9	0.22
(2,136)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG3	9	0.22
(2,102)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HG2	4	0.22
(2,30)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HD3	8	0.22
(2,29)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HD2	10	0.22
(2,24)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HD3	6	0.22
(2,22)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG3	7	0.22
(1,639)	1:14:A:ASP:HB2	1:16:A:GLY:H	3	0.22
(1,636)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:H	10	0.22
(1,636)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:H	10	0.22
(1,636)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:H	10	0.22
(1,615)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HG3	7	0.22
(1,615)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HG3	7	0.22
(1,615)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HG3	7	0.22
(1,612)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HB2	1	0.22
(1,612)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HB2	1	0.22
(1,612)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HB2	1	0.22
(1,612)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HB2	5	0.22
(1,612)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HB2	5	0.22
(1,612)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HB2	5	0.22
(1,612)	1:5:A:VAL:HG21	1:6:A:ARG:HB2	9	0.22
(1,612)	1:5:A:VAL:HG22	1:6:A:ARG:HB2	9	0.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,612)	1:5:A:VAL:HG23	1:6:A:ARG:HB2	9	0.22
(1,608)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG12	1	0.22
(1,608)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG12	1	0.22
(1,608)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG12	1	0.22
(1,608)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG12	7	0.22
(1,608)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG12	7	0.22
(1,608)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG12	7	0.22
(1,580)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD11	7	0.22
(1,580)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD12	7	0.22
(1,580)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD13	7	0.22
(1,580)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD11	9	0.22
(1,580)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD12	9	0.22
(1,580)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD13	9	0.22
(1,577)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HA	8	0.22
(1,577)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HA	8	0.22
(1,577)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HA	8	0.22
(1,528)	1:24:A:PRO:HG2	1:25:A:SER:H	4	0.22
(1,524)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:H	2	0.22
(1,524)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:H	6	0.22
(1,480)	1:10:A:GLN:HB2	1:12:A:LEU:H	9	0.22
(1,463)	1:7:A:LEU:H	1:10:A:GLN:HB3	3	0.22
(1,454)	1:16:A:GLY:H	1:17:A:PRO:HD3	1	0.22
(1,454)	1:16:A:GLY:H	1:17:A:PRO:HD3	3	0.22
(1,441)	1:22:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	3	0.22
(1,427)	1:14:A:ASP:HB2	1:19:A:SER:HB2	5	0.22
(1,424)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HD2	2	0.22
(1,420)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG2	7	0.22
(1,420)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG2	8	0.22
(1,359)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	4	0.22
(1,349)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG2	3	0.22
(1,313)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	4	0.22
(1,313)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	4	0.22
(1,313)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	4	0.22
(1,313)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	4	0.22
(1,313)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	4	0.22
(1,313)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	4	0.22
(1,313)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	5	0.22
(1,313)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	5	0.22
(1,313)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	5	0.22
(1,313)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	5	0.22
(1,313)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	5	0.22
(1,313)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	5	0.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,302)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB3	3	0.22
(1,302)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB3	3	0.22
(1,302)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HB3	5	0.22
(1,302)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HB3	5	0.22
(1,288)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	2	0.22
(1,288)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	9	0.22
(1,260)	1:2:A:GLU:HA	1:2:A:GLU:HG3	6	0.22
(1,251)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HB2	9	0.22
(1,251)	1:25:A:SER:H	1:25:A:SER:HB3	9	0.22
(1,240)	1:24:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD2	3	0.22
(1,171)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD3	7	0.22
(1,171)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD3	9	0.22
(1,167)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG3	9	0.22
(1,146)	1:13:A:LYS:HA	1:14:A:ASP:H	5	0.22
(1,129)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HG2	4	0.22
(1,36)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HD3	7	0.22
(1,34)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HD3	8	0.22
(1,33)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HD2	10	0.22
(1,28)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HD3	6	0.22
(1,26)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG3	7	0.22
(3,197)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HD11	10	0.21
(3,197)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HD12	10	0.21
(3,197)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HD13	10	0.21
(3,197)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HD11	10	0.21
(3,197)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HD12	10	0.21
(3,197)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HD13	10	0.21
(3,184)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG12	3	0.21
(3,184)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG12	3	0.21
(3,184)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG12	3	0.21
(3,184)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG12	6	0.21
(3,184)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG12	6	0.21
(3,184)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG12	6	0.21
(3,167)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD11	2	0.21
(3,167)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD12	2	0.21
(3,167)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD13	2	0.21
(3,167)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD11	4	0.21
(3,167)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD12	4	0.21
(3,167)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD13	4	0.21
(3,167)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD11	6	0.21
(3,167)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD12	6	0.21
(3,167)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD13	6	0.21
(3,160)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HA	8	0.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,160)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HA	8	0.21
(3,160)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HA	8	0.21
(3,115)	1:22:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	10	0.21
(3,83)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG2	1	0.21
(3,77)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HA	7	0.21
(3,77)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HA	9	0.21
(3,65)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG2	7	0.21
(3,65)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG2	7	0.21
(3,64)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HE1	9	0.21
(3,64)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HE2	9	0.21
(3,63)	1:11:A:TRP:HD1	1:23:A:PRO:HA	7	0.21
(3,63)	1:11:A:TRP:HD1	1:23:A:PRO:HA	10	0.21
(3,56)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HA	2	0.21
(3,56)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HA	2	0.21
(3,56)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HA	3	0.21
(3,56)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HA	3	0.21
(3,56)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HA	5	0.21
(3,56)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HA	5	0.21
(3,31)	1:13:A:LYS:HA	1:14:A:ASP:H	6	0.21
(3,31)	1:13:A:LYS:HA	1:14:A:ASP:H	8	0.21
(3,28)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HG2	6	0.21
(3,28)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HG2	6	0.21
(3,2)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG21	4	0.21
(3,2)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG22	4	0.21
(3,2)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG23	4	0.21
(3,2)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG21	5	0.21
(3,2)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG22	5	0.21
(3,2)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG23	5	0.21
(3,2)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG21	6	0.21
(3,2)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG22	6	0.21
(3,2)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG23	6	0.21
(2,458)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:HG	5	0.21
(2,453)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:H	1	0.21
(2,453)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:H	8	0.21
(2,453)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:H	10	0.21
(2,442)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:H	3	0.21
(2,442)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:H	3	0.21
(2,442)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:H	3	0.21
(2,428)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HB2	3	0.21
(2,428)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HB2	3	0.21
(2,428)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HB2	3	0.21
(2,382)	1:24:A:PRO:HG2	1:25:A:SER:H	9	0.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,379)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:H	3	0.21
(2,333)	1:16:A:GLY:H	1:17:A:PRO:HD3	2	0.21
(2,333)	1:16:A:GLY:H	1:17:A:PRO:HD3	5	0.21
(2,304)	1:3:A:GLU:HA	1:6:A:ARG:HG2	3	0.21
(2,303)	1:11:A:TRP:HA	1:14:A:ASP:HB3	3	0.21
(2,270)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	1	0.21
(2,265)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HB2	10	0.21
(2,225)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	2	0.21
(2,220)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HD1	5	0.21
(2,199)	1:24:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD2	1	0.21
(2,199)	1:24:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD2	5	0.21
(2,199)	1:24:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD2	6	0.21
(2,199)	1:24:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD2	9	0.21
(2,191)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	1	0.21
(2,191)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	2	0.21
(2,191)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	3	0.21
(2,191)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	4	0.21
(2,191)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	7	0.21
(2,171)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HG3	10	0.21
(2,167)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HD2	2	0.21
(2,156)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HG2	8	0.21
(2,140)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD3	8	0.21
(2,140)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD3	10	0.21
(2,136)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG3	10	0.21
(2,46)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB3	3	0.21
(2,22)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG3	2	0.21
(2,22)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG3	4	0.21
(2,22)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG3	5	0.21
(2,22)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG3	6	0.21
(1,655)	1:8:A:TYR:HA	1:12:A:LEU:HG	5	0.21
(1,650)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HD11	10	0.21
(1,650)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HD12	10	0.21
(1,650)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HD13	10	0.21
(1,650)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HD11	10	0.21
(1,650)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HD12	10	0.21
(1,650)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HD13	10	0.21
(1,648)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:H	1	0.21
(1,648)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:H	8	0.21
(1,648)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:H	10	0.21
(1,636)	1:5:A:VAL:HG11	1:7:A:LEU:H	3	0.21
(1,636)	1:5:A:VAL:HG12	1:7:A:LEU:H	3	0.21
(1,636)	1:5:A:VAL:HG13	1:7:A:LEU:H	3	0.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,613)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HB2	3	0.21
(1,613)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HB2	3	0.21
(1,613)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HB2	3	0.21
(1,608)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG12	3	0.21
(1,608)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG12	3	0.21
(1,608)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG12	3	0.21
(1,608)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG12	6	0.21
(1,608)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG12	6	0.21
(1,608)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG12	6	0.21
(1,580)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD11	2	0.21
(1,580)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD12	2	0.21
(1,580)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD13	2	0.21
(1,580)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD11	4	0.21
(1,580)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD12	4	0.21
(1,580)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD13	4	0.21
(1,580)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD11	6	0.21
(1,580)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD12	6	0.21
(1,580)	1:5:A:VAL:HA	1:9:A:ILE:HD13	6	0.21
(1,568)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HA	8	0.21
(1,568)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HA	8	0.21
(1,568)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HA	8	0.21
(1,528)	1:24:A:PRO:HG2	1:25:A:SER:H	9	0.21
(1,524)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:H	3	0.21
(1,454)	1:16:A:GLY:H	1:17:A:PRO:HD3	2	0.21
(1,454)	1:16:A:GLY:H	1:17:A:PRO:HD3	5	0.21
(1,441)	1:22:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	10	0.21
(1,412)	1:3:A:GLU:HA	1:6:A:ARG:HG2	3	0.21
(1,409)	1:11:A:TRP:HA	1:14:A:ASP:HB3	3	0.21
(1,359)	1:11:A:TRP:HZ2	1:23:A:PRO:HG2	1	0.21
(1,349)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG2	1	0.21
(1,347)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HB2	10	0.21
(1,333)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HA	7	0.21
(1,333)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HA	9	0.21
(1,300)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG2	7	0.21
(1,300)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG2	7	0.21
(1,299)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HE1	9	0.21
(1,299)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HE2	9	0.21
(1,297)	1:11:A:TRP:HD1	1:23:A:PRO:HA	7	0.21
(1,297)	1:11:A:TRP:HD1	1:23:A:PRO:HA	10	0.21
(1,284)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	2	0.21
(1,278)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HA	2	0.21
(1,278)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HA	2	0.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,278)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HA	3	0.21
(1,278)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HA	3	0.21
(1,278)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HA	5	0.21
(1,278)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HA	5	0.21
(1,271)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HD1	5	0.21
(1,240)	1:24:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD2	1	0.21
(1,240)	1:24:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD2	5	0.21
(1,240)	1:24:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD2	6	0.21
(1,240)	1:24:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD2	9	0.21
(1,229)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	1	0.21
(1,229)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	2	0.21
(1,229)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	3	0.21
(1,229)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	4	0.21
(1,229)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	7	0.21
(1,205)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HG3	10	0.21
(1,201)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HD2	2	0.21
(1,189)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HG2	8	0.21
(1,171)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD3	8	0.21
(1,171)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD3	10	0.21
(1,167)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG3	10	0.21
(1,146)	1:13:A:LYS:HA	1:14:A:ASP:H	6	0.21
(1,146)	1:13:A:LYS:HA	1:14:A:ASP:H	8	0.21
(1,137)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HG2	6	0.21
(1,137)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HG2	6	0.21
(1,57)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB3	3	0.21
(1,26)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG3	2	0.21
(1,26)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG3	4	0.21
(1,26)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG3	5	0.21
(1,26)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG3	6	0.21
(1,16)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG21	4	0.21
(1,16)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG22	4	0.21
(1,16)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG23	4	0.21
(1,16)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG21	5	0.21
(1,16)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG22	5	0.21
(1,16)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG23	5	0.21
(1,16)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG21	6	0.21
(1,16)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG22	6	0.21
(1,16)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG23	6	0.21
(3,197)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HD11	4	0.2
(3,197)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HD12	4	0.2
(3,197)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HD13	4	0.2
(3,197)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HD11	4	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,197)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HD12	4	0.2
(3,197)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HD13	4	0.2
(3,184)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG12	4	0.2
(3,184)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG12	4	0.2
(3,184)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG12	4	0.2
(3,184)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG12	8	0.2
(3,184)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG12	8	0.2
(3,184)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG12	8	0.2
(3,87)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HB2	4	0.2
(3,83)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG2	6	0.2
(3,83)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG2	7	0.2
(3,83)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG2	8	0.2
(3,64)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HE1	5	0.2
(3,64)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HE2	5	0.2
(3,35)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD2	10	0.2
(3,31)	1:13:A:LYS:HA	1:14:A:ASP:H	3	0.2
(3,5)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HD3	4	0.2
(3,2)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG21	1	0.2
(3,2)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG22	1	0.2
(3,2)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG23	1	0.2
(3,2)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG21	2	0.2
(3,2)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG22	2	0.2
(3,2)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG23	2	0.2
(3,2)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG21	7	0.2
(3,2)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG22	7	0.2
(3,2)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG23	7	0.2
(2,453)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:H	4	0.2
(2,453)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:H	5	0.2
(2,453)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:H	7	0.2
(2,453)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:H	9	0.2
(2,348)	1:10:A:GLN:HB2	1:12:A:LEU:H	10	0.2
(2,333)	1:16:A:GLY:H	1:17:A:PRO:HD3	4	0.2
(2,314)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HD2	10	0.2
(2,310)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG2	9	0.2
(2,310)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG2	10	0.2
(2,308)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	1	0.2
(2,304)	1:3:A:GLU:HA	1:6:A:ARG:HG2	10	0.2
(2,262)	1:11:A:TRP:HZ3	1:16:A:GLY:HA2	7	0.2
(2,255)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:HZ3	4	0.2
(2,249)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB2	2	0.2
(2,249)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB2	2	0.2
(2,249)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB2	5	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,249)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB2	5	0.2
(2,249)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB2	9	0.2
(2,249)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB2	9	0.2
(2,236)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	7	0.2
(2,236)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	7	0.2
(2,225)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	1	0.2
(2,225)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	3	0.2
(2,225)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	4	0.2
(2,225)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	6	0.2
(2,225)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	7	0.2
(2,225)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	9	0.2
(2,225)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	10	0.2
(2,220)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HD1	6	0.2
(2,199)	1:24:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD2	2	0.2
(2,199)	1:24:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD2	4	0.2
(2,191)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	5	0.2
(2,191)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	9	0.2
(2,140)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD3	5	0.2
(2,136)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG3	5	0.2
(2,136)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG3	8	0.2
(2,102)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HG2	6	0.2
(2,82)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HB3	8	0.2
(2,46)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB3	4	0.2
(2,46)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB3	6	0.2
(2,46)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB3	8	0.2
(2,22)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG3	1	0.2
(1,650)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HD11	4	0.2
(1,650)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HD12	4	0.2
(1,650)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HD13	4	0.2
(1,650)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HD11	4	0.2
(1,650)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HD12	4	0.2
(1,650)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HD13	4	0.2
(1,648)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:H	4	0.2
(1,648)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:H	5	0.2
(1,648)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:H	7	0.2
(1,648)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:H	9	0.2
(1,608)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG12	4	0.2
(1,608)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG12	4	0.2
(1,608)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG12	4	0.2
(1,608)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG12	8	0.2
(1,608)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG12	8	0.2
(1,608)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG12	8	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,480)	1:10:A:GLN:HB2	1:12:A:LEU:H	10	0.2
(1,454)	1:16:A:GLY:H	1:17:A:PRO:HD3	4	0.2
(1,424)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HD2	10	0.2
(1,420)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG2	9	0.2
(1,420)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HG2	10	0.2
(1,417)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	1	0.2
(1,412)	1:3:A:GLU:HA	1:6:A:ARG:HG2	10	0.2
(1,354)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HB2	4	0.2
(1,349)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG2	6	0.2
(1,349)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG2	7	0.2
(1,349)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG2	8	0.2
(1,344)	1:11:A:TRP:HZ3	1:16:A:GLY:HA2	7	0.2
(1,328)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:HZ3	4	0.2
(1,321)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB2	2	0.2
(1,321)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB2	2	0.2
(1,321)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB2	5	0.2
(1,321)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB2	5	0.2
(1,321)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB2	9	0.2
(1,321)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB2	9	0.2
(1,301)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	7	0.2
(1,301)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	7	0.2
(1,299)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HE1	5	0.2
(1,299)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HE2	5	0.2
(1,284)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	1	0.2
(1,284)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	3	0.2
(1,284)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	4	0.2
(1,284)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	6	0.2
(1,284)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	7	0.2
(1,284)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	9	0.2
(1,284)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	10	0.2
(1,271)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HD1	6	0.2
(1,240)	1:24:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD2	2	0.2
(1,240)	1:24:A:PRO:HB3	1:24:A:PRO:HD2	4	0.2
(1,229)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	5	0.2
(1,229)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	9	0.2
(1,206)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD2	10	0.2
(1,171)	1:17:A:PRO:HB3	1:17:A:PRO:HD3	5	0.2
(1,167)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG3	5	0.2
(1,167)	1:17:A:PRO:HD2	1:17:A:PRO:HG3	8	0.2
(1,146)	1:13:A:LYS:HA	1:14:A:ASP:H	3	0.2
(1,129)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HG2	6	0.2
(1,100)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HB3	8	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,57)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB3	4	0.2
(1,57)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB3	6	0.2
(1,57)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB3	8	0.2
(1,36)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HD3	4	0.2
(1,26)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG3	1	0.2
(1,16)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG21	1	0.2
(1,16)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG22	1	0.2
(1,16)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG23	1	0.2
(1,16)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG21	2	0.2
(1,16)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG22	2	0.2
(1,16)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG23	2	0.2
(1,16)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG21	7	0.2
(1,16)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG22	7	0.2
(1,16)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG23	7	0.2
(3,184)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG12	10	0.19
(3,184)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG12	10	0.19
(3,184)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG12	10	0.19
(3,87)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HB2	2	0.19
(3,83)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG2	4	0.19
(3,83)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG2	5	0.19
(3,83)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG2	9	0.19
(3,74)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD2	3	0.19
(3,65)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG2	3	0.19
(3,65)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG2	3	0.19
(3,65)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG2	5	0.19
(3,65)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG2	5	0.19
(3,65)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG2	6	0.19
(3,65)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG2	6	0.19
(3,56)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HA	1	0.19
(3,56)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HA	1	0.19
(3,5)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HD3	9	0.19
(3,2)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG21	9	0.19
(3,2)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG22	9	0.19
(3,2)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG23	9	0.19
(2,453)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:H	2	0.19
(2,422)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HB2	5	0.19
(2,422)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HB2	5	0.19
(2,422)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HB2	5	0.19
(2,422)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HB2	6	0.19
(2,422)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HB2	6	0.19
(2,422)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HB2	6	0.19
(2,422)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HB2	7	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,422)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HB2	7	0.19
(2,422)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HB2	7	0.19
(2,386)	1:7:A:LEU:HD11	1:25:A:SER:H	9	0.19
(2,386)	1:7:A:LEU:HD12	1:25:A:SER:H	9	0.19
(2,386)	1:7:A:LEU:HD13	1:25:A:SER:H	9	0.19
(2,382)	1:24:A:PRO:HG2	1:25:A:SER:H	5	0.19
(2,380)	1:24:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	6	0.19
(2,331)	1:12:A:LEU:HA	1:16:A:GLY:H	2	0.19
(2,324)	1:21:A:ARG:HG2	1:22:A:PRO:HD2	2	0.19
(2,308)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	3	0.19
(2,308)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	5	0.19
(2,308)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	8	0.19
(2,308)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	10	0.19
(2,298)	1:11:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HE3	8	0.19
(2,288)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:H	8	0.19
(2,262)	1:11:A:TRP:HZ3	1:16:A:GLY:HA2	9	0.19
(2,255)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:HZ3	1	0.19
(2,255)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:HZ3	2	0.19
(2,244)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	2	0.19
(2,244)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	2	0.19
(2,244)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	2	0.19
(2,244)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	2	0.19
(2,244)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	2	0.19
(2,244)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	2	0.19
(2,244)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	3	0.19
(2,244)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	3	0.19
(2,244)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	3	0.19
(2,244)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	3	0.19
(2,244)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	3	0.19
(2,244)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	3	0.19
(2,244)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	6	0.19
(2,244)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	6	0.19
(2,244)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	6	0.19
(2,244)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	6	0.19
(2,244)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	6	0.19
(2,244)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	6	0.19
(2,225)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	5	0.19
(2,225)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	8	0.19
(2,220)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HD1	4	0.19
(2,191)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	8	0.19
(2,191)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	10	0.19
(2,156)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HG2	10	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,89)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD21	9	0.19
(2,89)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD22	9	0.19
(2,89)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD23	9	0.19
(2,82)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HB3	3	0.19
(2,82)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HB3	7	0.19
(2,82)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HB3	9	0.19
(2,82)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HB3	10	0.19
(2,46)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB3	1	0.19
(2,46)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB3	2	0.19
(2,46)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB3	5	0.19
(2,30)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HD3	10	0.19
(2,24)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HD3	5	0.19
(2,22)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG3	9	0.19
(1,648)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:H	2	0.19
(1,608)	1:5:A:VAL:HG21	1:9:A:ILE:HG12	10	0.19
(1,608)	1:5:A:VAL:HG22	1:9:A:ILE:HG12	10	0.19
(1,608)	1:5:A:VAL:HG23	1:9:A:ILE:HG12	10	0.19
(1,601)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HB2	5	0.19
(1,601)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HB2	5	0.19
(1,601)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HB2	5	0.19
(1,601)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HB2	6	0.19
(1,601)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HB2	6	0.19
(1,601)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HB2	6	0.19
(1,601)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HB2	7	0.19
(1,601)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HB2	7	0.19
(1,601)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HB2	7	0.19
(1,534)	1:7:A:LEU:HD11	1:25:A:SER:H	9	0.19
(1,534)	1:7:A:LEU:HD12	1:25:A:SER:H	9	0.19
(1,534)	1:7:A:LEU:HD13	1:25:A:SER:H	9	0.19
(1,528)	1:24:A:PRO:HG2	1:25:A:SER:H	5	0.19
(1,525)	1:24:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	6	0.19
(1,452)	1:12:A:LEU:HA	1:16:A:GLY:H	2	0.19
(1,436)	1:21:A:ARG:HG2	1:22:A:PRO:HD2	2	0.19
(1,417)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	3	0.19
(1,417)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	5	0.19
(1,417)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	8	0.19
(1,417)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	10	0.19
(1,398)	1:11:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HE3	8	0.19
(1,386)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:H	8	0.19
(1,354)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HB2	2	0.19
(1,349)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG2	4	0.19
(1,349)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG2	5	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,349)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG2	9	0.19
(1,344)	1:11:A:TRP:HZ3	1:16:A:GLY:HA2	9	0.19
(1,329)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD2	3	0.19
(1,328)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:HZ3	1	0.19
(1,328)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:HZ3	2	0.19
(1,313)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	2	0.19
(1,313)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	2	0.19
(1,313)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	2	0.19
(1,313)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	2	0.19
(1,313)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	2	0.19
(1,313)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	2	0.19
(1,313)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	3	0.19
(1,313)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	3	0.19
(1,313)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	3	0.19
(1,313)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	3	0.19
(1,313)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	3	0.19
(1,313)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	3	0.19
(1,313)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD11	6	0.19
(1,313)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD12	6	0.19
(1,313)	1:8:A:TYR:HD1	1:12:A:LEU:HD13	6	0.19
(1,313)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD11	6	0.19
(1,313)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD12	6	0.19
(1,313)	1:8:A:TYR:HD2	1:12:A:LEU:HD13	6	0.19
(1,300)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG2	3	0.19
(1,300)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG2	3	0.19
(1,300)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG2	5	0.19
(1,300)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG2	5	0.19
(1,300)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG2	6	0.19
(1,300)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG2	6	0.19
(1,284)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	5	0.19
(1,284)	1:23:A:PRO:HA	1:23:A:PRO:HG2	8	0.19
(1,278)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HA	1	0.19
(1,278)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HA	1	0.19
(1,271)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HD1	4	0.19
(1,229)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	8	0.19
(1,229)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	10	0.19
(1,189)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HG2	10	0.19
(1,109)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD21	9	0.19
(1,109)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD22	9	0.19
(1,109)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD23	9	0.19
(1,100)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HB3	3	0.19
(1,100)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HB3	7	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,100)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HB3	9	0.19
(1,100)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HB3	10	0.19
(1,57)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB3	1	0.19
(1,57)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB3	2	0.19
(1,57)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB3	5	0.19
(1,36)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HD3	9	0.19
(1,34)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HD3	10	0.19
(1,28)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HD3	5	0.19
(1,26)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HG3	9	0.19
(1,16)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG21	9	0.19
(1,16)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG22	9	0.19
(1,16)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG23	9	0.19
(3,180)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG3	2	0.18
(3,180)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG3	2	0.18
(3,180)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG3	2	0.18
(3,180)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG3	5	0.18
(3,180)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG3	5	0.18
(3,180)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG3	5	0.18
(3,160)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HA	10	0.18
(3,160)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HA	10	0.18
(3,160)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HA	10	0.18
(3,135)	1:7:A:LEU:HB2	1:8:A:TYR:H	7	0.18
(3,87)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HB2	1	0.18
(3,87)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HB2	6	0.18
(3,83)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG2	2	0.18
(3,74)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD2	6	0.18
(3,65)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG2	2	0.18
(3,65)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG2	2	0.18
(3,64)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HE1	6	0.18
(3,64)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HE2	6	0.18
(3,63)	1:11:A:TRP:HD1	1:23:A:PRO:HA	2	0.18
(3,63)	1:11:A:TRP:HD1	1:23:A:PRO:HA	8	0.18
(3,34)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG2	10	0.18
(3,34)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HG2	10	0.18
(3,2)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG21	3	0.18
(3,2)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG22	3	0.18
(3,2)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG23	3	0.18
(3,2)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG21	8	0.18
(3,2)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG22	8	0.18
(3,2)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG23	8	0.18
(2,453)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:H	6	0.18
(2,422)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HB2	1	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,422)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HB2	1	0.18
(2,422)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HB2	1	0.18
(2,422)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HB2	2	0.18
(2,422)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HB2	2	0.18
(2,422)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HB2	2	0.18
(2,422)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HB2	4	0.18
(2,422)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HB2	4	0.18
(2,422)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HB2	4	0.18
(2,422)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HB2	9	0.18
(2,422)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HB2	9	0.18
(2,422)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HB2	9	0.18
(2,383)	1:23:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	3	0.18
(2,383)	1:23:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	7	0.18
(2,380)	1:24:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	5	0.18
(2,380)	1:24:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	7	0.18
(2,348)	1:10:A:GLN:HB2	1:12:A:LEU:H	1	0.18
(2,348)	1:10:A:GLN:HB2	1:12:A:LEU:H	2	0.18
(2,348)	1:10:A:GLN:HB2	1:12:A:LEU:H	5	0.18
(2,348)	1:10:A:GLN:HB2	1:12:A:LEU:H	8	0.18
(2,333)	1:16:A:GLY:H	1:17:A:PRO:HD3	7	0.18
(2,333)	1:16:A:GLY:H	1:17:A:PRO:HD3	9	0.18
(2,324)	1:21:A:ARG:HG2	1:22:A:PRO:HD2	10	0.18
(2,319)	1:21:A:ARG:HB2	1:22:A:PRO:HD3	5	0.18
(2,319)	1:21:A:ARG:HB3	1:22:A:PRO:HD3	5	0.18
(2,316)	1:14:A:ASP:HB2	1:19:A:SER:HB2	4	0.18
(2,316)	1:14:A:ASP:HB2	1:19:A:SER:HB2	6	0.18
(2,314)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HD2	1	0.18
(2,308)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	2	0.18
(2,308)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	7	0.18
(2,288)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:H	9	0.18
(2,253)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HA	3	0.18
(2,249)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB2	6	0.18
(2,249)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB2	6	0.18
(2,220)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HD1	3	0.18
(2,191)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	6	0.18
(2,167)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HD2	3	0.18
(2,156)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HG2	2	0.18
(2,156)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HG2	3	0.18
(2,156)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HG2	9	0.18
(2,82)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HB3	1	0.18
(2,82)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HB3	2	0.18
(2,82)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HB3	6	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,69)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HG3	6	0.18
(2,24)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HD3	2	0.18
(1,648)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:H	6	0.18
(1,602)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG3	2	0.18
(1,602)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG3	2	0.18
(1,602)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG3	2	0.18
(1,602)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG3	5	0.18
(1,602)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG3	5	0.18
(1,602)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG3	5	0.18
(1,601)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HB2	1	0.18
(1,601)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HB2	1	0.18
(1,601)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HB2	1	0.18
(1,601)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HB2	2	0.18
(1,601)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HB2	2	0.18
(1,601)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HB2	2	0.18
(1,601)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HB2	4	0.18
(1,601)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HB2	4	0.18
(1,601)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HB2	4	0.18
(1,601)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HB2	9	0.18
(1,601)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HB2	9	0.18
(1,601)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HB2	9	0.18
(1,568)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HA	10	0.18
(1,568)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HA	10	0.18
(1,568)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HA	10	0.18
(1,530)	1:23:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	3	0.18
(1,530)	1:23:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	7	0.18
(1,525)	1:24:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	5	0.18
(1,525)	1:24:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	7	0.18
(1,491)	1:7:A:LEU:HB2	1:8:A:TYR:H	7	0.18
(1,480)	1:10:A:GLN:HB2	1:12:A:LEU:H	1	0.18
(1,480)	1:10:A:GLN:HB2	1:12:A:LEU:H	2	0.18
(1,480)	1:10:A:GLN:HB2	1:12:A:LEU:H	5	0.18
(1,480)	1:10:A:GLN:HB2	1:12:A:LEU:H	8	0.18
(1,454)	1:16:A:GLY:H	1:17:A:PRO:HD3	7	0.18
(1,454)	1:16:A:GLY:H	1:17:A:PRO:HD3	9	0.18
(1,436)	1:21:A:ARG:HG2	1:22:A:PRO:HD2	10	0.18
(1,430)	1:21:A:ARG:HB2	1:22:A:PRO:HD3	5	0.18
(1,430)	1:21:A:ARG:HB3	1:22:A:PRO:HD3	5	0.18
(1,427)	1:14:A:ASP:HB2	1:19:A:SER:HB2	4	0.18
(1,427)	1:14:A:ASP:HB2	1:19:A:SER:HB2	6	0.18
(1,424)	1:16:A:GLY:HA2	1:17:A:PRO:HD2	1	0.18
(1,417)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	2	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,417)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	7	0.18
(1,386)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:H	9	0.18
(1,354)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HB2	1	0.18
(1,354)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HB2	6	0.18
(1,349)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG2	2	0.18
(1,329)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD2	6	0.18
(1,325)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HA	3	0.18
(1,321)	1:8:A:TYR:HE1	1:23:A:PRO:HB2	6	0.18
(1,321)	1:8:A:TYR:HE2	1:23:A:PRO:HB2	6	0.18
(1,300)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG2	2	0.18
(1,300)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG2	2	0.18
(1,299)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HE1	6	0.18
(1,299)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HE2	6	0.18
(1,297)	1:11:A:TRP:HD1	1:23:A:PRO:HA	2	0.18
(1,297)	1:11:A:TRP:HD1	1:23:A:PRO:HA	8	0.18
(1,271)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HD1	3	0.18
(1,229)	1:23:A:PRO:HB2	1:23:A:PRO:HD3	6	0.18
(1,201)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HD2	3	0.18
(1,199)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG2	10	0.18
(1,199)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HG2	10	0.18
(1,189)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HG2	2	0.18
(1,189)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HG2	3	0.18
(1,189)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HG2	9	0.18
(1,100)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HB3	1	0.18
(1,100)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HB3	2	0.18
(1,100)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HB3	6	0.18
(1,85)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HG3	6	0.18
(1,28)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HD3	2	0.18
(1,16)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG21	3	0.18
(1,16)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG22	3	0.18
(1,16)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG23	3	0.18
(1,16)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG21	8	0.18
(1,16)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG22	8	0.18
(1,16)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG23	8	0.18
(3,197)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HD11	6	0.17
(3,197)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HD12	6	0.17
(3,197)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HD13	6	0.17
(3,197)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HD11	6	0.17
(3,197)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HD12	6	0.17
(3,197)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HD13	6	0.17
(3,193)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:H	8	0.17
(3,193)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:H	8	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,193)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:H	8	0.17
(3,180)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG3	4	0.17
(3,180)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG3	4	0.17
(3,180)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG3	4	0.17
(3,160)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HA	4	0.17
(3,160)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HA	4	0.17
(3,160)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HA	4	0.17
(3,160)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HA	5	0.17
(3,160)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HA	5	0.17
(3,160)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HA	5	0.17
(3,160)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HA	6	0.17
(3,160)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HA	6	0.17
(3,160)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HA	6	0.17
(3,135)	1:7:A:LEU:HB2	1:8:A:TYR:H	8	0.17
(3,87)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HB2	3	0.17
(3,87)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HB2	5	0.17
(3,83)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG2	10	0.17
(3,65)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG2	1	0.17
(3,65)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG2	1	0.17
(3,63)	1:11:A:TRP:HD1	1:23:A:PRO:HA	3	0.17
(3,63)	1:11:A:TRP:HD1	1:23:A:PRO:HA	4	0.17
(3,63)	1:11:A:TRP:HD1	1:23:A:PRO:HA	6	0.17
(3,34)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG2	7	0.17
(3,34)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HG2	7	0.17
(3,2)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG21	10	0.17
(3,2)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG22	10	0.17
(3,2)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG23	10	0.17
(2,470)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HD2	3	0.17
(2,470)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HD2	3	0.17
(2,470)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HD2	3	0.17
(2,470)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HD3	3	0.17
(2,470)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HD3	3	0.17
(2,470)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HD3	3	0.17
(2,461)	1:10:A:GLN:HA	1:13:A:LYS:HG2	10	0.17
(2,449)	1:15:A:GLY:HA2	1:16:A:GLY:H	1	0.17
(2,449)	1:15:A:GLY:HA2	1:16:A:GLY:H	2	0.17
(2,449)	1:15:A:GLY:HA2	1:16:A:GLY:H	3	0.17
(2,449)	1:15:A:GLY:HA2	1:16:A:GLY:H	6	0.17
(2,449)	1:15:A:GLY:HA2	1:16:A:GLY:H	10	0.17
(2,428)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HB2	8	0.17
(2,428)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HB2	8	0.17
(2,428)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HB2	8	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,428)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HB2	10	0.17
(2,428)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HB2	10	0.17
(2,428)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HB2	10	0.17
(2,419)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG11	10	0.17
(2,419)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG12	10	0.17
(2,419)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG13	10	0.17
(2,383)	1:23:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	1	0.17
(2,380)	1:24:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	10	0.17
(2,333)	1:16:A:GLY:H	1:17:A:PRO:HD3	10	0.17
(2,331)	1:12:A:LEU:HA	1:16:A:GLY:H	1	0.17
(2,331)	1:12:A:LEU:HA	1:16:A:GLY:H	4	0.17
(2,316)	1:14:A:ASP:HB2	1:19:A:SER:HB2	1	0.17
(2,316)	1:14:A:ASP:HB2	1:19:A:SER:HB2	2	0.17
(2,316)	1:14:A:ASP:HB2	1:19:A:SER:HB2	3	0.17
(2,299)	1:8:A:TYR:H	1:8:A:TYR:HD1	5	0.17
(2,299)	1:8:A:TYR:H	1:8:A:TYR:HD2	5	0.17
(2,288)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:H	7	0.17
(2,288)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:H	10	0.17
(2,284)	1:11:A:TRP:HE1	1:19:A:SER:HB2	3	0.17
(2,255)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:HZ3	5	0.17
(2,253)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HA	6	0.17
(2,236)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	9	0.17
(2,236)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	9	0.17
(2,220)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HD1	1	0.17
(2,220)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HD1	2	0.17
(2,220)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HD1	10	0.17
(2,219)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HE22	1	0.17
(2,219)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HE22	1	0.17
(2,219)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HE22	1	0.17
(2,219)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HE22	2	0.17
(2,219)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HE22	2	0.17
(2,219)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HE22	2	0.17
(2,219)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HE22	6	0.17
(2,219)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HE22	6	0.17
(2,219)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HE22	6	0.17
(2,167)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HD2	4	0.17
(2,156)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HG2	1	0.17
(2,156)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HG2	4	0.17
(2,89)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD21	7	0.17
(2,89)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD22	7	0.17
(2,89)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD23	7	0.17
(2,88)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HG	10	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,82)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HB3	4	0.17
(2,82)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HB3	5	0.17
(2,56)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:H	8	0.17
(2,56)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:H	10	0.17
(2,46)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB3	7	0.17
(2,46)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB3	9	0.17
(2,46)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB3	10	0.17
(1,674)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HD2	3	0.17
(1,674)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HD2	3	0.17
(1,674)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HD2	3	0.17
(1,674)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HD3	3	0.17
(1,674)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HD3	3	0.17
(1,674)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HD3	3	0.17
(1,659)	1:10:A:GLN:HA	1:13:A:LYS:HG2	10	0.17
(1,650)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HD11	6	0.17
(1,650)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HD12	6	0.17
(1,650)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HD13	6	0.17
(1,650)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HD11	6	0.17
(1,650)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HD12	6	0.17
(1,650)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HD13	6	0.17
(1,644)	1:15:A:GLY:HA2	1:16:A:GLY:H	1	0.17
(1,644)	1:15:A:GLY:HA2	1:16:A:GLY:H	2	0.17
(1,644)	1:15:A:GLY:HA2	1:16:A:GLY:H	3	0.17
(1,644)	1:15:A:GLY:HA2	1:16:A:GLY:H	6	0.17
(1,644)	1:15:A:GLY:HA2	1:16:A:GLY:H	10	0.17
(1,633)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:H	8	0.17
(1,633)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:H	8	0.17
(1,633)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:H	8	0.17
(1,613)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HB2	8	0.17
(1,613)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HB2	8	0.17
(1,613)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HB2	8	0.17
(1,613)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HB2	10	0.17
(1,613)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HB2	10	0.17
(1,613)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HB2	10	0.17
(1,602)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG3	4	0.17
(1,602)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG3	4	0.17
(1,602)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG3	4	0.17
(1,595)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG11	10	0.17
(1,595)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG12	10	0.17
(1,595)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG13	10	0.17
(1,568)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HA	4	0.17
(1,568)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HA	4	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,568)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HA	4	0.17
(1,568)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HA	5	0.17
(1,568)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HA	5	0.17
(1,568)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HA	5	0.17
(1,568)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HA	6	0.17
(1,568)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HA	6	0.17
(1,568)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HA	6	0.17
(1,530)	1:23:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	1	0.17
(1,525)	1:24:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	10	0.17
(1,491)	1:7:A:LEU:HB2	1:8:A:TYR:H	8	0.17
(1,454)	1:16:A:GLY:H	1:17:A:PRO:HD3	10	0.17
(1,452)	1:12:A:LEU:HA	1:16:A:GLY:H	1	0.17
(1,452)	1:12:A:LEU:HA	1:16:A:GLY:H	4	0.17
(1,427)	1:14:A:ASP:HB2	1:19:A:SER:HB2	1	0.17
(1,427)	1:14:A:ASP:HB2	1:19:A:SER:HB2	2	0.17
(1,427)	1:14:A:ASP:HB2	1:19:A:SER:HB2	3	0.17
(1,400)	1:8:A:TYR:H	1:8:A:TYR:HD1	5	0.17
(1,400)	1:8:A:TYR:H	1:8:A:TYR:HD2	5	0.17
(1,386)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:H	7	0.17
(1,386)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:H	10	0.17
(1,381)	1:11:A:TRP:HE1	1:19:A:SER:HB2	3	0.17
(1,354)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HB2	3	0.17
(1,354)	1:11:A:TRP:HE3	1:12:A:LEU:HB2	5	0.17
(1,349)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HG2	10	0.17
(1,328)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:HZ3	5	0.17
(1,325)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HA	6	0.17
(1,301)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	9	0.17
(1,301)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	9	0.17
(1,300)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG2	1	0.17
(1,300)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG2	1	0.17
(1,297)	1:11:A:TRP:HD1	1:23:A:PRO:HA	3	0.17
(1,297)	1:11:A:TRP:HD1	1:23:A:PRO:HA	4	0.17
(1,297)	1:11:A:TRP:HD1	1:23:A:PRO:HA	6	0.17
(1,271)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HD1	1	0.17
(1,271)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HD1	2	0.17
(1,271)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HD1	10	0.17
(1,270)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HE22	1	0.17
(1,270)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HE22	1	0.17
(1,270)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HE22	1	0.17
(1,270)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HE22	2	0.17
(1,270)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HE22	2	0.17
(1,270)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HE22	2	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,270)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HE22	6	0.17
(1,270)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HE22	6	0.17
(1,270)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HE22	6	0.17
(1,201)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HD2	4	0.17
(1,199)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG2	7	0.17
(1,199)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HG2	7	0.17
(1,189)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HG2	1	0.17
(1,189)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HG2	4	0.17
(1,109)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD21	7	0.17
(1,109)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD22	7	0.17
(1,109)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HD23	7	0.17
(1,107)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HG	10	0.17
(1,100)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HB3	4	0.17
(1,100)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HB3	5	0.17
(1,70)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:H	8	0.17
(1,70)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:H	10	0.17
(1,57)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB3	7	0.17
(1,57)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB3	9	0.17
(1,57)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HB3	10	0.17
(1,16)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG21	10	0.17
(1,16)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG22	10	0.17
(1,16)	1:5:A:VAL:HA	1:5:A:VAL:HG23	10	0.17
(3,180)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG3	1	0.16
(3,180)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG3	1	0.16
(3,180)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG3	1	0.16
(3,160)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HA	1	0.16
(3,160)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HA	1	0.16
(3,160)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HA	1	0.16
(3,64)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HE1	10	0.16
(3,64)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HE2	10	0.16
(3,59)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD3	3	0.16
(3,54)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HD1	8	0.16
(3,54)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HD2	8	0.16
(3,34)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG2	9	0.16
(3,34)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HG2	9	0.16
(3,33)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD2	6	0.16
(3,28)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HG2	4	0.16
(3,28)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HG2	4	0.16
(3,5)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HD3	2	0.16
(3,5)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HD3	5	0.16
(2,470)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HD2	8	0.16
(2,470)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HD2	8	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,470)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HD2	8	0.16
(2,470)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HD3	8	0.16
(2,470)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HD3	8	0.16
(2,470)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HD3	8	0.16
(2,461)	1:10:A:GLN:HA	1:13:A:LYS:HG2	9	0.16
(2,449)	1:15:A:GLY:HA2	1:16:A:GLY:H	7	0.16
(2,449)	1:15:A:GLY:HA2	1:16:A:GLY:H	9	0.16
(2,433)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA3	10	0.16
(2,433)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA3	10	0.16
(2,433)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA3	10	0.16
(2,386)	1:7:A:LEU:HD11	1:25:A:SER:H	6	0.16
(2,386)	1:7:A:LEU:HD12	1:25:A:SER:H	6	0.16
(2,386)	1:7:A:LEU:HD13	1:25:A:SER:H	6	0.16
(2,380)	1:24:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	2	0.16
(2,380)	1:24:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	9	0.16
(2,368)	1:13:A:LYS:HB2	1:14:A:ASP:H	3	0.16
(2,368)	1:13:A:LYS:HB3	1:14:A:ASP:H	3	0.16
(2,368)	1:13:A:LYS:HB2	1:14:A:ASP:H	8	0.16
(2,368)	1:13:A:LYS:HB3	1:14:A:ASP:H	8	0.16
(2,364)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HG3	9	0.16
(2,348)	1:10:A:GLN:HB2	1:12:A:LEU:H	4	0.16
(2,347)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:H	8	0.16
(2,347)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:H	8	0.16
(2,347)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:H	8	0.16
(2,333)	1:16:A:GLY:H	1:17:A:PRO:HD3	8	0.16
(2,324)	1:21:A:ARG:HG2	1:22:A:PRO:HD2	1	0.16
(2,324)	1:21:A:ARG:HG2	1:22:A:PRO:HD2	4	0.16
(2,315)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB3	9	0.16
(2,298)	1:11:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HE3	10	0.16
(2,262)	1:11:A:TRP:HZ3	1:16:A:GLY:HA2	1	0.16
(2,253)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HA	8	0.16
(2,243)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG13	4	0.16
(2,243)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG13	4	0.16
(2,236)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	1	0.16
(2,236)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	1	0.16
(2,236)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	2	0.16
(2,236)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	2	0.16
(2,236)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	5	0.16
(2,236)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	5	0.16
(2,219)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HE22	4	0.16
(2,219)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HE22	4	0.16
(2,219)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HE22	4	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,219)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HE22	10	0.16
(2,219)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HE22	10	0.16
(2,219)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HE22	10	0.16
(2,180)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD2	7	0.16
(2,180)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD2	9	0.16
(2,177)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HB2	5	0.16
(2,167)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HD2	1	0.16
(2,156)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HG2	7	0.16
(2,69)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HG3	4	0.16
(2,56)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:H	9	0.16
(1,674)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HD2	8	0.16
(1,674)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HD2	8	0.16
(1,674)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HD2	8	0.16
(1,674)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HD3	8	0.16
(1,674)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HD3	8	0.16
(1,674)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HD3	8	0.16
(1,659)	1:10:A:GLN:HA	1:13:A:LYS:HG2	9	0.16
(1,644)	1:15:A:GLY:HA2	1:16:A:GLY:H	7	0.16
(1,644)	1:15:A:GLY:HA2	1:16:A:GLY:H	9	0.16
(1,620)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:HA3	10	0.16
(1,620)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:HA3	10	0.16
(1,620)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:HA3	10	0.16
(1,602)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG3	1	0.16
(1,602)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG3	1	0.16
(1,602)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG3	1	0.16
(1,568)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HA	1	0.16
(1,568)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HA	1	0.16
(1,568)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HA	1	0.16
(1,534)	1:7:A:LEU:HD11	1:25:A:SER:H	6	0.16
(1,534)	1:7:A:LEU:HD12	1:25:A:SER:H	6	0.16
(1,534)	1:7:A:LEU:HD13	1:25:A:SER:H	6	0.16
(1,525)	1:24:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	2	0.16
(1,525)	1:24:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	9	0.16
(1,511)	1:13:A:LYS:HB2	1:14:A:ASP:H	3	0.16
(1,511)	1:13:A:LYS:HB3	1:14:A:ASP:H	3	0.16
(1,511)	1:13:A:LYS:HB2	1:14:A:ASP:H	8	0.16
(1,511)	1:13:A:LYS:HB3	1:14:A:ASP:H	8	0.16
(1,505)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HG3	9	0.16
(1,480)	1:10:A:GLN:HB2	1:12:A:LEU:H	4	0.16
(1,478)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:H	8	0.16
(1,478)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:H	8	0.16
(1,478)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:H	8	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,454)	1:16:A:GLY:H	1:17:A:PRO:HD3	8	0.16
(1,436)	1:21:A:ARG:HG2	1:22:A:PRO:HD2	1	0.16
(1,436)	1:21:A:ARG:HG2	1:22:A:PRO:HD2	4	0.16
(1,426)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB3	9	0.16
(1,398)	1:11:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HE3	10	0.16
(1,344)	1:11:A:TRP:HZ3	1:16:A:GLY:HA2	1	0.16
(1,325)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HA	8	0.16
(1,310)	1:8:A:TYR:HE1	1:9:A:ILE:HG13	4	0.16
(1,310)	1:8:A:TYR:HE2	1:9:A:ILE:HG13	4	0.16
(1,301)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	1	0.16
(1,301)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	1	0.16
(1,301)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	2	0.16
(1,301)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	2	0.16
(1,301)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	5	0.16
(1,301)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	5	0.16
(1,299)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HE1	10	0.16
(1,299)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HE2	10	0.16
(1,281)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD3	3	0.16
(1,275)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HD1	8	0.16
(1,275)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HD2	8	0.16
(1,270)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HE22	4	0.16
(1,270)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HE22	4	0.16
(1,270)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HE22	4	0.16
(1,270)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HE22	10	0.16
(1,270)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HE22	10	0.16
(1,270)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HE22	10	0.16
(1,216)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD2	7	0.16
(1,216)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD2	9	0.16
(1,212)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HB2	5	0.16
(1,201)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HD2	1	0.16
(1,199)	1:21:A:ARG:HB2	1:21:A:ARG:HG2	9	0.16
(1,199)	1:21:A:ARG:HB3	1:21:A:ARG:HG2	9	0.16
(1,189)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HG2	7	0.16
(1,186)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD2	6	0.16
(1,137)	1:13:A:LYS:HD2	1:13:A:LYS:HG2	4	0.16
(1,137)	1:13:A:LYS:HD3	1:13:A:LYS:HG2	4	0.16
(1,85)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HG3	4	0.16
(1,70)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:H	9	0.16
(1,36)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HD3	2	0.16
(1,36)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HD3	5	0.16
(3,160)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HA	2	0.15
(3,160)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HA	2	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,160)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HA	2	0.15
(3,160)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HA	7	0.15
(3,160)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HA	7	0.15
(3,160)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HA	7	0.15
(3,160)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HA	9	0.15
(3,160)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HA	9	0.15
(3,160)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HA	9	0.15
(3,64)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HE1	8	0.15
(3,64)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HE2	8	0.15
(3,63)	1:11:A:TRP:HD1	1:23:A:PRO:HA	1	0.15
(3,59)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD3	1	0.15
(3,54)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HD1	1	0.15
(3,54)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HD2	1	0.15
(3,54)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HD1	2	0.15
(3,54)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HD2	2	0.15
(3,54)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HD1	3	0.15
(3,54)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HD2	3	0.15
(3,54)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HD1	5	0.15
(3,54)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HD2	5	0.15
(3,54)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HD1	10	0.15
(3,54)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HD2	10	0.15
(3,48)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HE1	6	0.15
(3,48)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HE1	7	0.15
(3,48)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HE1	8	0.15
(3,48)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HE1	9	0.15
(3,48)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HE1	10	0.15
(3,33)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD2	5	0.15
(3,5)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HD3	1	0.15
(2,461)	1:10:A:GLN:HA	1:13:A:LYS:HG2	1	0.15
(2,461)	1:10:A:GLN:HA	1:13:A:LYS:HG2	8	0.15
(2,449)	1:15:A:GLY:HA2	1:16:A:GLY:H	4	0.15
(2,444)	1:14:A:ASP:HB2	1:16:A:GLY:H	6	0.15
(2,440)	1:11:A:TRP:HH2	1:11:A:TRP:HZ3	3	0.15
(2,440)	1:11:A:TRP:HH2	1:11:A:TRP:HZ3	6	0.15
(2,440)	1:11:A:TRP:HH2	1:11:A:TRP:HZ3	8	0.15
(2,422)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HB2	3	0.15
(2,422)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HB2	3	0.15
(2,422)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HB2	3	0.15
(2,386)	1:7:A:LEU:HD11	1:25:A:SER:H	2	0.15
(2,386)	1:7:A:LEU:HD12	1:25:A:SER:H	2	0.15
(2,386)	1:7:A:LEU:HD13	1:25:A:SER:H	2	0.15
(2,386)	1:7:A:LEU:HD11	1:25:A:SER:H	4	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,386)	1:7:A:LEU:HD12	1:25:A:SER:H	4	0.15
(2,386)	1:7:A:LEU:HD13	1:25:A:SER:H	4	0.15
(2,386)	1:7:A:LEU:HD11	1:25:A:SER:H	5	0.15
(2,386)	1:7:A:LEU:HD12	1:25:A:SER:H	5	0.15
(2,386)	1:7:A:LEU:HD13	1:25:A:SER:H	5	0.15
(2,380)	1:24:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	1	0.15
(2,380)	1:24:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	3	0.15
(2,380)	1:24:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	4	0.15
(2,364)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HG3	1	0.15
(2,364)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HG3	10	0.15
(2,348)	1:10:A:GLN:HB2	1:12:A:LEU:H	3	0.15
(2,315)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB3	1	0.15
(2,315)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB3	2	0.15
(2,315)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB3	5	0.15
(2,315)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB3	7	0.15
(2,308)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	4	0.15
(2,308)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	6	0.15
(2,299)	1:8:A:TYR:H	1:8:A:TYR:HD1	1	0.15
(2,299)	1:8:A:TYR:H	1:8:A:TYR:HD2	1	0.15
(2,299)	1:8:A:TYR:H	1:8:A:TYR:HD1	2	0.15
(2,299)	1:8:A:TYR:H	1:8:A:TYR:HD2	2	0.15
(2,299)	1:8:A:TYR:H	1:8:A:TYR:HD1	3	0.15
(2,299)	1:8:A:TYR:H	1:8:A:TYR:HD2	3	0.15
(2,298)	1:11:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HE3	7	0.15
(2,285)	1:11:A:TRP:HE1	1:17:A:PRO:HA	10	0.15
(2,262)	1:11:A:TRP:HZ3	1:16:A:GLY:HA2	4	0.15
(2,262)	1:11:A:TRP:HZ3	1:16:A:GLY:HA2	10	0.15
(2,236)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	3	0.15
(2,236)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	3	0.15
(2,236)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	6	0.15
(2,236)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	6	0.15
(2,220)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HD1	8	0.15
(2,219)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HE22	3	0.15
(2,219)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HE22	3	0.15
(2,219)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HE22	3	0.15
(2,219)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HE22	8	0.15
(2,219)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HE22	8	0.15
(2,219)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HE22	8	0.15
(2,219)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HE22	9	0.15
(2,219)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HE22	9	0.15
(2,219)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HE22	9	0.15
(2,180)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD2	8	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,177)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HB2	6	0.15
(2,101)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HB2	4	0.15
(2,101)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HB3	4	0.15
(2,101)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HB2	6	0.15
(2,101)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HB3	6	0.15
(1,659)	1:10:A:GLN:HA	1:13:A:LYS:HG2	1	0.15
(1,659)	1:10:A:GLN:HA	1:13:A:LYS:HG2	8	0.15
(1,644)	1:15:A:GLY:HA2	1:16:A:GLY:H	4	0.15
(1,639)	1:14:A:ASP:HB2	1:16:A:GLY:H	6	0.15
(1,630)	1:11:A:TRP:HH2	1:11:A:TRP:HZ3	3	0.15
(1,630)	1:11:A:TRP:HH2	1:11:A:TRP:HZ3	6	0.15
(1,630)	1:11:A:TRP:HH2	1:11:A:TRP:HZ3	8	0.15
(1,601)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HB2	3	0.15
(1,601)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HB2	3	0.15
(1,601)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HB2	3	0.15
(1,568)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HA	2	0.15
(1,568)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HA	2	0.15
(1,568)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HA	2	0.15
(1,568)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HA	7	0.15
(1,568)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HA	7	0.15
(1,568)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HA	7	0.15
(1,568)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HA	9	0.15
(1,568)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HA	9	0.15
(1,568)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HA	9	0.15
(1,534)	1:7:A:LEU:HD11	1:25:A:SER:H	2	0.15
(1,534)	1:7:A:LEU:HD12	1:25:A:SER:H	2	0.15
(1,534)	1:7:A:LEU:HD13	1:25:A:SER:H	2	0.15
(1,534)	1:7:A:LEU:HD11	1:25:A:SER:H	4	0.15
(1,534)	1:7:A:LEU:HD12	1:25:A:SER:H	4	0.15
(1,534)	1:7:A:LEU:HD13	1:25:A:SER:H	4	0.15
(1,534)	1:7:A:LEU:HD11	1:25:A:SER:H	5	0.15
(1,534)	1:7:A:LEU:HD12	1:25:A:SER:H	5	0.15
(1,534)	1:7:A:LEU:HD13	1:25:A:SER:H	5	0.15
(1,525)	1:24:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	1	0.15
(1,525)	1:24:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	3	0.15
(1,525)	1:24:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	4	0.15
(1,505)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HG3	1	0.15
(1,505)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HG3	10	0.15
(1,480)	1:10:A:GLN:HB2	1:12:A:LEU:H	3	0.15
(1,426)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB3	1	0.15
(1,426)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB3	2	0.15
(1,426)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB3	5	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,426)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB3	7	0.15
(1,417)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	4	0.15
(1,417)	1:7:A:LEU:HA	1:10:A:GLN:HB2	6	0.15
(1,400)	1:8:A:TYR:H	1:8:A:TYR:HD1	1	0.15
(1,400)	1:8:A:TYR:H	1:8:A:TYR:HD2	1	0.15
(1,400)	1:8:A:TYR:H	1:8:A:TYR:HD1	2	0.15
(1,400)	1:8:A:TYR:H	1:8:A:TYR:HD2	2	0.15
(1,400)	1:8:A:TYR:H	1:8:A:TYR:HD1	3	0.15
(1,400)	1:8:A:TYR:H	1:8:A:TYR:HD2	3	0.15
(1,398)	1:11:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HE3	7	0.15
(1,383)	1:11:A:TRP:HE1	1:17:A:PRO:HA	10	0.15
(1,344)	1:11:A:TRP:HZ3	1:16:A:GLY:HA2	4	0.15
(1,344)	1:11:A:TRP:HZ3	1:16:A:GLY:HA2	10	0.15
(1,301)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	3	0.15
(1,301)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	3	0.15
(1,301)	1:8:A:TYR:HE1	1:24:A:PRO:HG3	6	0.15
(1,301)	1:8:A:TYR:HE2	1:24:A:PRO:HG3	6	0.15
(1,299)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HE1	8	0.15
(1,299)	1:5:A:VAL:HB	1:8:A:TYR:HE2	8	0.15
(1,297)	1:11:A:TRP:HD1	1:23:A:PRO:HA	1	0.15
(1,281)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD3	1	0.15
(1,275)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HD1	1	0.15
(1,275)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HD2	1	0.15
(1,275)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HD1	2	0.15
(1,275)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HD2	2	0.15
(1,275)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HD1	3	0.15
(1,275)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HD2	3	0.15
(1,275)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HD1	5	0.15
(1,275)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HD2	5	0.15
(1,275)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HD1	10	0.15
(1,275)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HD2	10	0.15
(1,271)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HD1	8	0.15
(1,270)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HE22	3	0.15
(1,270)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HE22	3	0.15
(1,270)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HE22	3	0.15
(1,270)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HE22	8	0.15
(1,270)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HE22	8	0.15
(1,270)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HE22	8	0.15
(1,270)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HE22	9	0.15
(1,270)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HE22	9	0.15
(1,270)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HE22	9	0.15
(1,264)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HE1	6	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,264)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HE1	7	0.15
(1,264)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HE1	8	0.15
(1,264)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HE1	9	0.15
(1,264)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HE1	10	0.15
(1,216)	1:22:A:PRO:HB2	1:22:A:PRO:HD2	8	0.15
(1,212)	1:22:A:PRO:HA	1:22:A:PRO:HB2	6	0.15
(1,186)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD2	5	0.15
(1,127)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HB2	4	0.15
(1,127)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HB3	4	0.15
(1,127)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HB2	6	0.15
(1,127)	1:13:A:LYS:HA	1:13:A:LYS:HB3	6	0.15
(1,36)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HD3	1	0.15
(3,193)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:H	10	0.14
(3,193)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:H	10	0.14
(3,193)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:H	10	0.14
(3,160)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HA	3	0.14
(3,160)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HA	3	0.14
(3,160)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HA	3	0.14
(3,74)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD2	8	0.14
(3,54)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HD1	6	0.14
(3,54)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HD2	6	0.14
(3,54)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HD1	7	0.14
(3,54)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HD2	7	0.14
(3,54)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HD1	9	0.14
(3,54)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HD2	9	0.14
(3,48)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HE1	1	0.14
(3,48)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HE1	2	0.14
(3,48)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HE1	3	0.14
(3,48)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HE1	4	0.14
(3,48)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HE1	5	0.14
(3,5)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HD3	6	0.14
(2,470)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HD2	1	0.14
(2,470)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HD2	1	0.14
(2,470)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HD2	1	0.14
(2,470)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HD3	1	0.14
(2,470)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HD3	1	0.14
(2,470)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HD3	1	0.14
(2,470)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HD2	2	0.14
(2,470)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HD2	2	0.14
(2,470)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HD2	2	0.14
(2,470)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HD3	2	0.14
(2,470)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HD3	2	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,470)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HD3	2	0.14
(2,470)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HD2	5	0.14
(2,470)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HD2	5	0.14
(2,470)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HD2	5	0.14
(2,470)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HD3	5	0.14
(2,470)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HD3	5	0.14
(2,470)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HD3	5	0.14
(2,470)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HD2	9	0.14
(2,470)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HD2	9	0.14
(2,470)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HD2	9	0.14
(2,470)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HD3	9	0.14
(2,470)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HD3	9	0.14
(2,470)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HD3	9	0.14
(2,470)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HD2	10	0.14
(2,470)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HD2	10	0.14
(2,470)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HD2	10	0.14
(2,470)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HD3	10	0.14
(2,470)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HD3	10	0.14
(2,470)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HD3	10	0.14
(2,461)	1:10:A:GLN:HA	1:13:A:LYS:HG2	7	0.14
(2,453)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:H	3	0.14
(2,450)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:H	7	0.14
(2,450)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:H	9	0.14
(2,381)	1:5:A:VAL:H	1:6:A:ARG:HB2	8	0.14
(2,381)	1:5:A:VAL:H	1:6:A:ARG:HB2	10	0.14
(2,376)	1:14:A:ASP:HB2	1:15:A:GLY:H	8	0.14
(2,368)	1:13:A:LYS:HB2	1:14:A:ASP:H	9	0.14
(2,368)	1:13:A:LYS:HB3	1:14:A:ASP:H	9	0.14
(2,348)	1:10:A:GLN:HB2	1:12:A:LEU:H	6	0.14
(2,315)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB3	3	0.14
(2,315)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB3	4	0.14
(2,315)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB3	6	0.14
(2,299)	1:8:A:TYR:H	1:8:A:TYR:HD1	6	0.14
(2,299)	1:8:A:TYR:H	1:8:A:TYR:HD2	6	0.14
(2,299)	1:8:A:TYR:H	1:8:A:TYR:HD1	7	0.14
(2,299)	1:8:A:TYR:H	1:8:A:TYR:HD2	7	0.14
(2,288)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:H	2	0.14
(2,285)	1:11:A:TRP:HE1	1:17:A:PRO:HA	6	0.14
(2,262)	1:11:A:TRP:HZ3	1:16:A:GLY:HA2	2	0.14
(2,219)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HE22	5	0.14
(2,219)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HE22	5	0.14
(2,219)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HE22	5	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,219)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HE22	7	0.14
(2,219)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HE22	7	0.14
(2,219)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HE22	7	0.14
(2,171)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HG3	3	0.14
(2,88)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HG	8	0.14
(2,69)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HG3	5	0.14
(2,68)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HB3	7	0.14
(2,18)	1:5:A:VAL:HA	1:6:A:ARG:H	10	0.14
(1,674)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HD2	1	0.14
(1,674)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HD2	1	0.14
(1,674)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HD2	1	0.14
(1,674)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HD3	1	0.14
(1,674)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HD3	1	0.14
(1,674)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HD3	1	0.14
(1,674)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HD2	2	0.14
(1,674)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HD2	2	0.14
(1,674)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HD2	2	0.14
(1,674)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HD3	2	0.14
(1,674)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HD3	2	0.14
(1,674)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HD3	2	0.14
(1,674)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HD2	5	0.14
(1,674)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HD2	5	0.14
(1,674)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HD2	5	0.14
(1,674)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HD3	5	0.14
(1,674)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HD3	5	0.14
(1,674)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HD3	5	0.14
(1,674)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HD2	9	0.14
(1,674)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HD2	9	0.14
(1,674)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HD2	9	0.14
(1,674)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HD3	9	0.14
(1,674)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HD3	9	0.14
(1,674)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HD3	9	0.14
(1,674)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HD2	10	0.14
(1,674)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HD2	10	0.14
(1,674)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HD2	10	0.14
(1,674)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HD3	10	0.14
(1,674)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HD3	10	0.14
(1,674)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HD3	10	0.14
(1,659)	1:10:A:GLN:HA	1:13:A:LYS:HG2	7	0.14
(1,648)	1:2:A:GLU:HG3	1:5:A:VAL:H	3	0.14
(1,645)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:H	7	0.14
(1,645)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:H	9	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,633)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:H	10	0.14
(1,633)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:H	10	0.14
(1,633)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:H	10	0.14
(1,568)	1:7:A:LEU:HD11	1:24:A:PRO:HA	3	0.14
(1,568)	1:7:A:LEU:HD12	1:24:A:PRO:HA	3	0.14
(1,568)	1:7:A:LEU:HD13	1:24:A:PRO:HA	3	0.14
(1,526)	1:5:A:VAL:H	1:6:A:ARG:HB2	8	0.14
(1,526)	1:5:A:VAL:H	1:6:A:ARG:HB2	10	0.14
(1,521)	1:14:A:ASP:HB2	1:15:A:GLY:H	8	0.14
(1,511)	1:13:A:LYS:HB2	1:14:A:ASP:H	9	0.14
(1,511)	1:13:A:LYS:HB3	1:14:A:ASP:H	9	0.14
(1,480)	1:10:A:GLN:HB2	1:12:A:LEU:H	6	0.14
(1,426)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB3	3	0.14
(1,426)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB3	4	0.14
(1,426)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB3	6	0.14
(1,400)	1:8:A:TYR:H	1:8:A:TYR:HD1	6	0.14
(1,400)	1:8:A:TYR:H	1:8:A:TYR:HD2	6	0.14
(1,400)	1:8:A:TYR:H	1:8:A:TYR:HD1	7	0.14
(1,400)	1:8:A:TYR:H	1:8:A:TYR:HD2	7	0.14
(1,386)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:H	2	0.14
(1,383)	1:11:A:TRP:HE1	1:17:A:PRO:HA	6	0.14
(1,344)	1:11:A:TRP:HZ3	1:16:A:GLY:HA2	2	0.14
(1,329)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD2	8	0.14
(1,275)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HD1	6	0.14
(1,275)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HD2	6	0.14
(1,275)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HD1	7	0.14
(1,275)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HD2	7	0.14
(1,275)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HD1	9	0.14
(1,275)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HD2	9	0.14
(1,270)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HE22	5	0.14
(1,270)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HE22	5	0.14
(1,270)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HE22	5	0.14
(1,270)	1:9:A:ILE:HD11	1:10:A:GLN:HE22	7	0.14
(1,270)	1:9:A:ILE:HD12	1:10:A:GLN:HE22	7	0.14
(1,270)	1:9:A:ILE:HD13	1:10:A:GLN:HE22	7	0.14
(1,264)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HE1	1	0.14
(1,264)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HE1	2	0.14
(1,264)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HE1	3	0.14
(1,264)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HE1	4	0.14
(1,264)	1:11:A:TRP:HD1	1:11:A:TRP:HE1	5	0.14
(1,205)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HG3	3	0.14
(1,107)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HG	8	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,85)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HG3	5	0.14
(1,84)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HB3	7	0.14
(1,36)	1:6:A:ARG:H	1:6:A:ARG:HD3	6	0.14
(1,22)	1:5:A:VAL:HA	1:6:A:ARG:H	10	0.14
(3,115)	1:22:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	7	0.13
(3,106)	1:13:A:LYS:HB2	1:14:A:ASP:HA	4	0.13
(3,106)	1:13:A:LYS:HB3	1:14:A:ASP:HA	4	0.13
(3,59)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD3	8	0.13
(3,35)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD2	6	0.13
(2,461)	1:10:A:GLN:HA	1:13:A:LYS:HG2	5	0.13
(2,440)	1:11:A:TRP:HH2	1:11:A:TRP:HZ3	1	0.13
(2,440)	1:11:A:TRP:HH2	1:11:A:TRP:HZ3	2	0.13
(2,440)	1:11:A:TRP:HH2	1:11:A:TRP:HZ3	4	0.13
(2,440)	1:11:A:TRP:HH2	1:11:A:TRP:HZ3	9	0.13
(2,440)	1:11:A:TRP:HH2	1:11:A:TRP:HZ3	10	0.13
(2,422)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HB2	10	0.13
(2,422)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HB2	10	0.13
(2,422)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HB2	10	0.13
(2,419)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG11	6	0.13
(2,419)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG12	6	0.13
(2,419)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG13	6	0.13
(2,419)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG11	8	0.13
(2,419)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG12	8	0.13
(2,419)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG13	8	0.13
(2,386)	1:7:A:LEU:HD11	1:25:A:SER:H	3	0.13
(2,386)	1:7:A:LEU:HD12	1:25:A:SER:H	3	0.13
(2,386)	1:7:A:LEU:HD13	1:25:A:SER:H	3	0.13
(2,386)	1:7:A:LEU:HD11	1:25:A:SER:H	7	0.13
(2,386)	1:7:A:LEU:HD12	1:25:A:SER:H	7	0.13
(2,386)	1:7:A:LEU:HD13	1:25:A:SER:H	7	0.13
(2,386)	1:7:A:LEU:HD11	1:25:A:SER:H	10	0.13
(2,386)	1:7:A:LEU:HD12	1:25:A:SER:H	10	0.13
(2,386)	1:7:A:LEU:HD13	1:25:A:SER:H	10	0.13
(2,383)	1:23:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	6	0.13
(2,383)	1:23:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	9	0.13
(2,382)	1:24:A:PRO:HG2	1:25:A:SER:H	6	0.13
(2,373)	1:13:A:LYS:HA	1:15:A:GLY:H	10	0.13
(2,368)	1:13:A:LYS:HB2	1:14:A:ASP:H	7	0.13
(2,368)	1:13:A:LYS:HB3	1:14:A:ASP:H	7	0.13
(2,366)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HD2	8	0.13
(2,366)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HD3	8	0.13
(2,364)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HG3	3	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,364)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HG3	5	0.13
(2,324)	1:21:A:ARG:HG2	1:22:A:PRO:HD2	7	0.13
(2,324)	1:21:A:ARG:HG2	1:22:A:PRO:HD2	9	0.13
(2,320)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HD3	6	0.13
(2,253)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HA	9	0.13
(2,69)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HG3	1	0.13
(2,56)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:H	1	0.13
(2,56)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:H	2	0.13
(2,56)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:H	4	0.13
(2,56)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:H	5	0.13
(2,18)	1:5:A:VAL:HA	1:6:A:ARG:H	8	0.13
(1,659)	1:10:A:GLN:HA	1:13:A:LYS:HG2	5	0.13
(1,630)	1:11:A:TRP:HH2	1:11:A:TRP:HZ3	1	0.13
(1,630)	1:11:A:TRP:HH2	1:11:A:TRP:HZ3	2	0.13
(1,630)	1:11:A:TRP:HH2	1:11:A:TRP:HZ3	4	0.13
(1,630)	1:11:A:TRP:HH2	1:11:A:TRP:HZ3	9	0.13
(1,630)	1:11:A:TRP:HH2	1:11:A:TRP:HZ3	10	0.13
(1,601)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HB2	10	0.13
(1,601)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HB2	10	0.13
(1,601)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HB2	10	0.13
(1,595)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG11	6	0.13
(1,595)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG12	6	0.13
(1,595)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG13	6	0.13
(1,595)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG11	8	0.13
(1,595)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG12	8	0.13
(1,595)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG13	8	0.13
(1,534)	1:7:A:LEU:HD11	1:25:A:SER:H	3	0.13
(1,534)	1:7:A:LEU:HD12	1:25:A:SER:H	3	0.13
(1,534)	1:7:A:LEU:HD13	1:25:A:SER:H	3	0.13
(1,534)	1:7:A:LEU:HD11	1:25:A:SER:H	7	0.13
(1,534)	1:7:A:LEU:HD12	1:25:A:SER:H	7	0.13
(1,534)	1:7:A:LEU:HD13	1:25:A:SER:H	7	0.13
(1,534)	1:7:A:LEU:HD11	1:25:A:SER:H	10	0.13
(1,534)	1:7:A:LEU:HD12	1:25:A:SER:H	10	0.13
(1,534)	1:7:A:LEU:HD13	1:25:A:SER:H	10	0.13
(1,530)	1:23:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	6	0.13
(1,530)	1:23:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	9	0.13
(1,528)	1:24:A:PRO:HG2	1:25:A:SER:H	6	0.13
(1,518)	1:13:A:LYS:HA	1:15:A:GLY:H	10	0.13
(1,511)	1:13:A:LYS:HB2	1:14:A:ASP:H	7	0.13
(1,511)	1:13:A:LYS:HB3	1:14:A:ASP:H	7	0.13
(1,508)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HD2	8	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,508)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HD3	8	0.13
(1,505)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HG3	3	0.13
(1,505)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HG3	5	0.13
(1,441)	1:22:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	7	0.13
(1,436)	1:21:A:ARG:HG2	1:22:A:PRO:HD2	7	0.13
(1,436)	1:21:A:ARG:HG2	1:22:A:PRO:HD2	9	0.13
(1,432)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HD3	6	0.13
(1,407)	1:13:A:LYS:HB2	1:14:A:ASP:HA	4	0.13
(1,407)	1:13:A:LYS:HB3	1:14:A:ASP:HA	4	0.13
(1,325)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HA	9	0.13
(1,281)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD3	8	0.13
(1,206)	1:21:A:ARG:HA	1:22:A:PRO:HD2	6	0.13
(1,85)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HG3	1	0.13
(1,70)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:H	1	0.13
(1,70)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:H	2	0.13
(1,70)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:H	4	0.13
(1,70)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:H	5	0.13
(1,22)	1:5:A:VAL:HA	1:6:A:ARG:H	8	0.13
(3,180)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG3	6	0.12
(3,180)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG3	6	0.12
(3,180)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG3	6	0.12
(3,153)	1:23:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG2	2	0.12
(3,129)	1:12:A:LEU:HG	1:16:A:GLY:H	3	0.12
(3,122)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:H	1	0.12
(3,122)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:H	4	0.12
(3,115)	1:22:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	8	0.12
(3,59)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD3	4	0.12
(3,56)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HA	9	0.12
(3,56)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HA	9	0.12
(3,33)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD2	2	0.12
(2,470)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HD2	7	0.12
(2,470)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HD2	7	0.12
(2,470)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HD2	7	0.12
(2,470)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HD3	7	0.12
(2,470)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HD3	7	0.12
(2,470)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HD3	7	0.12
(2,461)	1:10:A:GLN:HA	1:13:A:LYS:HG2	3	0.12
(2,449)	1:15:A:GLY:HA2	1:16:A:GLY:H	8	0.12
(2,440)	1:11:A:TRP:HH2	1:11:A:TRP:HZ3	7	0.12
(2,436)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HE3	7	0.12
(2,436)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HE3	7	0.12
(2,434)	1:14:A:ASP:H	1:16:A:GLY:H	5	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,422)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HB2	8	0.12
(2,422)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HB2	8	0.12
(2,422)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HB2	8	0.12
(2,419)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG11	9	0.12
(2,419)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG12	9	0.12
(2,419)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG13	9	0.12
(2,395)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:HB2	8	0.12
(2,395)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:HB3	8	0.12
(2,386)	1:7:A:LEU:HD11	1:25:A:SER:H	1	0.12
(2,386)	1:7:A:LEU:HD12	1:25:A:SER:H	1	0.12
(2,386)	1:7:A:LEU:HD13	1:25:A:SER:H	1	0.12
(2,383)	1:23:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	2	0.12
(2,382)	1:24:A:PRO:HG2	1:25:A:SER:H	1	0.12
(2,380)	1:24:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	8	0.12
(2,368)	1:13:A:LYS:HB2	1:14:A:ASP:H	10	0.12
(2,368)	1:13:A:LYS:HB3	1:14:A:ASP:H	10	0.12
(2,366)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HD2	3	0.12
(2,366)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HD3	3	0.12
(2,364)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HG3	8	0.12
(2,361)	1:5:A:VAL:HG21	1:10:A:GLN:H	10	0.12
(2,361)	1:5:A:VAL:HG22	1:10:A:GLN:H	10	0.12
(2,361)	1:5:A:VAL:HG23	1:10:A:GLN:H	10	0.12
(2,331)	1:12:A:LEU:HA	1:16:A:GLY:H	3	0.12
(2,325)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HD2	10	0.12
(2,324)	1:21:A:ARG:HG2	1:22:A:PRO:HD2	3	0.12
(2,311)	1:1:A:GLU:HG2	1:3:A:GLU:HA	4	0.12
(2,311)	1:1:A:GLU:HG3	1:3:A:GLU:HA	4	0.12
(2,299)	1:8:A:TYR:H	1:8:A:TYR:HD1	4	0.12
(2,299)	1:8:A:TYR:H	1:8:A:TYR:HD2	4	0.12
(2,298)	1:11:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HE3	9	0.12
(2,220)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HD1	9	0.12
(2,68)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HB3	3	0.12
(2,56)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:H	3	0.12
(2,56)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:H	6	0.12
(2,56)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:H	7	0.12
(2,30)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HD3	3	0.12
(2,18)	1:5:A:VAL:HA	1:6:A:ARG:H	3	0.12
(1,674)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HD2	7	0.12
(1,674)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HD2	7	0.12
(1,674)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HD2	7	0.12
(1,674)	1:9:A:ILE:HG21	1:13:A:LYS:HD3	7	0.12
(1,674)	1:9:A:ILE:HG22	1:13:A:LYS:HD3	7	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,674)	1:9:A:ILE:HG23	1:13:A:LYS:HD3	7	0.12
(1,659)	1:10:A:GLN:HA	1:13:A:LYS:HG2	3	0.12
(1,644)	1:15:A:GLY:HA2	1:16:A:GLY:H	8	0.12
(1,630)	1:11:A:TRP:HH2	1:11:A:TRP:HZ3	7	0.12
(1,626)	1:8:A:TYR:HE1	1:11:A:TRP:HE3	7	0.12
(1,626)	1:8:A:TYR:HE2	1:11:A:TRP:HE3	7	0.12
(1,624)	1:14:A:ASP:H	1:16:A:GLY:H	5	0.12
(1,602)	1:12:A:LEU:HD21	1:17:A:PRO:HG3	6	0.12
(1,602)	1:12:A:LEU:HD22	1:17:A:PRO:HG3	6	0.12
(1,602)	1:12:A:LEU:HD23	1:17:A:PRO:HG3	6	0.12
(1,601)	1:7:A:LEU:HD21	1:24:A:PRO:HB2	8	0.12
(1,601)	1:7:A:LEU:HD22	1:24:A:PRO:HB2	8	0.12
(1,601)	1:7:A:LEU:HD23	1:24:A:PRO:HB2	8	0.12
(1,595)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG11	9	0.12
(1,595)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG12	9	0.12
(1,595)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG13	9	0.12
(1,548)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:HB2	8	0.12
(1,548)	1:10:A:GLN:HG3	1:13:A:LYS:HB3	8	0.12
(1,546)	1:23:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG2	2	0.12
(1,534)	1:7:A:LEU:HD11	1:25:A:SER:H	1	0.12
(1,534)	1:7:A:LEU:HD12	1:25:A:SER:H	1	0.12
(1,534)	1:7:A:LEU:HD13	1:25:A:SER:H	1	0.12
(1,530)	1:23:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	2	0.12
(1,528)	1:24:A:PRO:HG2	1:25:A:SER:H	1	0.12
(1,525)	1:24:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	8	0.12
(1,511)	1:13:A:LYS:HB2	1:14:A:ASP:H	10	0.12
(1,511)	1:13:A:LYS:HB3	1:14:A:ASP:H	10	0.12
(1,508)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HD2	3	0.12
(1,508)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HD3	3	0.12
(1,505)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HG3	8	0.12
(1,500)	1:5:A:VAL:HG21	1:10:A:GLN:H	10	0.12
(1,500)	1:5:A:VAL:HG22	1:10:A:GLN:H	10	0.12
(1,500)	1:5:A:VAL:HG23	1:10:A:GLN:H	10	0.12
(1,470)	1:12:A:LEU:HG	1:16:A:GLY:H	3	0.12
(1,455)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:H	1	0.12
(1,455)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:H	4	0.12
(1,452)	1:12:A:LEU:HA	1:16:A:GLY:H	3	0.12
(1,441)	1:22:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD2	8	0.12
(1,437)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HD2	10	0.12
(1,436)	1:21:A:ARG:HG2	1:22:A:PRO:HD2	3	0.12
(1,421)	1:1:A:GLU:HG2	1:3:A:GLU:HA	4	0.12
(1,421)	1:1:A:GLU:HG3	1:3:A:GLU:HA	4	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,400)	1:8:A:TYR:H	1:8:A:TYR:HD1	4	0.12
(1,400)	1:8:A:TYR:H	1:8:A:TYR:HD2	4	0.12
(1,398)	1:11:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HE3	9	0.12
(1,281)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD3	4	0.12
(1,278)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HA	9	0.12
(1,278)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HA	9	0.12
(1,271)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HD1	9	0.12
(1,186)	1:21:A:ARG:HA	1:21:A:ARG:HD2	2	0.12
(1,84)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HB3	3	0.12
(1,70)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:H	3	0.12
(1,70)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:H	6	0.12
(1,70)	1:8:A:TYR:HA	1:9:A:ILE:H	7	0.12
(1,34)	1:6:A:ARG:HA	1:6:A:ARG:HD3	3	0.12
(1,22)	1:5:A:VAL:HA	1:6:A:ARG:H	3	0.12
(3,206)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HG2	8	0.11
(3,206)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HG2	8	0.11
(3,206)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HG2	8	0.11
(3,206)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HG3	8	0.11
(3,206)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HG3	8	0.11
(3,206)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HG3	8	0.11
(3,154)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HB2	6	0.11
(3,129)	1:12:A:LEU:HG	1:16:A:GLY:H	5	0.11
(3,122)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:H	2	0.11
(3,122)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:H	5	0.11
(3,59)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD3	7	0.11
(3,59)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD3	10	0.11
(3,56)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HA	7	0.11
(3,56)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HA	7	0.11
(3,10)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD11	3	0.11
(3,10)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD12	3	0.11
(3,10)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD13	3	0.11
(2,461)	1:10:A:GLN:HA	1:13:A:LYS:HG2	2	0.11
(2,450)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:H	10	0.11
(2,440)	1:11:A:TRP:HH2	1:11:A:TRP:HZ3	5	0.11
(2,428)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HB2	7	0.11
(2,428)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HB2	7	0.11
(2,428)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HB2	7	0.11
(2,419)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG11	1	0.11
(2,419)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG12	1	0.11
(2,419)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG13	1	0.11
(2,419)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG11	7	0.11
(2,419)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG12	7	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,419)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG13	7	0.11
(2,383)	1:23:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	4	0.11
(2,383)	1:23:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	5	0.11
(2,383)	1:23:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	8	0.11
(2,381)	1:5:A:VAL:H	1:6:A:ARG:HB2	3	0.11
(2,373)	1:13:A:LYS:HA	1:15:A:GLY:H	2	0.11
(2,373)	1:13:A:LYS:HA	1:15:A:GLY:H	5	0.11
(2,366)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HD2	2	0.11
(2,366)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HD3	2	0.11
(2,366)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HD2	5	0.11
(2,366)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HD3	5	0.11
(2,366)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HD2	7	0.11
(2,366)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HD3	7	0.11
(2,364)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HG3	2	0.11
(2,364)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HG3	7	0.11
(2,353)	1:19:A:SER:HA	1:21:A:ARG:H	7	0.11
(2,347)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:H	10	0.11
(2,347)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:H	10	0.11
(2,347)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:H	10	0.11
(2,331)	1:12:A:LEU:HA	1:16:A:GLY:H	6	0.11
(2,325)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HD2	9	0.11
(2,324)	1:21:A:ARG:HG2	1:22:A:PRO:HD2	8	0.11
(2,315)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB3	8	0.11
(2,315)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB3	10	0.11
(2,311)	1:1:A:GLU:HG2	1:3:A:GLU:HA	3	0.11
(2,311)	1:1:A:GLU:HG3	1:3:A:GLU:HA	3	0.11
(2,311)	1:1:A:GLU:HG2	1:3:A:GLU:HA	6	0.11
(2,311)	1:1:A:GLU:HG3	1:3:A:GLU:HA	6	0.11
(2,299)	1:8:A:TYR:H	1:8:A:TYR:HD1	9	0.11
(2,299)	1:8:A:TYR:H	1:8:A:TYR:HD2	9	0.11
(2,288)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:H	3	0.11
(2,288)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:H	4	0.11
(2,287)	1:11:A:TRP:HE1	1:11:A:TRP:HZ2	6	0.11
(2,287)	1:11:A:TRP:HE1	1:11:A:TRP:HZ2	7	0.11
(2,287)	1:11:A:TRP:HE1	1:11:A:TRP:HZ2	8	0.11
(2,287)	1:11:A:TRP:HE1	1:11:A:TRP:HZ2	9	0.11
(2,285)	1:11:A:TRP:HE1	1:17:A:PRO:HA	2	0.11
(2,285)	1:11:A:TRP:HE1	1:17:A:PRO:HA	4	0.11
(2,253)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HA	7	0.11
(2,220)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HD1	7	0.11
(2,193)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HB2	3	0.11
(2,193)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HB2	7	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,193)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HB2	8	0.11
(2,193)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HB2	10	0.11
(2,171)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HG3	1	0.11
(2,171)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HG3	4	0.11
(2,118)	1:14:A:ASP:H	1:14:A:ASP:HB3	3	0.11
(2,97)	1:12:A:LEU:HD11	1:12:A:LEU:HD21	3	0.11
(2,97)	1:12:A:LEU:HD11	1:12:A:LEU:HD22	3	0.11
(2,97)	1:12:A:LEU:HD11	1:12:A:LEU:HD23	3	0.11
(2,97)	1:12:A:LEU:HD12	1:12:A:LEU:HD21	3	0.11
(2,97)	1:12:A:LEU:HD12	1:12:A:LEU:HD22	3	0.11
(2,97)	1:12:A:LEU:HD12	1:12:A:LEU:HD23	3	0.11
(2,97)	1:12:A:LEU:HD13	1:12:A:LEU:HD21	3	0.11
(2,97)	1:12:A:LEU:HD13	1:12:A:LEU:HD22	3	0.11
(2,97)	1:12:A:LEU:HD13	1:12:A:LEU:HD23	3	0.11
(2,88)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HG	7	0.11
(2,69)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HG3	2	0.11
(2,68)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HB3	1	0.11
(2,68)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HB3	2	0.11
(2,68)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HB3	5	0.11
(2,36)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HA	1	0.11
(2,36)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HA	2	0.11
(2,36)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HA	4	0.11
(2,36)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HA	5	0.11
(2,36)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HA	6	0.11
(2,36)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HA	7	0.11
(2,36)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HA	8	0.11
(2,36)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HA	9	0.11
(2,36)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HA	10	0.11
(2,23)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HD2	8	0.11
(2,23)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HD2	8	0.11
(2,23)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HD2	10	0.11
(2,23)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HD2	10	0.11
(1,676)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HG2	8	0.11
(1,676)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HG2	8	0.11
(1,676)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HG2	8	0.11
(1,676)	1:12:A:LEU:HD11	1:17:A:PRO:HG3	8	0.11
(1,676)	1:12:A:LEU:HD12	1:17:A:PRO:HG3	8	0.11
(1,676)	1:12:A:LEU:HD13	1:17:A:PRO:HG3	8	0.11
(1,659)	1:10:A:GLN:HA	1:13:A:LYS:HG2	2	0.11
(1,645)	1:8:A:TYR:HA	1:11:A:TRP:H	10	0.11
(1,630)	1:11:A:TRP:HH2	1:11:A:TRP:HZ3	5	0.11
(1,613)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HB2	7	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,613)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HB2	7	0.11
(1,613)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HB2	7	0.11
(1,595)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG11	1	0.11
(1,595)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG12	1	0.11
(1,595)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG13	1	0.11
(1,595)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG11	7	0.11
(1,595)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG12	7	0.11
(1,595)	1:2:A:GLU:HG2	1:5:A:VAL:HG13	7	0.11
(1,550)	1:21:A:ARG:HG3	1:22:A:PRO:HB2	6	0.11
(1,530)	1:23:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	4	0.11
(1,530)	1:23:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	5	0.11
(1,530)	1:23:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	8	0.11
(1,526)	1:5:A:VAL:H	1:6:A:ARG:HB2	3	0.11
(1,518)	1:13:A:LYS:HA	1:15:A:GLY:H	2	0.11
(1,518)	1:13:A:LYS:HA	1:15:A:GLY:H	5	0.11
(1,508)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HD2	2	0.11
(1,508)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HD3	2	0.11
(1,508)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HD2	5	0.11
(1,508)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HD3	5	0.11
(1,508)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HD2	7	0.11
(1,508)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HD3	7	0.11
(1,505)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HG3	2	0.11
(1,505)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HG3	7	0.11
(1,486)	1:19:A:SER:HA	1:21:A:ARG:H	7	0.11
(1,478)	1:12:A:LEU:HD21	1:16:A:GLY:H	10	0.11
(1,478)	1:12:A:LEU:HD22	1:16:A:GLY:H	10	0.11
(1,478)	1:12:A:LEU:HD23	1:16:A:GLY:H	10	0.11
(1,470)	1:12:A:LEU:HG	1:16:A:GLY:H	5	0.11
(1,455)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:H	2	0.11
(1,455)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:H	5	0.11
(1,452)	1:12:A:LEU:HA	1:16:A:GLY:H	6	0.11
(1,437)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HD2	9	0.11
(1,436)	1:21:A:ARG:HG2	1:22:A:PRO:HD2	8	0.11
(1,426)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB3	8	0.11
(1,426)	1:5:A:VAL:HA	1:8:A:TYR:HB3	10	0.11
(1,421)	1:1:A:GLU:HG2	1:3:A:GLU:HA	3	0.11
(1,421)	1:1:A:GLU:HG3	1:3:A:GLU:HA	3	0.11
(1,421)	1:1:A:GLU:HG2	1:3:A:GLU:HA	6	0.11
(1,421)	1:1:A:GLU:HG3	1:3:A:GLU:HA	6	0.11
(1,400)	1:8:A:TYR:H	1:8:A:TYR:HD1	9	0.11
(1,400)	1:8:A:TYR:H	1:8:A:TYR:HD2	9	0.11
(1,386)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:H	3	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,386)	1:11:A:TRP:HE1	1:21:A:ARG:H	4	0.11
(1,385)	1:11:A:TRP:HE1	1:11:A:TRP:HZ2	6	0.11
(1,385)	1:11:A:TRP:HE1	1:11:A:TRP:HZ2	7	0.11
(1,385)	1:11:A:TRP:HE1	1:11:A:TRP:HZ2	8	0.11
(1,385)	1:11:A:TRP:HE1	1:11:A:TRP:HZ2	9	0.11
(1,383)	1:11:A:TRP:HE1	1:17:A:PRO:HA	2	0.11
(1,383)	1:11:A:TRP:HE1	1:17:A:PRO:HA	4	0.11
(1,325)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HA	7	0.11
(1,281)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD3	7	0.11
(1,281)	1:23:A:PRO:HB3	1:23:A:PRO:HD3	10	0.11
(1,278)	1:8:A:TYR:HD1	1:9:A:ILE:HA	7	0.11
(1,278)	1:8:A:TYR:HD2	1:9:A:ILE:HA	7	0.11
(1,271)	1:11:A:TRP:HA	1:11:A:TRP:HD1	7	0.11
(1,231)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HB2	3	0.11
(1,231)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HB2	7	0.11
(1,231)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HB2	8	0.11
(1,231)	1:24:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HB2	10	0.11
(1,205)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HG3	1	0.11
(1,205)	1:21:A:ARG:H	1:21:A:ARG:HG3	4	0.11
(1,149)	1:14:A:ASP:H	1:14:A:ASP:HB3	3	0.11
(1,119)	1:12:A:LEU:HD11	1:12:A:LEU:HD21	3	0.11
(1,119)	1:12:A:LEU:HD11	1:12:A:LEU:HD22	3	0.11
(1,119)	1:12:A:LEU:HD11	1:12:A:LEU:HD23	3	0.11
(1,119)	1:12:A:LEU:HD12	1:12:A:LEU:HD21	3	0.11
(1,119)	1:12:A:LEU:HD12	1:12:A:LEU:HD22	3	0.11
(1,119)	1:12:A:LEU:HD12	1:12:A:LEU:HD23	3	0.11
(1,119)	1:12:A:LEU:HD13	1:12:A:LEU:HD21	3	0.11
(1,119)	1:12:A:LEU:HD13	1:12:A:LEU:HD22	3	0.11
(1,119)	1:12:A:LEU:HD13	1:12:A:LEU:HD23	3	0.11
(1,107)	1:12:A:LEU:HA	1:12:A:LEU:HG	7	0.11
(1,85)	1:10:A:GLN:HE21	1:10:A:GLN:HG3	2	0.11
(1,84)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HB3	1	0.11
(1,84)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HB3	2	0.11
(1,84)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HB3	5	0.11
(1,51)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD11	3	0.11
(1,51)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD12	3	0.11
(1,51)	1:7:A:LEU:HB2	1:7:A:LEU:HD13	3	0.11
(1,41)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HA	1	0.11
(1,41)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HA	2	0.11
(1,41)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HA	4	0.11
(1,41)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HA	5	0.11
(1,41)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HA	6	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,41)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HA	7	0.11
(1,41)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HA	8	0.11
(1,41)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HA	9	0.11
(1,41)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HA	10	0.11
(1,27)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HD2	8	0.11
(1,27)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HD2	8	0.11
(1,27)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HD2	10	0.11
(1,27)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HD2	10	0.11
(3,193)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:H	7	0.1
(3,193)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:H	7	0.1
(3,193)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:H	7	0.1
(3,153)	1:23:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG2	5	0.1
(3,153)	1:23:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG2	9	0.1
(3,122)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:H	6	0.1
(3,74)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD2	1	0.1
(2,428)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HB2	5	0.1
(2,428)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HB2	5	0.1
(2,428)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HB2	5	0.1
(2,399)	1:10:A:GLN:HB3	1:13:A:LYS:HD2	5	0.1
(2,399)	1:10:A:GLN:HB3	1:13:A:LYS:HD3	5	0.1
(2,399)	1:10:A:GLN:HB3	1:13:A:LYS:HD2	10	0.1
(2,399)	1:10:A:GLN:HB3	1:13:A:LYS:HD3	10	0.1
(2,383)	1:23:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	10	0.1
(2,373)	1:13:A:LYS:HA	1:15:A:GLY:H	4	0.1
(2,366)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HD2	1	0.1
(2,366)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HD3	1	0.1
(2,353)	1:19:A:SER:HA	1:21:A:ARG:H	8	0.1
(2,345)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:H	9	0.1
(2,345)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:H	9	0.1
(2,345)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:H	9	0.1
(2,332)	1:15:A:GLY:HA3	1:16:A:GLY:H	7	0.1
(2,325)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HD2	2	0.1
(2,325)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HD2	7	0.1
(2,317)	1:14:A:ASP:HB3	1:19:A:SER:HB2	8	0.1
(2,311)	1:1:A:GLU:HG2	1:3:A:GLU:HA	5	0.1
(2,311)	1:1:A:GLU:HG3	1:3:A:GLU:HA	5	0.1
(2,287)	1:11:A:TRP:HE1	1:11:A:TRP:HZ2	10	0.1
(2,284)	1:11:A:TRP:HE1	1:19:A:SER:HB2	2	0.1
(2,238)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG3	7	0.1
(2,238)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG3	7	0.1
(2,90)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HG	4	0.1
(2,68)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HB3	8	0.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(2,36)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HA	3	0.1
(2,23)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HD2	3	0.1
(2,23)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HD2	3	0.1
(1,633)	1:12:A:LEU:HD11	1:16:A:GLY:H	7	0.1
(1,633)	1:12:A:LEU:HD12	1:16:A:GLY:H	7	0.1
(1,633)	1:12:A:LEU:HD13	1:16:A:GLY:H	7	0.1
(1,613)	1:5:A:VAL:HG11	1:6:A:ARG:HB2	5	0.1
(1,613)	1:5:A:VAL:HG12	1:6:A:ARG:HB2	5	0.1
(1,613)	1:5:A:VAL:HG13	1:6:A:ARG:HB2	5	0.1
(1,553)	1:10:A:GLN:HB3	1:13:A:LYS:HD2	5	0.1
(1,553)	1:10:A:GLN:HB3	1:13:A:LYS:HD3	5	0.1
(1,553)	1:10:A:GLN:HB3	1:13:A:LYS:HD2	10	0.1
(1,553)	1:10:A:GLN:HB3	1:13:A:LYS:HD3	10	0.1
(1,546)	1:23:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG2	5	0.1
(1,546)	1:23:A:PRO:HA	1:24:A:PRO:HG2	9	0.1
(1,530)	1:23:A:PRO:HB3	1:25:A:SER:H	10	0.1
(1,518)	1:13:A:LYS:HA	1:15:A:GLY:H	4	0.1
(1,508)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HD2	1	0.1
(1,508)	1:10:A:GLN:H	1:13:A:LYS:HD3	1	0.1
(1,486)	1:19:A:SER:HA	1:21:A:ARG:H	8	0.1
(1,474)	1:5:A:VAL:HG21	1:7:A:LEU:H	9	0.1
(1,474)	1:5:A:VAL:HG22	1:7:A:LEU:H	9	0.1
(1,474)	1:5:A:VAL:HG23	1:7:A:LEU:H	9	0.1
(1,455)	1:8:A:TYR:HB2	1:9:A:ILE:H	6	0.1
(1,453)	1:15:A:GLY:HA3	1:16:A:GLY:H	7	0.1
(1,437)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HD2	2	0.1
(1,437)	1:16:A:GLY:HA3	1:17:A:PRO:HD2	7	0.1
(1,428)	1:14:A:ASP:HB3	1:19:A:SER:HB2	8	0.1
(1,421)	1:1:A:GLU:HG2	1:3:A:GLU:HA	5	0.1
(1,421)	1:1:A:GLU:HG3	1:3:A:GLU:HA	5	0.1
(1,385)	1:11:A:TRP:HE1	1:11:A:TRP:HZ2	10	0.1
(1,381)	1:11:A:TRP:HE1	1:19:A:SER:HB2	2	0.1
(1,329)	1:11:A:TRP:HH2	1:17:A:PRO:HD2	1	0.1
(1,304)	1:8:A:TYR:HD1	1:24:A:PRO:HG3	7	0.1
(1,304)	1:8:A:TYR:HD2	1:24:A:PRO:HG3	7	0.1
(1,110)	1:12:A:LEU:HB2	1:12:A:LEU:HG	4	0.1
(1,84)	1:10:A:GLN:H	1:10:A:GLN:HB3	8	0.1
(1,41)	1:7:A:LEU:H	1:7:A:LEU:HA	3	0.1
(1,27)	1:6:A:ARG:HB2	1:6:A:ARG:HD2	3	0.1
(1,27)	1:6:A:ARG:HB3	1:6:A:ARG:HD2	3	0.1

10 Dihedral-angle violation analysis ⓘ

No dihedral-angle restraints found