



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 8, 2026 – 01:24 AM UTC

PDB ID : 2NBQ / pdb_00002nbq
BMRB ID : 25985
Title : NMR Structure of the C-Terminal Domain of human APOBEC3B
Authors : Byeon, I.L.; Byeon, C.; Gronenborn, A.M.
Deposited on : 2016-03-09

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

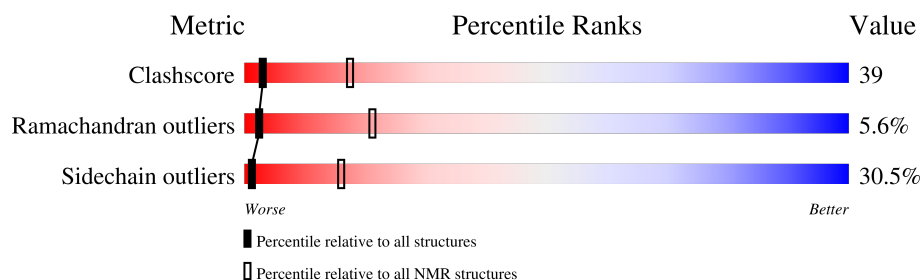
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment is 67%.

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	205	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 30 models. Model 11 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *lowest energy*.

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:191-A:202, A:214-A:240, A:252-A:377 (165)	0.78	11

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 5 clusters and 1 single-model cluster was found.

Cluster number	Models
1	6, 7, 8, 15, 16, 20, 23, 24, 25, 27
2	1, 4, 5, 11, 12, 17, 19, 22, 28, 30
3	14, 18, 21, 26
4	3, 9, 10
5	13, 29
Single-model clusters	2

3 Entry composition

There are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 3208 atoms, of which 1563 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called DNA dC->dU-editing enzyme APOBEC-3B.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	197	Total	C	H	N	O	S	0
			3207	1055	1563	282	294	13	

There are 9 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	186	MET	-	expression tag	UNP Q9UH17
A	383	LEU	-	expression tag	UNP Q9UH17
A	384	GLU	-	expression tag	UNP Q9UH17
A	385	HIS	-	expression tag	UNP Q9UH17
A	386	HIS	-	expression tag	UNP Q9UH17
A	387	HIS	-	expression tag	UNP Q9UH17
A	388	HIS	-	expression tag	UNP Q9UH17
A	389	HIS	-	expression tag	UNP Q9UH17
A	390	HIS	-	expression tag	UNP Q9UH17

- Molecule 2 is ZINC ION (CCD ID: ZN) (formula: Zn).

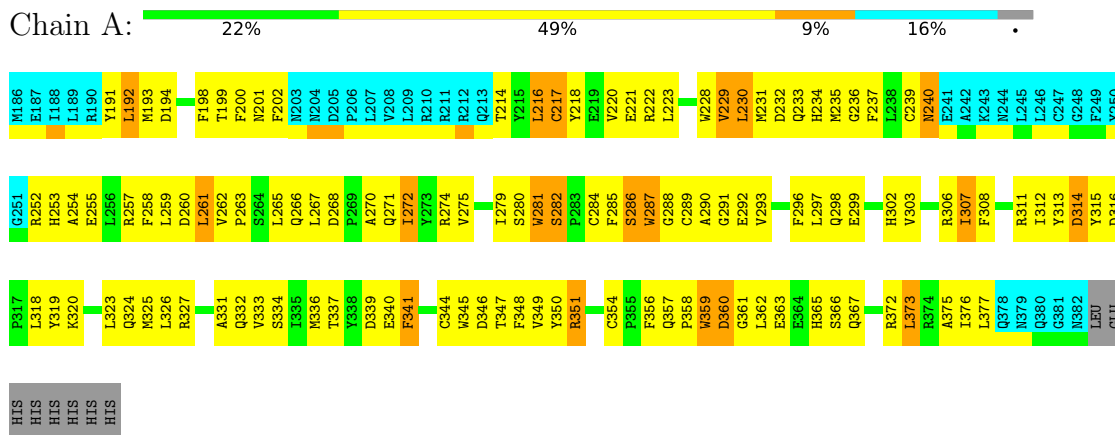
Mol	Chain	Residues	Atoms	
2	A	1	Total	Zn
			1	1

4 Residue-property plots

4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

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

- Molecule 1: DNA dC->dU-editing enzyme APOBEC-3B

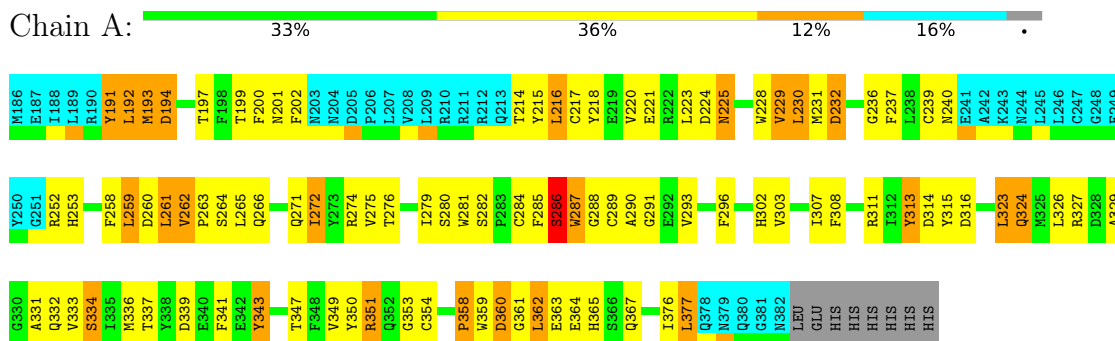


4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

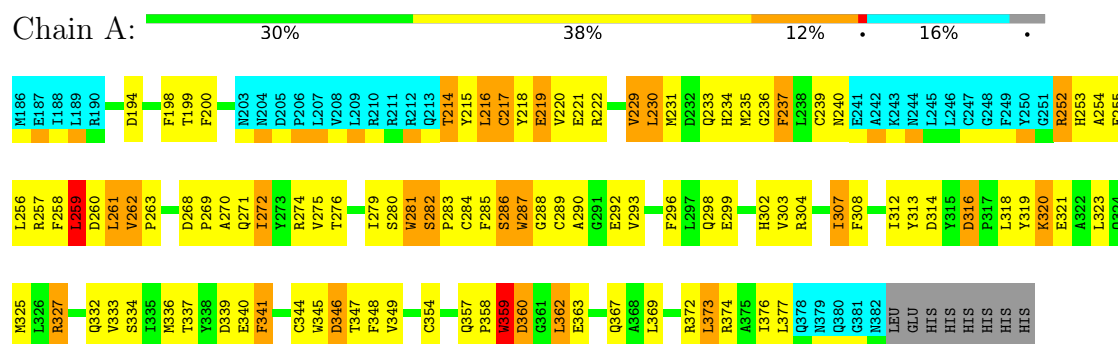
4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: DNA dC->dU-editing enzyme APOBEC-3B



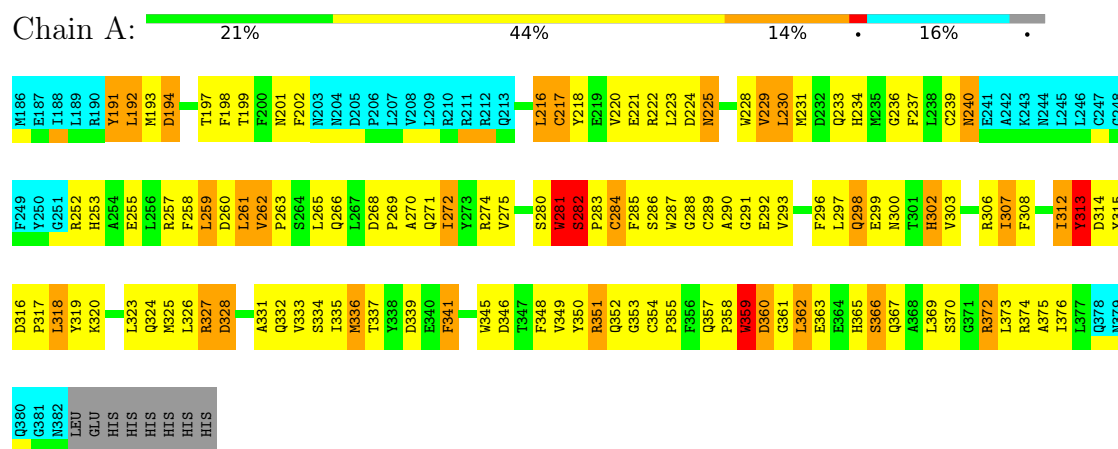
4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: DNA dC->dU-editing enzyme APOBEC-3B



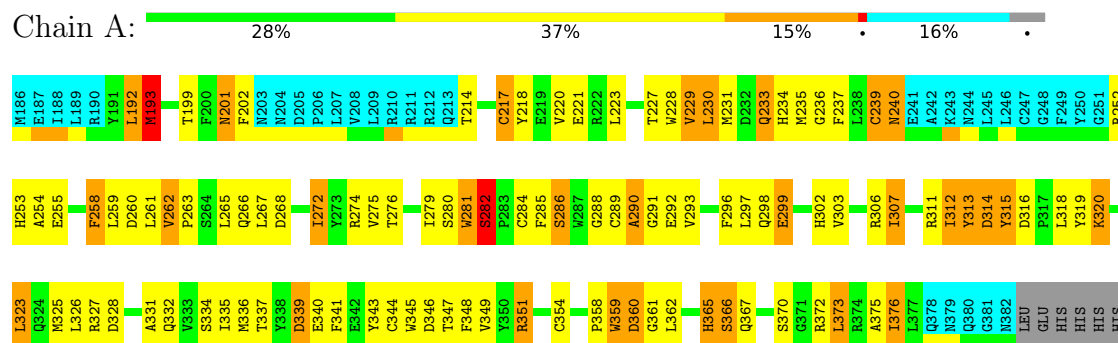
4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: DNA dC->dU-editing enzyme APOBEC-3B



4.2.4 Score per residue for model 4

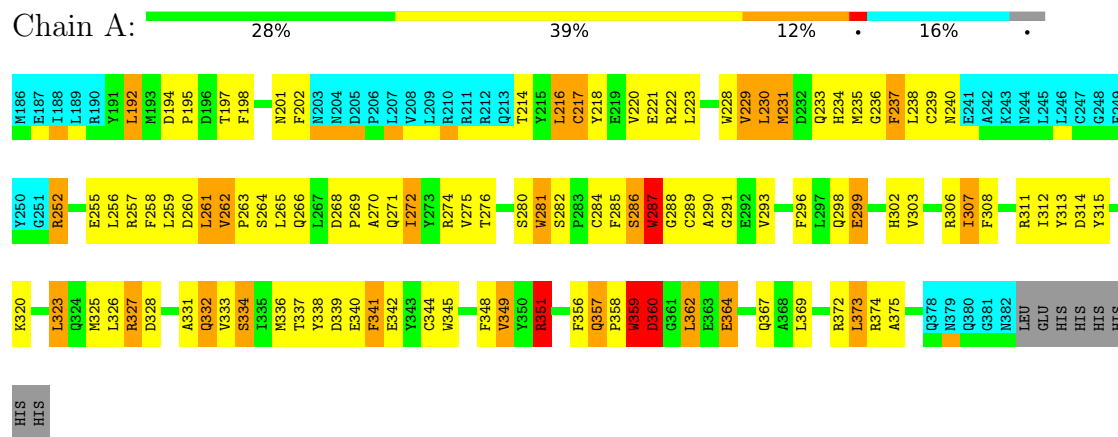
- Molecule 1: DNA dC->dU-editing enzyme APOBEC-3B



HIS
HIS

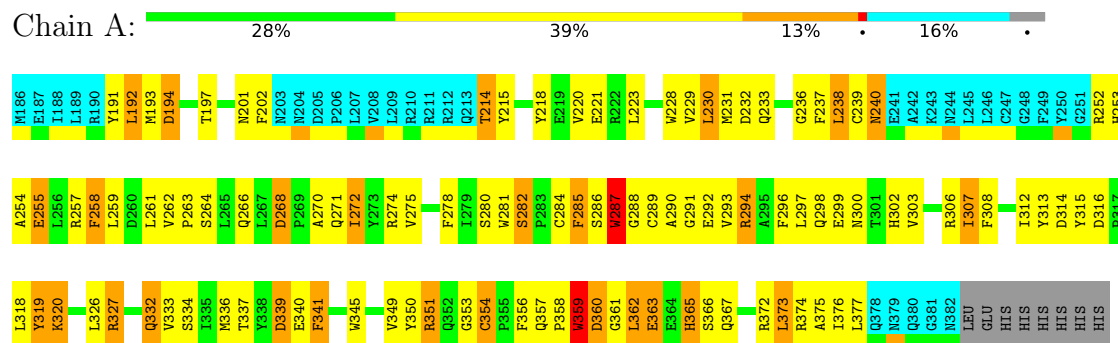
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: DNA dC->dU-editing enzyme APOBEC-3B

HIS
HIS

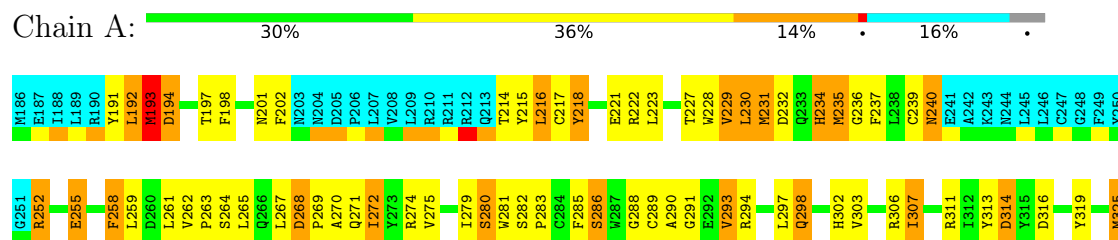
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: DNA dC->dU-editing enzyme APOBEC-3B



4.2.7 Score per residue for model 7

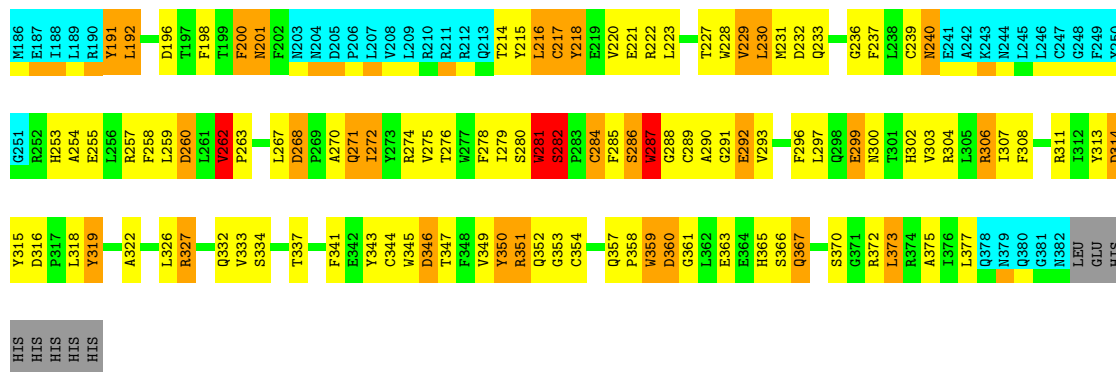
- Molecule 1: DNA dC->dU-editing enzyme APOBEC-3B





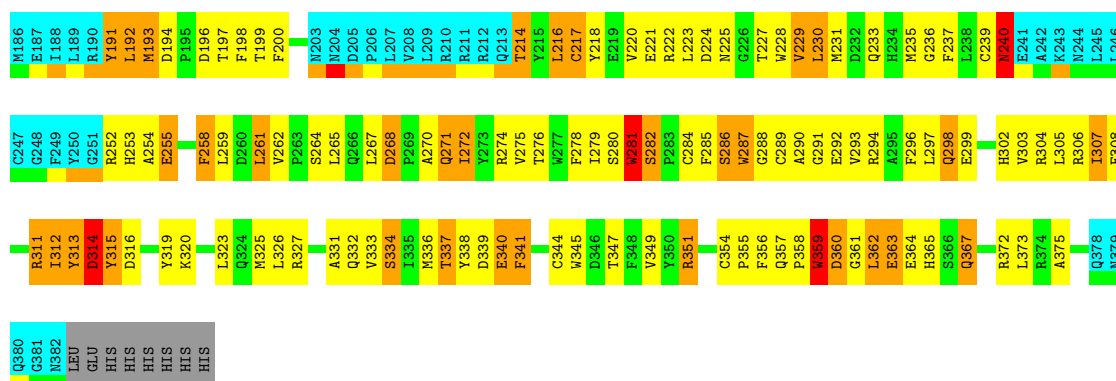
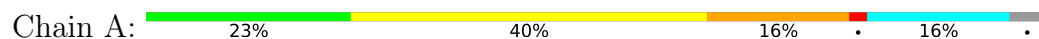
4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: DNA dC->dU-editing enzyme APOBEC-3B



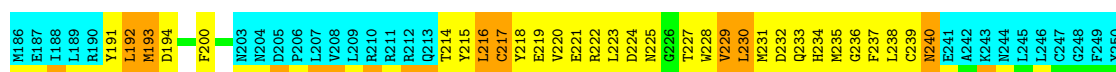
4.2.9 Score per residue for model 9

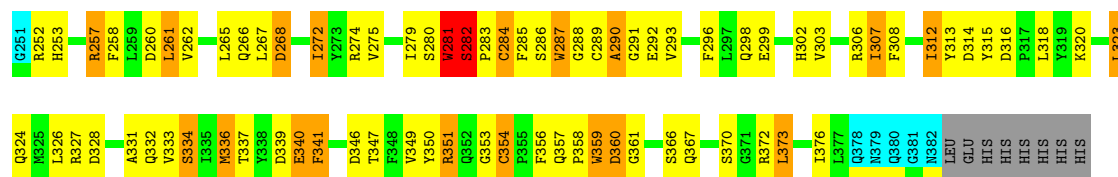
- Molecule 1: DNA dC->dU-editing enzyme APOBEC-3B



4.2.10 Score per residue for model 10

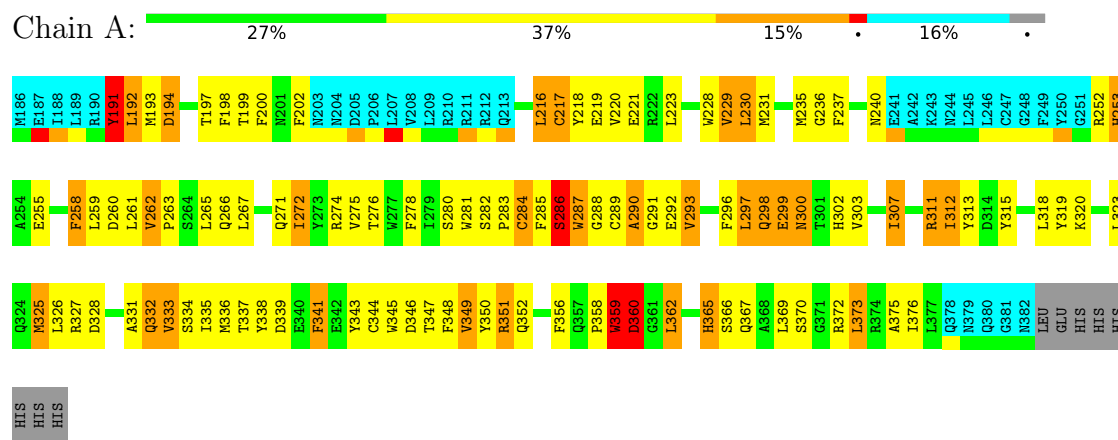
- Molecule 1: DNA dC->dU-editing enzyme APOBEC-3B





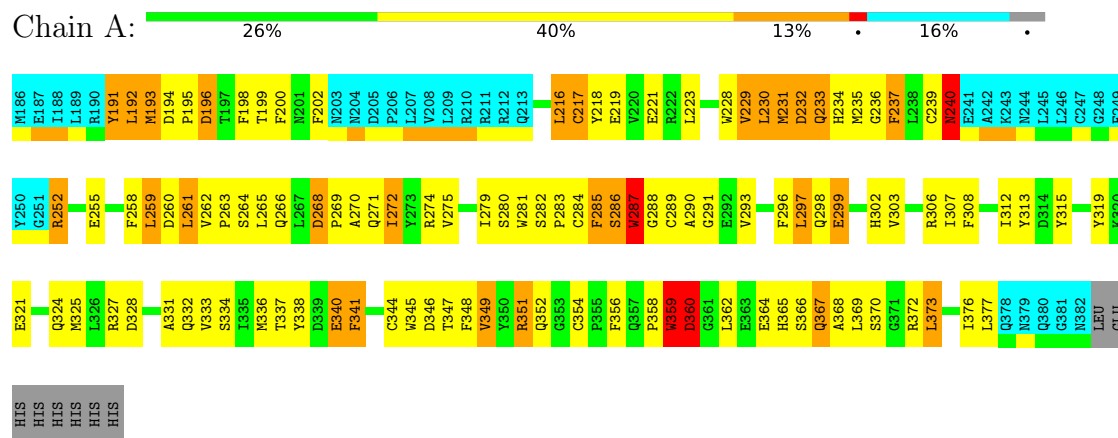
4.2.11 Score per residue for model 11 (medoid)

- Molecule 1: DNA dC->dU-editing enzyme APOBEC-3B



4.2.12 Score per residue for model 12

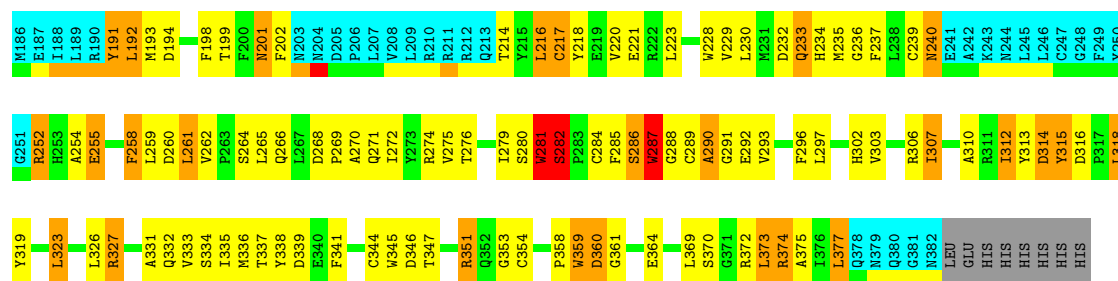
- Molecule 1: DNA dC->dU-editing enzyme APOBEC-3B



4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: DNA dC->dU-editing enzyme APOBEC-3B

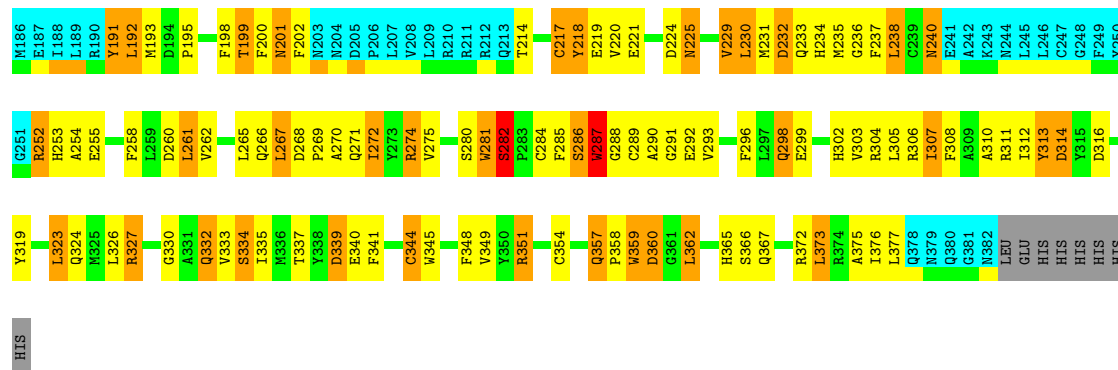




4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: DNA dC->dU-editing enzyme APOBEC-3B

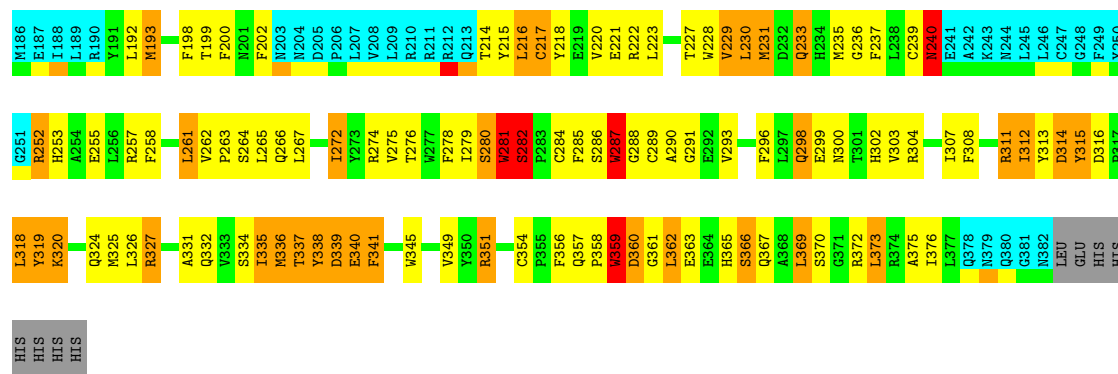
Chain A: 28% 35% 17% 16%



4.2.15 Score per residue for model 15

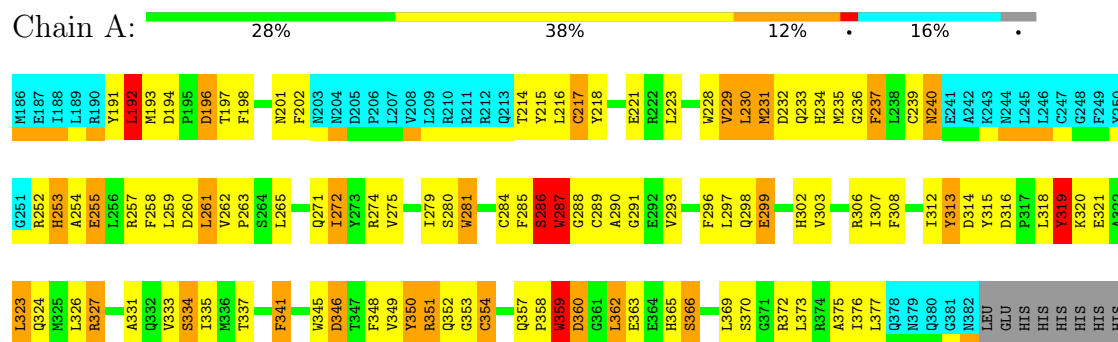
- Molecule 1: DNA dC->dU-editing enzyme APOBEC-3B

Chain A: 27% 35% 16% 16%



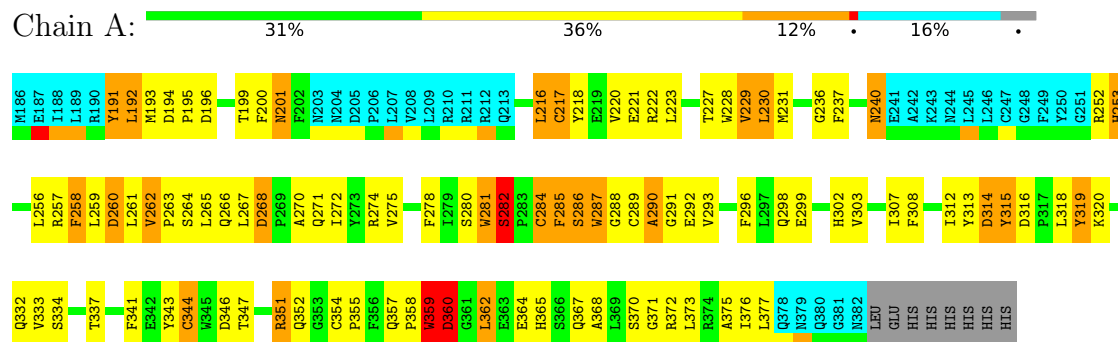
4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: DNA dC->dU-editing enzyme APOBEC-3B



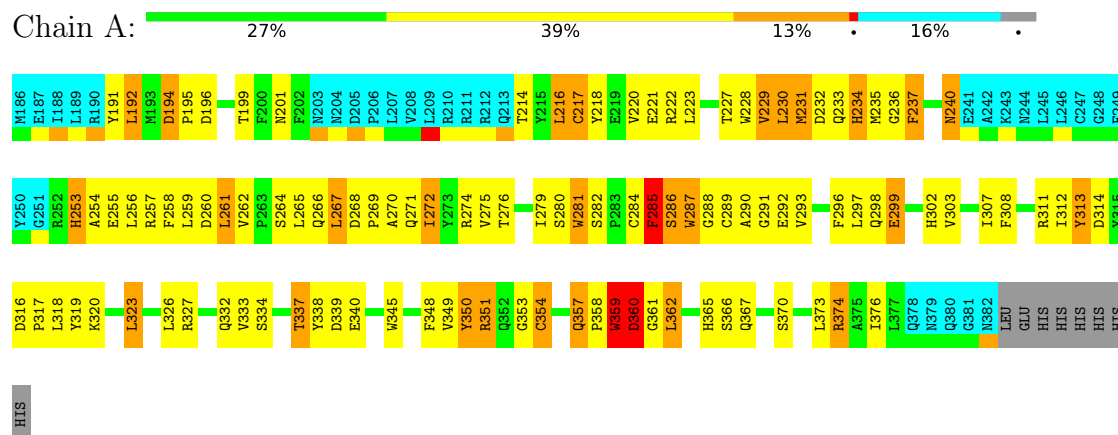
4.2.17 Score per residue for model 17

- Molecule 1: DNA dC->dU-editing enzyme APOBEC-3B



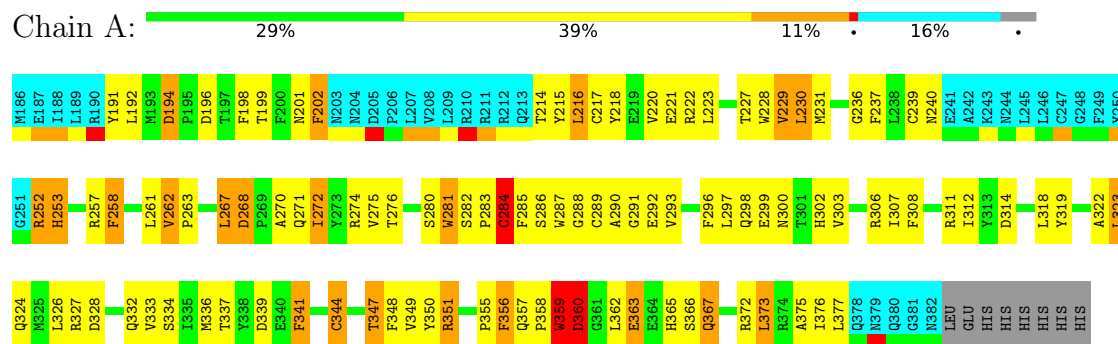
4.2.18 Score per residue for model 18

- Molecule 1: DNA dC->dU-editing enzyme APOBEC-3B



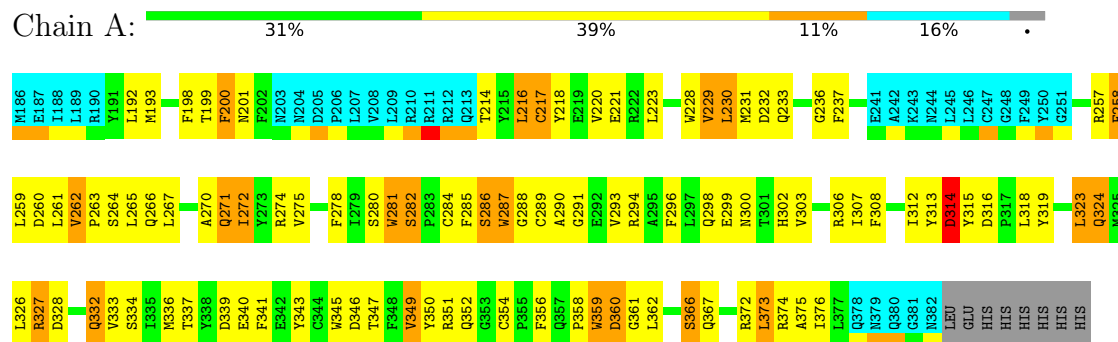
4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: DNA dC->dU-editing enzyme APOBEC-3B



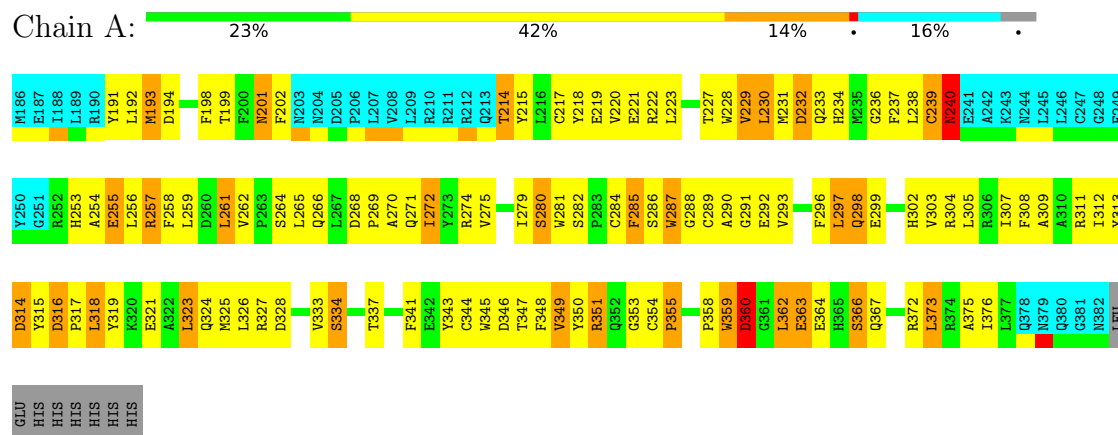
4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: DNA dC->dU-editing enzyme APOBEC-3B



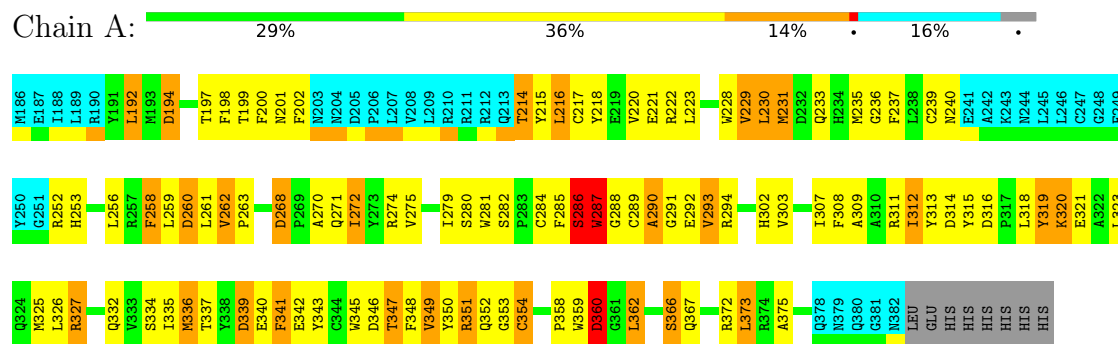
4.2.21 Score per residue for model 21

- Molecule 1: DNA dC->dU-editing enzyme APOBEC-3B



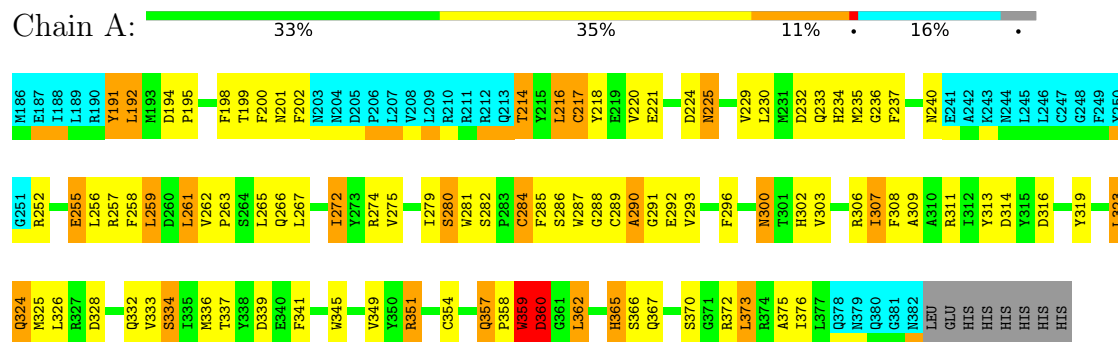
4.2.22 Score per residue for model 22

- Molecule 1: DNA dC->dU-editing enzyme APOBEC-3B



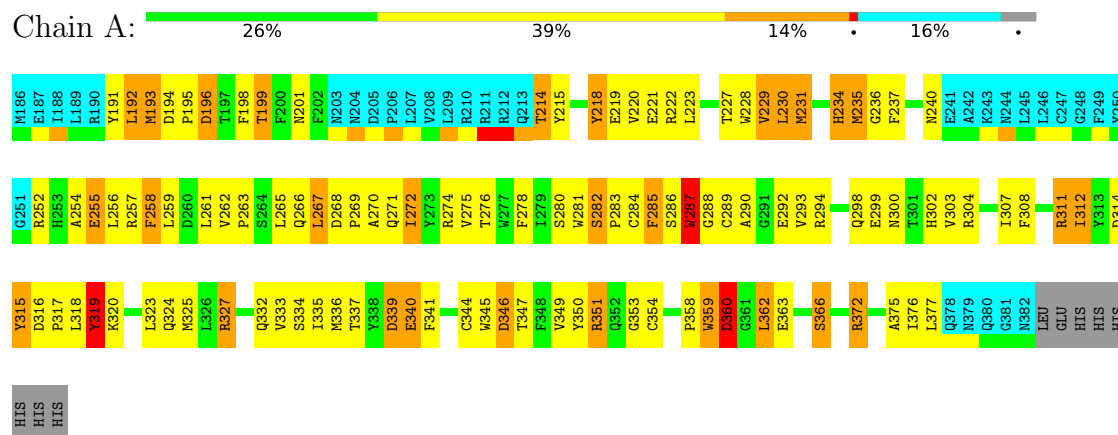
4.2.23 Score per residue for model 23

- Molecule 1: DNA dC->dU-editing enzyme APOBEC-3B



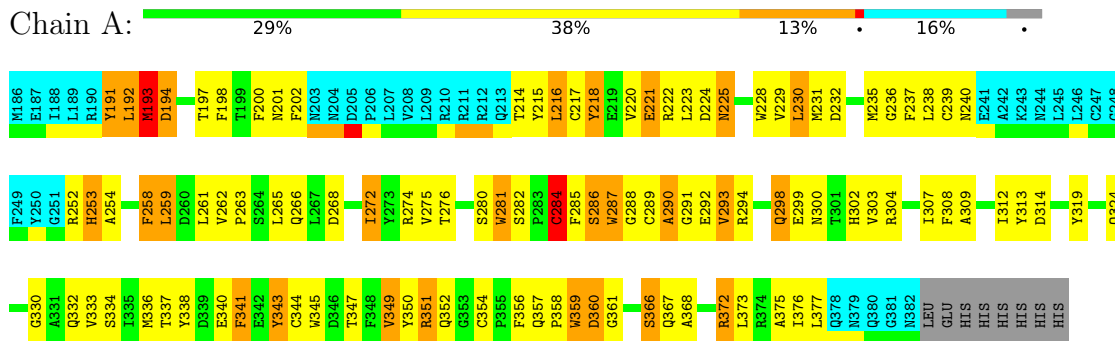
4.2.24 Score per residue for model 24

- Molecule 1: DNA dC->dU-editing enzyme APOBEC-3B



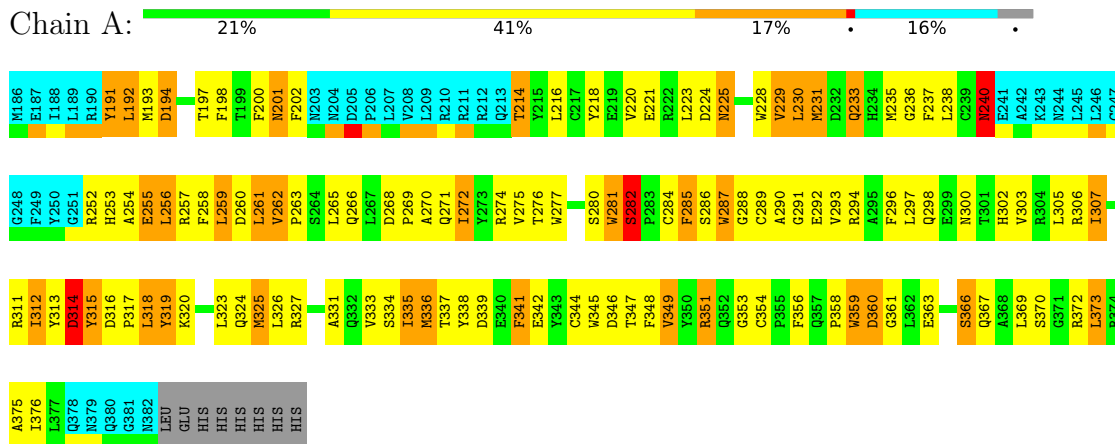
4.2.25 Score per residue for model 25

- Molecule 1: DNA dC->dU-editing enzyme APOBEC-3B



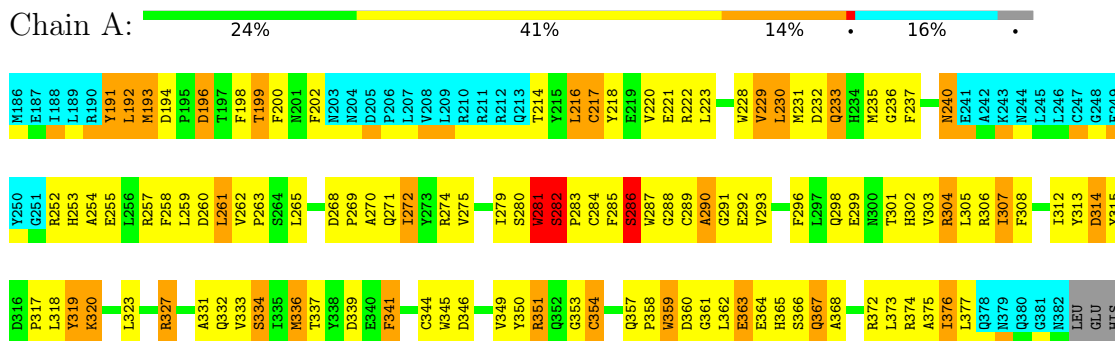
4.2.26 Score per residue for model 26

- Molecule 1: DNA dC->dU-editing enzyme APOBEC-3B



4.2.27 Score per residue for model 27

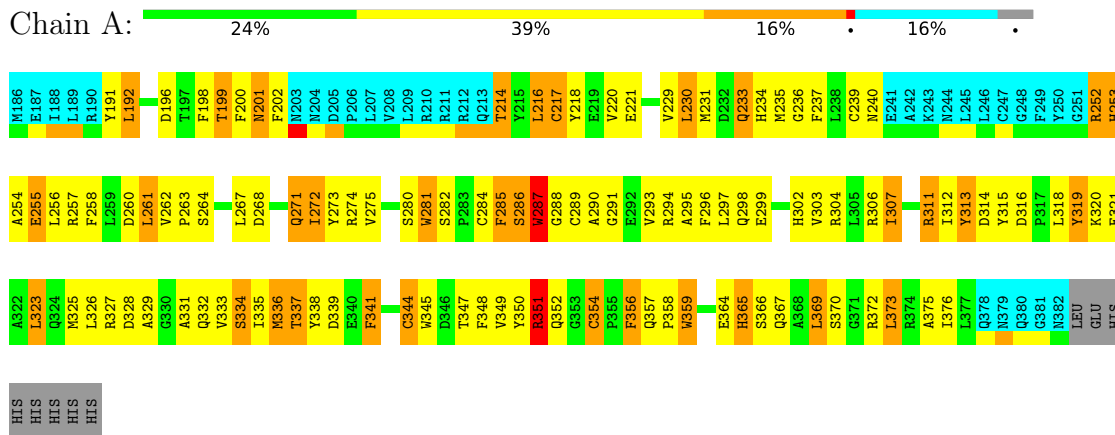
- Molecule 1: DNA dC->dU-editing enzyme APOBEC-3B



HIS
HIS
HIS
HIS

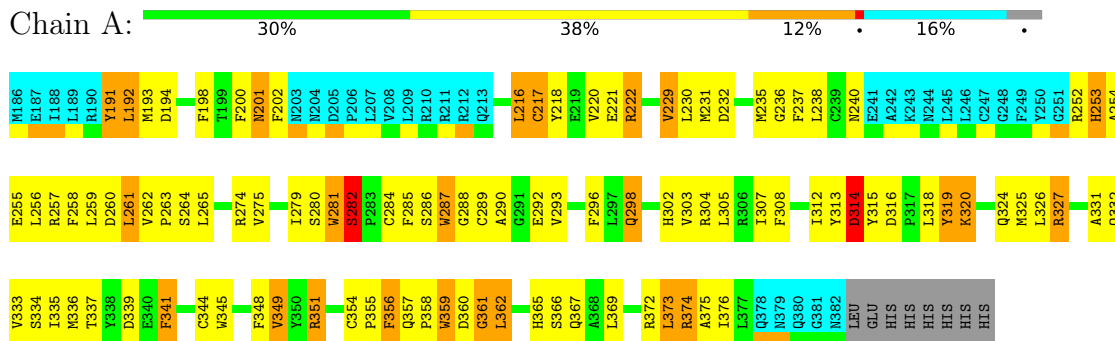
4.2.28 Score per residue for model 28

- Molecule 1: DNA dC->dU-editing enzyme APOBEC-3B



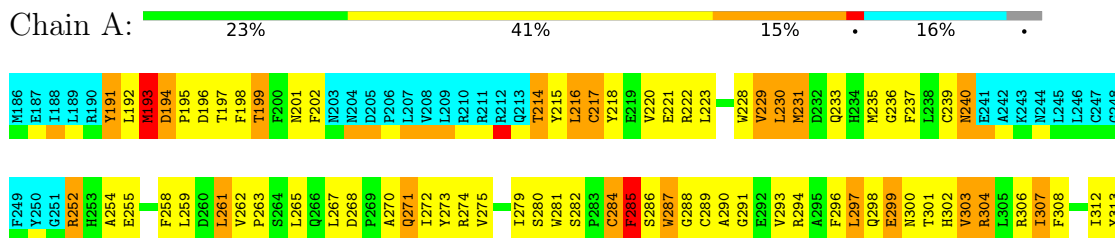
4.2.29 Score per residue for model 29

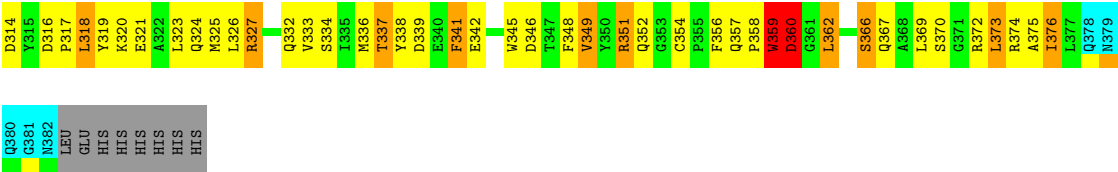
- Molecule 1: DNA dC->dU-editing enzyme APOBEC-3B



4.2.30 Score per residue for model 30

- Molecule 1: DNA dC->dU-editing enzyme APOBEC-3B





5 Refinement protocol and experimental data overview

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

Of the 256 calculated structures, 30 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
XPLOR-NIH	refinement	

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

Chemical shift file(s)	working_cs.cif
Number of chemical shift lists	2
Total number of shifts	2228
Number of shifts mapped to atoms	2166
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	62
Number of shifts with mapping warnings	0
Assignment completeness (well-defined parts)	67%

6 Model quality [i](#)

6.1 Standard geometry [i](#)

Bond lengths and bond angles in the following residue types are not validated in this section: ZN

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

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	#Z>5	RMSZ	#Z>5
1	A	0.61±0.00	0±0/1427 (0.0± 0.0%)	1.05±0.01	1±1/1943 (0.0± 0.0%)
All	All	0.61	0/42810 (0.0%)	1.05	26/58290 (0.0%)

There are no bond-length outliers.

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	258	PHE	CA-CB-CG	-6.29	107.51	113.80	20	12
1	A	253	HIS	CA-CB-CG	-5.25	108.55	113.80	26	6
1	A	285	PHE	CA-CB-CG	-5.17	108.63	113.80	12	7
1	A	262	VAL	CB-CA-C	-5.06	108.99	114.35	8	1

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

6.2 Too-close contacts [i](#)

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	1382	1298	1298	104±11
All	All	41490	38940	38940	3119

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 39.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:335:ILE:HD11	1:A:369:LEU:HD23	0.85	1.46	16	4
1:A:327:ARG:CZ	1:A:377:LEU:HD11	0.81	2.06	13	2
1:A:312:ILE:HD12	1:A:312:ILE:H	0.80	1.36	3	2
1:A:307:ILE:N	1:A:307:ILE:HD12	0.79	1.92	11	5
1:A:238:LEU:N	1:A:238:LEU:HD23	0.79	1.91	6	2
1:A:312:ILE:O	1:A:312:ILE:HD13	0.77	1.78	10	1
1:A:327:ARG:HH11	1:A:377:LEU:HD11	0.74	1.39	16	1
1:A:297:LEU:CD2	1:A:331:ALA:HB2	0.72	2.14	12	4
1:A:255:GLU:H	1:A:255:GLU:CD	0.72	1.93	8	10
1:A:351:ARG:NE	1:A:351:ARG:H	0.72	1.83	27	17
1:A:362:LEU:HD12	1:A:362:LEU:O	0.72	1.85	24	7
1:A:259:LEU:HD22	1:A:292:GLU:OE1	0.72	1.84	25	1
1:A:365:HIS:CE1	1:A:369:LEU:HD23	0.71	2.20	15	1
1:A:307:ILE:HD13	1:A:307:ILE:N	0.71	2.01	9	14
1:A:302:HIS:H	1:A:302:HIS:CD2	0.71	2.04	3	1
1:A:312:ILE:HD12	1:A:312:ILE:N	0.70	2.01	13	3
1:A:341:PHE:CE2	1:A:362:LEU:HD21	0.69	2.23	6	3
1:A:362:LEU:HD12	1:A:362:LEU:C	0.69	2.13	24	2
1:A:216:LEU:HD12	1:A:216:LEU:C	0.68	2.14	18	24
1:A:216:LEU:HD12	1:A:217:CYS:N	0.68	2.01	9	24
1:A:261:LEU:C	1:A:261:LEU:HD23	0.68	2.13	21	18
1:A:285:PHE:CD2	1:A:286:SER:N	0.67	2.62	6	13
1:A:351:ARG:NE	1:A:351:ARG:N	0.67	2.42	19	20
1:A:335:ILE:CD1	1:A:369:LEU:HD23	0.67	2.19	16	4
1:A:285:PHE:CD1	1:A:286:SER:N	0.67	2.63	1	17
1:A:296:PHE:CZ	1:A:300:ASN:ND2	0.67	2.62	30	1
1:A:312:ILE:HD13	1:A:312:ILE:N	0.66	2.06	22	2
1:A:231:MET:HE3	1:A:234:HIS:NE2	0.65	2.06	18	3
1:A:220:VAL:O	1:A:230:LEU:HD23	0.65	1.90	25	2
1:A:284:CYS:SG	1:A:285:PHE:N	0.65	2.70	12	16
1:A:192:LEU:N	1:A:192:LEU:HD23	0.65	2.05	25	4
1:A:358:PRO:O	1:A:360:ASP:N	0.65	2.30	27	24
1:A:240:ASN:ND2	1:A:240:ASN:H	0.65	1.88	27	5
1:A:351:ARG:HE	1:A:351:ARG:H	0.65	1.33	12	3
1:A:362:LEU:C	1:A:362:LEU:HD12	0.65	2.16	14	11
1:A:222:ARG:O	1:A:229:VAL:HG22	0.64	1.93	18	13
1:A:285:PHE:CG	1:A:286:SER:N	0.64	2.65	21	19
1:A:341:PHE:CD2	1:A:362:LEU:HD21	0.63	2.28	9	5
1:A:326:LEU:C	1:A:326:LEU:HD23	0.63	2.19	22	17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:312:ILE:HD11	1:A:369:LEU:CD2	0.63	2.23	3	1
1:A:259:LEU:HD21	1:A:292:GLU:O	0.63	1.93	9	2
1:A:327:ARG:NH1	1:A:377:LEU:HD11	0.63	2.08	13	2
1:A:345:TRP:NE1	1:A:351:ARG:NH1	0.63	2.46	7	7
1:A:237:PHE:N	1:A:237:PHE:CD1	0.63	2.67	16	25
1:A:261:LEU:HD23	1:A:262:VAL:N	0.63	2.08	27	19
1:A:302:HIS:CD2	1:A:302:HIS:N	0.63	2.66	3	1
1:A:287:TRP:CD1	1:A:288:GLY:N	0.63	2.67	8	11
1:A:253:HIS:N	1:A:253:HIS:CD2	0.62	2.67	17	6
1:A:364:GLU:O	1:A:367:GLN:NE2	0.62	2.32	12	3
1:A:327:ARG:NE	1:A:377:LEU:HD11	0.62	2.10	14	3
1:A:345:TRP:CD1	1:A:351:ARG:NH1	0.62	2.67	21	6
1:A:367:GLN:NE2	1:A:368:ALA:N	0.62	2.47	27	2
1:A:201:ASN:ND2	1:A:215:TYR:CD1	0.62	2.67	19	2
1:A:319:TYR:CD1	1:A:320:LYS:N	0.62	2.67	29	5
1:A:367:GLN:N	1:A:367:GLN:NE2	0.62	2.48	9	4
1:A:351:ARG:NH2	1:A:354:CYS:N	0.62	2.47	27	7
1:A:298:GLN:NE2	1:A:299:GLU:N	0.62	2.48	9	1
1:A:261:LEU:HD23	1:A:261:LEU:C	0.62	2.19	27	1
1:A:351:ARG:HE	1:A:351:ARG:N	0.62	1.93	30	4
1:A:274:ARG:NE	1:A:306:ARG:NH1	0.62	2.48	23	1
1:A:193:MET:N	1:A:237:PHE:CZ	0.62	2.68	7	10
1:A:327:ARG:NH2	1:A:377:LEU:HD21	0.62	2.09	2	1
1:A:259:LEU:HD22	1:A:259:LEU:H	0.62	1.54	5	7
1:A:238:LEU:HD23	1:A:238:LEU:H	0.62	1.55	14	2
1:A:281:TRP:NE1	1:A:311:ARG:NH1	0.62	2.48	24	1
1:A:240:ASN:ND2	1:A:240:ASN:N	0.62	2.47	4	3
1:A:367:GLN:CD	1:A:368:ALA:N	0.62	2.57	17	3
1:A:198:PHE:CE2	1:A:202:PHE:CE2	0.62	2.88	29	2
1:A:258:PHE:CE2	1:A:262:VAL:CG2	0.62	2.82	12	14
1:A:228:TRP:CD1	1:A:274:ARG:NH2	0.61	2.68	12	5
1:A:306:ARG:NH1	1:A:332:GLN:NE2	0.61	2.47	20	1
1:A:351:ARG:HE	1:A:353:GLY:H	0.61	1.38	24	1
1:A:270:ALA:HB3	1:A:271:GLN:OE1	0.61	1.95	26	3
1:A:200:PHE:CD2	1:A:201:ASN:N	0.61	2.68	8	1
1:A:319:TYR:CG	1:A:320:LYS:N	0.61	2.67	30	3
1:A:281:TRP:CE2	1:A:311:ARG:NH2	0.61	2.67	7	1
1:A:351:ARG:NH1	1:A:354:CYS:N	0.61	2.48	8	3
1:A:311:ARG:NH2	1:A:365:HIS:CD2	0.61	2.68	11	1
1:A:200:PHE:CD1	1:A:201:ASN:N	0.61	2.69	20	1
1:A:274:ARG:NH2	1:A:304:ARG:NH2	0.61	2.49	28	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:306:ARG:NH2	1:A:332:GLN:NE2	0.61	2.47	5	1
1:A:238:LEU:N	1:A:238:LEU:CD2	0.61	2.64	6	2
1:A:258:PHE:CE1	1:A:262:VAL:CG2	0.61	2.84	25	4
1:A:228:TRP:CD1	1:A:274:ARG:HH21	0.60	2.14	12	6
1:A:345:TRP:NE1	1:A:351:ARG:HH11	0.60	1.95	27	8
1:A:252:ARG:NH2	1:A:257:ARG:NE	0.60	2.49	23	1
1:A:222:ARG:NH2	1:A:231:MET:SD	0.60	2.75	25	3
1:A:358:PRO:O	1:A:359:TRP:CD1	0.60	2.55	8	9
1:A:286:SER:OG	1:A:325:MET:HE1	0.60	1.97	7	2
1:A:235:MET:SD	1:A:236:GLY:N	0.59	2.75	24	4
1:A:351:ARG:N	1:A:351:ARG:NE	0.59	2.50	12	1
1:A:336:MET:SD	1:A:341:PHE:CZ	0.59	2.95	25	7
1:A:217:CYS:SG	1:A:348:PHE:CZ	0.59	2.95	3	1
1:A:351:ARG:H	1:A:351:ARG:NE	0.59	1.96	12	3
1:A:351:ARG:H	1:A:351:ARG:HE	0.59	1.38	11	3
1:A:367:GLN:N	1:A:367:GLN:OE1	0.59	2.34	17	2
1:A:307:ILE:N	1:A:307:ILE:CD1	0.59	2.65	11	16
1:A:198:PHE:CE1	1:A:202:PHE:CE1	0.59	2.89	23	4
1:A:193:MET:SD	1:A:237:PHE:CD2	0.59	2.95	15	1
1:A:313:TYR:CG	1:A:313:TYR:O	0.59	2.54	21	1
1:A:220:VAL:CG2	1:A:265:LEU:HD13	0.59	2.27	15	5
1:A:230:LEU:HD13	1:A:231:MET:N	0.59	2.13	7	25
1:A:306:ARG:C	1:A:307:ILE:HD13	0.59	2.23	3	13
1:A:336:MET:SD	1:A:341:PHE:CE2	0.59	2.96	19	10
1:A:217:CYS:SG	1:A:348:PHE:CD2	0.59	2.96	22	6
1:A:255:GLU:OE1	1:A:289:CYS:SG	0.59	2.61	16	4
1:A:193:MET:SD	1:A:237:PHE:CD1	0.59	2.95	30	2
1:A:259:LEU:HD22	1:A:259:LEU:N	0.58	2.13	11	7
1:A:281:TRP:NE1	1:A:311:ARG:NH2	0.58	2.51	7	1
1:A:192:LEU:HD11	1:A:350:TYR:H	0.58	1.57	27	1
1:A:240:ASN:N	1:A:240:ASN:HD22	0.58	1.93	27	1
1:A:215:TYR:CZ	1:A:239:CYS:SG	0.58	2.96	15	2
1:A:307:ILE:HD12	1:A:307:ILE:H	0.58	1.58	11	2
1:A:278:PHE:CE2	1:A:336:MET:SD	0.58	2.96	24	1
1:A:359:TRP:CD1	1:A:360:ASP:H	0.58	2.16	24	2
1:A:326:LEU:HD23	1:A:327:ARG:N	0.58	2.13	22	1
1:A:201:ASN:ND2	1:A:202:PHE:CD2	0.58	2.72	4	1
1:A:240:ASN:HD22	1:A:253:HIS:N	0.58	1.97	16	1
1:A:372:ARG:O	1:A:375:ALA:HB3	0.57	1.99	25	19
1:A:297:LEU:HD12	1:A:304:ARG:HH12	0.57	1.59	30	1
1:A:218:TYR:CD1	1:A:218:TYR:C	0.57	2.83	9	30

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:270:ALA:HB1	1:A:271:GLN:NE2	0.57	2.14	8	4
1:A:287:TRP:H	1:A:287:TRP:CD1	0.57	2.16	10	1
1:A:252:ARG:N	1:A:252:ARG:CD	0.57	2.67	12	2
1:A:217:CYS:SG	1:A:348:PHE:CE1	0.57	2.97	18	4
1:A:239:CYS:SG	1:A:240:ASN:N	0.57	2.77	22	2
1:A:312:ILE:N	1:A:312:ILE:CD1	0.57	2.66	13	4
1:A:240:ASN:H	1:A:240:ASN:HD22	0.57	1.40	18	2
1:A:274:ARG:NH2	1:A:306:ARG:CZ	0.57	2.67	16	4
1:A:231:MET:SD	1:A:233:GLN:NE2	0.57	2.77	18	1
1:A:198:PHE:CE2	1:A:202:PHE:CE1	0.57	2.92	14	7
1:A:198:PHE:CZ	1:A:202:PHE:CD2	0.57	2.93	22	3
1:A:252:ARG:CZ	1:A:257:ARG:NE	0.57	2.67	23	1
1:A:312:ILE:CD1	1:A:312:ILE:H	0.57	2.12	24	1
1:A:312:ILE:CG2	1:A:319:TYR:CE2	0.57	2.88	18	1
1:A:281:TRP:CE2	1:A:282:SER:O	0.57	2.58	3	13
1:A:356:PHE:CE1	1:A:357:GLN:O	0.57	2.58	28	3
1:A:286:SER:O	1:A:288:GLY:N	0.57	2.38	8	30
1:A:358:PRO:C	1:A:359:TRP:CG	0.57	2.83	26	18
1:A:286:SER:C	1:A:291:GLY:H	0.57	2.08	30	6
1:A:294:ARG:O	1:A:298:GLN:NE2	0.57	2.38	7	2
1:A:351:ARG:HH21	1:A:354:CYS:N	0.56	1.98	27	5
1:A:359:TRP:NE1	1:A:362:LEU:CB	0.56	2.68	24	3
1:A:281:TRP:O	1:A:309:ALA:HB1	0.56	2.00	23	4
1:A:217:CYS:SG	1:A:348:PHE:CE2	0.56	2.95	2	2
1:A:318:LEU:HD12	1:A:318:LEU:N	0.56	2.15	22	1
1:A:344:CYS:SG	1:A:345:TRP:N	0.56	2.78	14	8
1:A:327:ARG:NE	1:A:377:LEU:HD22	0.56	2.15	8	1
1:A:372:ARG:N	1:A:372:ARG:CD	0.56	2.68	25	1
1:A:351:ARG:N	1:A:351:ARG:CD	0.56	2.69	11	5
1:A:221:GLU:N	1:A:221:GLU:CD	0.56	2.63	28	2
1:A:262:VAL:N	1:A:263:PRO:CD	0.56	2.69	25	16
1:A:191:TYR:O	1:A:193:MET:N	0.56	2.38	27	1
1:A:335:ILE:HD11	1:A:373:LEU:HD23	0.56	1.78	22	3
1:A:296:PHE:CD1	1:A:300:ASN:OD1	0.56	2.59	30	1
1:A:195:PRO:CG	1:A:351:ARG:NH2	0.56	2.69	14	1
1:A:313:TYR:C	1:A:315:TYR:H	0.55	2.09	21	9
1:A:201:ASN:ND2	1:A:202:PHE:CD1	0.55	2.74	14	3
1:A:218:TYR:CD2	1:A:236:GLY:O	0.55	2.59	29	29
1:A:287:TRP:CD1	1:A:287:TRP:C	0.55	2.83	13	11
1:A:362:LEU:HD13	1:A:362:LEU:C	0.55	2.26	27	6
1:A:358:PRO:C	1:A:360:ASP:N	0.55	2.64	27	9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:367:GLN:H	1:A:367:GLN:CD	0.55	2.08	9	1
1:A:292:GLU:CD	1:A:293:VAL:N	0.55	2.65	25	2
1:A:252:ARG:NH2	1:A:257:ARG:HE	0.55	2.00	23	1
1:A:312:ILE:O	1:A:314:ASP:N	0.55	2.39	3	5
1:A:376:ILE:HD13	1:A:376:ILE:N	0.55	2.17	4	2
1:A:341:PHE:CD1	1:A:356:PHE:CE2	0.55	2.94	26	2
1:A:280:SER:O	1:A:281:TRP:CG	0.55	2.60	22	17
1:A:313:TYR:O	1:A:315:TYR:N	0.55	2.40	21	11
1:A:192:LEU:HD11	1:A:347:THR:O	0.55	2.02	19	2
1:A:271:GLN:NE2	1:A:271:GLN:H	0.55	2.00	28	1
1:A:358:PRO:O	1:A:359:TRP:CG	0.55	2.59	29	1
1:A:280:SER:O	1:A:281:TRP:CD1	0.55	2.60	23	17
1:A:235:MET:SD	1:A:347:THR:HG22	0.55	2.42	28	2
1:A:286:SER:OG	1:A:287:TRP:N	0.55	2.40	24	6
1:A:365:HIS:CE1	1:A:369:LEU:HD13	0.55	2.37	16	1
1:A:360:ASP:O	1:A:362:LEU:N	0.55	2.40	29	1
1:A:286:SER:O	1:A:291:GLY:N	0.54	2.40	4	18
1:A:287:TRP:CD1	1:A:287:TRP:N	0.54	2.69	10	1
1:A:239:CYS:SG	1:A:240:ASN:ND2	0.54	2.80	15	1
1:A:274:ARG:NE	1:A:306:ARG:HH11	0.54	2.00	23	1
1:A:192:LEU:HD13	1:A:348:PHE:O	0.54	2.02	4	6
1:A:217:CYS:SG	1:A:348:PHE:CD1	0.54	2.95	18	5
1:A:228:TRP:NE1	1:A:274:ARG:HE	0.54	2.00	18	2
1:A:222:ARG:NH2	1:A:271:GLN:NE2	0.54	2.56	7	1
1:A:313:TYR:O	1:A:313:TYR:CD2	0.54	2.60	21	1
1:A:193:MET:N	1:A:237:PHE:CE1	0.54	2.76	13	7
1:A:362:LEU:C	1:A:362:LEU:CD1	0.54	2.80	24	22
1:A:228:TRP:NE1	1:A:274:ARG:HH21	0.54	2.00	13	3
1:A:364:GLU:O	1:A:367:GLN:OE1	0.54	2.26	17	1
1:A:332:GLN:CD	1:A:333:VAL:N	0.54	2.65	11	2
1:A:296:PHE:O	1:A:299:GLU:N	0.54	2.41	10	19
1:A:258:PHE:O	1:A:261:LEU:N	0.54	2.40	2	21
1:A:332:GLN:NE2	1:A:333:VAL:H	0.54	2.00	1	1
1:A:289:CYS:O	1:A:292:GLU:N	0.54	2.39	29	12
1:A:359:TRP:C	1:A:361:GLY:N	0.54	2.65	26	8
1:A:341:PHE:CD1	1:A:356:PHE:CZ	0.54	2.96	11	9
1:A:286:SER:C	1:A:288:GLY:N	0.54	2.66	5	30
1:A:359:TRP:O	1:A:361:GLY:N	0.54	2.41	13	8
1:A:198:PHE:CE1	1:A:202:PHE:CD2	0.54	2.96	11	2
1:A:240:ASN:HD22	1:A:240:ASN:N	0.54	1.99	18	1
1:A:201:ASN:ND2	1:A:202:PHE:CE1	0.54	2.75	23	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:221:GLU:N	1:A:221:GLU:OE1	0.54	2.41	13	8
1:A:270:ALA:HB3	1:A:271:GLN:NE2	0.54	2.18	20	3
1:A:265:LEU:CD1	1:A:265:LEU:N	0.54	2.71	16	4
1:A:312:ILE:H	1:A:312:ILE:HD13	0.54	1.61	24	1
1:A:351:ARG:NE	1:A:354:CYS:O	0.54	2.41	28	1
1:A:350:TYR:O	1:A:350:TYR:CG	0.54	2.60	3	4
1:A:272:ILE:HG23	1:A:272:ILE:O	0.54	2.02	4	24
1:A:285:PHE:CZ	1:A:286:SER:OG	0.53	2.61	2	2
1:A:319:TYR:CD1	1:A:319:TYR:C	0.53	2.85	9	17
1:A:346:ASP:OD1	1:A:347:THR:N	0.53	2.41	4	3
1:A:214:THR:HG23	1:A:215:TYR:N	0.53	2.18	7	3
1:A:357:GLN:O	1:A:357:GLN:NE2	0.53	2.41	14	1
1:A:233:GLN:H	1:A:233:GLN:CD	0.53	2.08	26	4
1:A:239:CYS:SG	1:A:257:ARG:NH1	0.53	2.81	19	1
1:A:228:TRP:HE1	1:A:274:ARG:NH1	0.53	2.01	30	1
1:A:351:ARG:N	1:A:351:ARG:HE	0.53	2.01	11	4
1:A:296:PHE:CD2	1:A:297:LEU:HD12	0.53	2.38	11	3
1:A:274:ARG:NE	1:A:306:ARG:NH2	0.53	2.56	12	1
1:A:363:GLU:C	1:A:367:GLN:NE2	0.53	2.66	21	1
1:A:351:ARG:NH2	1:A:353:GLY:C	0.53	2.67	27	5
1:A:363:GLU:H	1:A:363:GLU:CD	0.53	2.12	6	4
1:A:365:HIS:ND1	1:A:365:HIS:C	0.53	2.65	23	2
1:A:316:ASP:O	1:A:319:TYR:CE2	0.53	2.61	20	1
1:A:372:ARG:O	1:A:375:ALA:N	0.53	2.41	23	12
1:A:315:TYR:O	1:A:315:TYR:CD2	0.53	2.62	20	1
1:A:366:SER:OG	1:A:367:GLN:NE2	0.53	2.42	30	7
1:A:234:HIS:ND1	1:A:265:LEU:O	0.53	2.42	13	2
1:A:281:TRP:NE1	1:A:282:SER:O	0.53	2.41	10	5
1:A:315:TYR:O	1:A:315:TYR:CG	0.53	2.61	8	5
1:A:345:TRP:CD1	1:A:351:ARG:HH11	0.53	2.21	12	2
1:A:235:MET:HE2	1:A:347:THR:CG2	0.53	2.33	26	1
1:A:274:ARG:HH12	1:A:304:ARG:NH1	0.53	2.01	27	1
1:A:314:ASP:N	1:A:314:ASP:OD1	0.53	2.42	27	2
1:A:296:PHE:C	1:A:298:GLN:N	0.53	2.67	21	21
1:A:313:TYR:O	1:A:316:ASP:N	0.53	2.41	4	3
1:A:358:PRO:C	1:A:360:ASP:H	0.53	2.12	25	9
1:A:359:TRP:NE1	1:A:362:LEU:HD23	0.53	2.18	11	7
1:A:235:MET:SD	1:A:235:MET:C	0.53	2.92	24	3
1:A:214:THR:O	1:A:240:ASN:ND2	0.53	2.41	18	3
1:A:319:TYR:CD1	1:A:319:TYR:O	0.53	2.62	25	3
1:A:362:LEU:O	1:A:365:HIS:ND1	0.53	2.41	23	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:300:ASN:HD22	1:A:303:VAL:CG1	0.53	2.17	30	1
1:A:216:LEU:C	1:A:216:LEU:CD1	0.53	2.81	23	18
1:A:296:PHE:CD1	1:A:296:PHE:C	0.53	2.87	9	6
1:A:233:GLN:C	1:A:234:HIS:CD2	0.53	2.87	12	11
1:A:289:CYS:O	1:A:291:GLY:N	0.53	2.42	11	11
1:A:313:TYR:C	1:A:315:TYR:N	0.53	2.67	26	13
1:A:351:ARG:NH1	1:A:353:GLY:C	0.53	2.67	8	2
1:A:274:ARG:NH1	1:A:305:LEU:C	0.53	2.67	9	1
1:A:219:GLU:OE1	1:A:347:THR:HG21	0.53	2.03	21	3
1:A:317:PRO:O	1:A:319:TYR:N	0.53	2.42	21	1
1:A:240:ASN:OD1	1:A:252:ARG:NE	0.53	2.42	25	1
1:A:357:GLN:O	1:A:359:TRP:CE3	0.53	2.62	16	14
1:A:364:GLU:N	1:A:364:GLU:OE1	0.53	2.42	5	1
1:A:365:HIS:ND1	1:A:366:SER:N	0.53	2.57	23	4
1:A:200:PHE:CD1	1:A:200:PHE:O	0.53	2.62	11	4
1:A:268:ASP:N	1:A:268:ASP:OD1	0.53	2.42	22	3
1:A:359:TRP:CD1	1:A:362:LEU:HD23	0.53	2.38	19	2
1:A:366:SER:OG	1:A:367:GLN:N	0.53	2.42	19	1
1:A:361:GLY:O	1:A:365:HIS:CG	0.53	2.62	7	4
1:A:367:GLN:N	1:A:367:GLN:CD	0.53	2.67	9	15
1:A:215:TYR:CE1	1:A:239:CYS:SG	0.53	3.00	2	2
1:A:268:ASP:O	1:A:270:ALA:N	0.53	2.42	27	12
1:A:351:ARG:HH21	1:A:353:GLY:CA	0.53	2.17	7	7
1:A:240:ASN:ND2	1:A:252:ARG:O	0.53	2.42	11	5
1:A:327:ARG:NH2	1:A:332:GLN:OE1	0.53	2.42	14	1
1:A:346:ASP:O	1:A:350:TYR:CD2	0.53	2.62	16	1
1:A:352:GLN:N	1:A:352:GLN:CD	0.53	2.66	17	2
1:A:194:ASP:OD2	1:A:197:THR:N	0.53	2.42	7	3
1:A:370:SER:O	1:A:374:ARG:NH1	0.53	2.42	13	1
1:A:278:PHE:CE1	1:A:340:GLU:CD	0.53	2.87	15	1
1:A:367:GLN:OE1	1:A:368:ALA:N	0.53	2.42	17	1
1:A:281:TRP:NE1	1:A:311:ARG:CZ	0.53	2.71	24	1
1:A:256:LEU:HD11	1:A:292:GLU:OE1	0.52	2.05	2	1
1:A:271:GLN:OE1	1:A:271:GLN:N	0.52	2.42	3	4
1:A:311:ARG:NH2	1:A:365:HIS:NE2	0.52	2.58	4	1
1:A:281:TRP:CD2	1:A:313:TYR:CE2	0.52	2.96	30	2
1:A:351:ARG:NH1	1:A:354:CYS:O	0.52	2.42	10	2
1:A:222:ARG:NH1	1:A:271:GLN:OE1	0.52	2.42	9	1
1:A:319:TYR:OH	1:A:320:LYS:NZ	0.52	2.42	28	2
1:A:361:GLY:O	1:A:365:HIS:ND1	0.52	2.43	9	1
1:A:258:PHE:C	1:A:260:ASP:N	0.52	2.67	3	16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:271:GLN:N	1:A:271:GLN:CD	0.52	2.66	8	12
1:A:307:ILE:O	1:A:308:PHE:CD1	0.52	2.62	15	17
1:A:373:LEU:O	1:A:376:ILE:N	0.52	2.42	18	8
1:A:359:TRP:C	1:A:361:GLY:H	0.52	2.12	20	8
1:A:254:ALA:O	1:A:257:ARG:N	0.52	2.42	21	4
1:A:349:VAL:O	1:A:351:ARG:NH1	0.52	2.42	24	1
1:A:323:LEU:O	1:A:326:LEU:N	0.52	2.42	20	16
1:A:255:GLU:CD	1:A:289:CYS:SG	0.52	2.92	8	7
1:A:282:SER:OG	1:A:319:TYR:CG	0.52	2.62	9	1
1:A:324:GLN:NE2	1:A:376:ILE:O	0.52	2.42	20	2
1:A:356:PHE:O	1:A:356:PHE:CG	0.52	2.61	19	3
1:A:191:TYR:O	1:A:237:PHE:CZ	0.52	2.62	27	1
1:A:320:LYS:O	1:A:324:GLN:NE2	0.52	2.42	30	1
1:A:202:PHE:O	1:A:311:ARG:NH2	0.52	2.42	1	1
1:A:198:PHE:CZ	1:A:202:PHE:CE1	0.52	2.97	26	5
1:A:253:HIS:O	1:A:256:LEU:N	0.52	2.42	18	1
1:A:313:TYR:CD1	1:A:313:TYR:O	0.52	2.62	23	1
1:A:233:GLN:CD	1:A:233:GLN:N	0.52	2.67	26	1
1:A:358:PRO:O	1:A:359:TRP:C	0.52	2.53	23	17
1:A:198:PHE:CZ	1:A:202:PHE:CZ	0.52	2.98	3	1
1:A:201:ASN:OD1	1:A:202:PHE:CD2	0.52	2.62	13	1
1:A:225:ASN:O	1:A:225:ASN:CG	0.52	2.53	23	6
1:A:315:TYR:CD2	1:A:316:ASP:OD1	0.52	2.62	1	1
1:A:364:GLU:CD	1:A:364:GLU:H	0.52	2.13	1	1
1:A:255:GLU:OE2	1:A:289:CYS:SG	0.52	2.67	5	9
1:A:240:ASN:ND2	1:A:253:HIS:O	0.52	2.42	29	1
1:A:345:TRP:CZ2	1:A:351:ARG:NE	0.52	2.78	14	1
1:A:253:HIS:ND1	1:A:255:GLU:CD	0.52	2.68	29	1
1:A:258:PHE:O	1:A:260:ASP:N	0.52	2.43	3	6
1:A:201:ASN:CG	1:A:202:PHE:N	0.52	2.68	4	2
1:A:235:MET:C	1:A:235:MET:SD	0.52	2.93	7	1
1:A:285:PHE:O	1:A:289:CYS:N	0.52	2.42	12	3
1:A:278:PHE:CE1	1:A:340:GLU:OE1	0.52	2.63	15	2
1:A:308:PHE:CD2	1:A:340:GLU:OE1	0.52	2.62	20	1
1:A:308:PHE:CE1	1:A:340:GLU:OE2	0.52	2.63	6	1
1:A:355:PRO:O	1:A:357:GLN:NE2	0.52	2.43	17	1
1:A:324:GLN:N	1:A:324:GLN:CD	0.52	2.68	23	1
1:A:198:PHE:C	1:A:198:PHE:CD1	0.52	2.88	7	3
1:A:346:ASP:O	1:A:351:ARG:NH1	0.52	2.43	24	1
1:A:240:ASN:ND2	1:A:253:HIS:C	0.52	2.68	29	1
1:A:194:ASP:OD1	1:A:197:THR:N	0.51	2.43	30	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:326:LEU:CD2	1:A:331:ALA:HB3	0.51	2.35	28	8
1:A:222:ARG:NE	1:A:271:GLN:OE1	0.51	2.42	2	1
1:A:261:LEU:C	1:A:261:LEU:CD2	0.51	2.82	18	18
1:A:324:GLN:NE2	1:A:377:LEU:C	0.51	2.68	1	1
1:A:339:ASP:CG	1:A:340:GLU:N	0.51	2.68	4	4
1:A:356:PHE:C	1:A:356:PHE:CD1	0.51	2.87	29	1
1:A:327:ARG:CD	1:A:327:ARG:C	0.51	2.83	20	5
1:A:300:ASN:N	1:A:300:ASN:OD1	0.51	2.42	8	5
1:A:298:GLN:NE2	1:A:298:GLN:C	0.51	2.69	9	1
1:A:252:ARG:CZ	1:A:257:ARG:CZ	0.51	2.88	23	1
1:A:201:ASN:OD1	1:A:215:TYR:CE2	0.51	2.63	25	1
1:A:192:LEU:N	1:A:192:LEU:CD2	0.51	2.70	25	1
1:A:349:VAL:O	1:A:351:ARG:NE	0.51	2.41	10	5
1:A:315:TYR:CD1	1:A:315:TYR:O	0.51	2.64	6	1
1:A:274:ARG:NH2	1:A:304:ARG:HH21	0.51	2.03	9	1
1:A:367:GLN:CA	1:A:367:GLN:HE21	0.51	2.19	9	1
1:A:317:PRO:C	1:A:319:TYR:N	0.51	2.68	21	2
1:A:191:TYR:C	1:A:192:LEU:HD22	0.51	2.31	21	2
1:A:296:PHE:O	1:A:298:GLN:N	0.51	2.44	30	14
1:A:338:TYR:CD1	1:A:338:TYR:C	0.51	2.88	13	5
1:A:196:ASP:OD1	1:A:197:THR:N	0.51	2.43	9	1
1:A:253:HIS:C	1:A:255:GLU:N	0.51	2.68	18	2
1:A:318:LEU:N	1:A:318:LEU:CD1	0.51	2.74	22	1
1:A:233:GLN:OE1	1:A:233:GLN:N	0.51	2.42	6	1
1:A:258:PHE:C	1:A:258:PHE:CD1	0.51	2.89	19	9
1:A:220:VAL:HG21	1:A:265:LEU:HD13	0.51	1.82	15	5
1:A:356:PHE:CD1	1:A:357:GLN:N	0.51	2.79	25	1
1:A:316:ASP:O	1:A:318:LEU:N	0.50	2.44	24	6
1:A:360:ASP:C	1:A:362:LEU:N	0.50	2.69	29	2
1:A:308:PHE:CG	1:A:340:GLU:OE2	0.50	2.64	25	1
1:A:231:MET:HE3	1:A:234:HIS:CE1	0.50	2.42	7	3
1:A:237:PHE:CD1	1:A:237:PHE:N	0.50	2.80	2	2
1:A:359:TRP:O	1:A:360:ASP:CB	0.50	2.60	24	7
1:A:238:LEU:CD2	1:A:257:ARG:NE	0.50	2.75	29	1
1:A:289:CYS:C	1:A:291:GLY:N	0.50	2.68	11	13
1:A:290:ALA:CB	1:A:322:ALA:HB1	0.50	2.35	8	1
1:A:222:ARG:NH2	1:A:271:GLN:CD	0.50	2.70	9	1
1:A:238:LEU:CD2	1:A:257:ARG:NH1	0.50	2.74	10	1
1:A:201:ASN:ND2	1:A:215:TYR:CG	0.50	2.79	19	1
1:A:307:ILE:C	1:A:308:PHE:CD1	0.50	2.89	18	2
1:A:282:SER:OG	1:A:319:TYR:CD1	0.50	2.64	24	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:228:TRP:NE1	1:A:274:ARG:NH1	0.50	2.59	30	1
1:A:339:ASP:OD1	1:A:340:GLU:N	0.50	2.44	24	2
1:A:292:GLU:N	1:A:292:GLU:OE1	0.50	2.45	8	1
1:A:193:MET:CE	1:A:237:PHE:CD2	0.50	2.94	25	1
1:A:286:SER:HA	1:A:290:ALA:HB3	0.50	1.83	5	27
1:A:231:MET:HE2	1:A:234:HIS:CD2	0.50	2.42	4	1
1:A:270:ALA:HB3	1:A:271:GLN:HE21	0.50	1.67	5	1
1:A:214:THR:O	1:A:215:TYR:CD2	0.50	2.65	6	4
1:A:351:ARG:HH11	1:A:351:ARG:H	0.50	1.47	25	2
1:A:268:ASP:C	1:A:270:ALA:N	0.50	2.70	12	12
1:A:227:THR:HG22	1:A:228:TRP:N	0.50	2.21	7	11
1:A:194:ASP:OD1	1:A:196:ASP:N	0.50	2.45	19	1
1:A:345:TRP:O	1:A:349:VAL:O	0.49	2.30	22	22
1:A:201:ASN:CG	1:A:215:TYR:CD2	0.49	2.89	16	1
1:A:240:ASN:O	1:A:252:ARG:NE	0.49	2.45	27	1
1:A:300:ASN:HD22	1:A:303:VAL:HG13	0.49	1.67	30	1
1:A:240:ASN:H	1:A:240:ASN:ND2	0.49	2.03	6	2
1:A:351:ARG:HH12	1:A:353:GLY:C	0.49	2.15	13	3
1:A:336:MET:SD	1:A:340:GLU:OE2	0.49	2.70	15	1
1:A:367:GLN:NE2	1:A:367:GLN:N	0.49	2.60	25	1
1:A:191:TYR:O	1:A:237:PHE:CE1	0.49	2.65	27	1
1:A:222:ARG:HH21	1:A:231:MET:CE	0.49	2.20	29	1
1:A:201:ASN:OD1	1:A:215:TYR:CD2	0.49	2.65	25	1
1:A:218:TYR:O	1:A:236:GLY:O	0.49	2.30	17	28
1:A:223:LEU:N	1:A:228:TRP:CZ3	0.49	2.80	30	25
1:A:214:THR:O	1:A:215:TYR:CD1	0.49	2.65	2	2
1:A:221:GLU:HG3	1:A:230:LEU:HD22	0.49	1.83	30	13
1:A:318:LEU:C	1:A:320:LYS:N	0.49	2.68	16	4
1:A:255:GLU:CD	1:A:255:GLU:N	0.49	2.69	8	6
1:A:364:GLU:C	1:A:367:GLN:OE1	0.49	2.56	17	1
1:A:325:MET:C	1:A:325:MET:SD	0.49	2.95	2	2
1:A:349:VAL:O	1:A:349:VAL:HG12	0.49	2.07	10	1
1:A:274:ARG:HH11	1:A:304:ARG:NH2	0.49	2.06	2	1
1:A:304:ARG:NH1	1:A:330:GLY:O	0.49	2.45	14	1
1:A:311:ARG:C	1:A:312:ILE:HD13	0.49	2.33	22	1
1:A:214:THR:H	1:A:240:ASN:HD21	0.49	1.47	1	1
1:A:235:MET:CG	1:A:236:GLY:N	0.49	2.75	13	11
1:A:259:LEU:H	1:A:259:LEU:CD2	0.49	2.20	5	6
1:A:338:TYR:CD2	1:A:339:ASP:N	0.49	2.80	5	3
1:A:280:SER:O	1:A:311:ARG:NH1	0.49	2.44	26	2
1:A:352:GLN:N	1:A:352:GLN:OE1	0.49	2.46	7	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:311:ARG:C	1:A:312:ILE:HD12	0.49	2.33	21	1
1:A:358:PRO:O	1:A:359:TRP:O	0.49	2.30	28	1
1:A:296:PHE:CE2	1:A:300:ASN:ND2	0.49	2.80	30	1
1:A:238:LEU:HD21	1:A:261:LEU:HD13	0.49	1.84	5	2
1:A:306:ARG:HH12	1:A:332:GLN:NE2	0.49	2.05	20	2
1:A:363:GLU:O	1:A:367:GLN:NE2	0.49	2.46	8	1
1:A:268:ASP:C	1:A:270:ALA:H	0.49	2.16	5	12
1:A:282:SER:HG	1:A:319:TYR:CB	0.49	2.21	9	1
1:A:318:LEU:O	1:A:320:LYS:N	0.49	2.45	16	3
1:A:240:ASN:N	1:A:240:ASN:OD1	0.49	2.43	22	1
1:A:218:TYR:CE2	1:A:261:LEU:HD11	0.48	2.43	3	1
1:A:285:PHE:CD2	1:A:318:LEU:HD22	0.48	2.43	3	1
1:A:222:ARG:NH2	1:A:271:GLN:HE21	0.48	2.06	7	1
1:A:274:ARG:NH2	1:A:304:ARG:HE	0.48	2.06	15	1
1:A:309:ALA:C	1:A:336:MET:SD	0.48	2.95	22	1
1:A:340:GLU:O	1:A:344:CYS:SG	0.48	2.70	9	1
1:A:285:PHE:O	1:A:288:GLY:N	0.48	2.46	3	6
1:A:351:ARG:HH21	1:A:353:GLY:C	0.48	2.17	7	4
1:A:351:ARG:HE	1:A:352:GLN:H	0.48	1.51	17	1
1:A:192:LEU:HD13	1:A:350:TYR:CD1	0.48	2.43	24	1
1:A:324:GLN:NE2	1:A:376:ILE:HG22	0.48	2.23	30	1
1:A:307:ILE:HG22	1:A:308:PHE:N	0.48	2.22	18	13
1:A:300:ASN:ND2	1:A:300:ASN:N	0.48	2.60	11	2
1:A:274:ARG:CD	1:A:274:ARG:C	0.48	2.87	14	1
1:A:294:ARG:NE	1:A:298:GLN:OE1	0.48	2.46	26	1
1:A:350:TYR:C	1:A:350:TYR:CD1	0.48	2.87	28	1
1:A:364:GLU:CD	1:A:364:GLU:N	0.48	2.71	13	2
1:A:308:PHE:CE2	1:A:340:GLU:OE2	0.48	2.67	2	1
1:A:197:THR:HG23	1:A:198:PHE:N	0.48	2.23	5	1
1:A:196:ASP:OD1	1:A:196:ASP:N	0.48	2.46	12	1
1:A:337:THR:C	1:A:339:ASP:N	0.48	2.71	15	1
1:A:237:PHE:C	1:A:238:LEU:HD22	0.48	2.33	21	1
1:A:274:ARG:NH1	1:A:276:THR:OG1	0.48	2.46	24	1
1:A:311:ARG:HH21	1:A:365:HIS:CD2	0.48	2.27	4	1
1:A:321:GLU:N	1:A:321:GLU:OE1	0.48	2.47	12	1
1:A:305:LEU:O	1:A:331:ALA:HB1	0.48	2.09	29	2
1:A:219:GLU:OE1	1:A:230:LEU:HD21	0.48	2.08	10	2
1:A:253:HIS:CD2	1:A:253:HIS:N	0.48	2.80	19	5
1:A:306:ARG:NH2	1:A:332:GLN:HE22	0.48	2.06	5	1
1:A:294:ARG:CD	1:A:294:ARG:C	0.48	2.87	6	1
1:A:311:ARG:NH1	1:A:313:TYR:CE2	0.48	2.82	8	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:229:VAL:O	1:A:229:VAL:CG2	0.48	2.62	30	15
1:A:351:ARG:HH12	1:A:353:GLY:CA	0.48	2.20	13	1
1:A:239:CYS:C	1:A:240:ASN:HD22	0.48	2.16	28	1
1:A:281:TRP:CD1	1:A:281:TRP:O	0.48	2.67	15	2
1:A:305:LEU:O	1:A:331:ALA:CB	0.48	2.62	29	1
1:A:280:SER:O	1:A:281:TRP:CB	0.47	2.62	17	11
1:A:281:TRP:O	1:A:282:SER:O	0.47	2.32	3	11
1:A:214:THR:HG22	1:A:215:TYR:N	0.47	2.23	15	3
1:A:198:PHE:CE2	1:A:202:PHE:CD2	0.47	3.01	28	1
1:A:307:ILE:HD11	1:A:331:ALA:HB1	0.47	1.86	4	2
1:A:346:ASP:O	1:A:350:TYR:CE1	0.47	2.67	10	1
1:A:315:TYR:CD1	1:A:315:TYR:N	0.47	2.77	24	1
1:A:326:LEU:C	1:A:326:LEU:CD2	0.47	2.88	6	16
1:A:316:ASP:C	1:A:318:LEU:N	0.47	2.72	18	6
1:A:198:PHE:CE1	1:A:202:PHE:CE2	0.47	3.02	21	1
1:A:252:ARG:NH2	1:A:257:ARG:NH2	0.47	2.63	23	1
1:A:351:ARG:HE	1:A:351:ARG:CA	0.47	2.22	22	3
1:A:351:ARG:HE	1:A:354:CYS:CB	0.47	2.23	15	1
1:A:294:ARG:CZ	1:A:298:GLN:OE1	0.47	2.62	25	2
1:A:304:ARG:NH2	1:A:330:GLY:O	0.47	2.48	25	1
1:A:338:TYR:CE2	1:A:342:GLU:OE2	0.47	2.68	26	1
1:A:364:GLU:CG	1:A:365:HIS:N	0.47	2.77	28	1
1:A:286:SER:C	1:A:288:GLY:H	0.47	2.18	27	12
1:A:281:TRP:O	1:A:282:SER:C	0.47	2.58	26	13
1:A:239:CYS:O	1:A:254:ALA:HB2	0.47	2.10	4	1
1:A:337:THR:O	1:A:339:ASP:N	0.47	2.48	15	1
1:A:359:TRP:HE1	1:A:362:LEU:CA	0.47	2.22	24	2
1:A:351:ARG:CG	1:A:352:GLN:N	0.47	2.78	28	1
1:A:214:THR:CG2	1:A:215:TYR:N	0.47	2.78	15	3
1:A:221:GLU:OE1	1:A:274:ARG:O	0.47	2.33	28	14
1:A:227:THR:CG2	1:A:228:TRP:N	0.47	2.78	24	7
1:A:286:SER:O	1:A:287:TRP:C	0.47	2.58	22	24
1:A:286:SER:OG	1:A:325:MET:CE	0.47	2.62	15	4
1:A:198:PHE:CD1	1:A:198:PHE:C	0.47	2.93	24	9
1:A:225:ASN:O	1:A:225:ASN:OD1	0.47	2.33	9	2
1:A:239:CYS:SG	1:A:240:ASN:OD1	0.46	2.73	22	1
1:A:274:ARG:HH21	1:A:304:ARG:NH2	0.46	2.09	28	1
1:A:232:ASP:OD1	1:A:232:ASP:N	0.46	2.48	10	2
1:A:281:TRP:CD2	1:A:281:TRP:C	0.46	2.90	3	1
1:A:281:TRP:CD2	1:A:282:SER:O	0.46	2.68	3	1
1:A:327:ARG:NE	1:A:377:LEU:HD21	0.46	2.25	13	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:257:ARG:N	1:A:257:ARG:CD	0.46	2.78	15	1
1:A:359:TRP:HE1	1:A:362:LEU:CB	0.46	2.22	24	2
1:A:296:PHE:CZ	1:A:300:ASN:CG	0.46	2.93	30	1
1:A:333:VAL:CG2	1:A:334:SER:N	0.46	2.77	28	11
1:A:361:GLY:O	1:A:365:HIS:CD2	0.46	2.68	1	2
1:A:314:ASP:C	1:A:316:ASP:H	0.46	2.19	15	9
1:A:315:TYR:N	1:A:315:TYR:CD1	0.46	2.82	3	1
1:A:281:TRP:CD1	1:A:282:SER:O	0.46	2.69	9	4
1:A:367:GLN:CD	1:A:367:GLN:C	0.46	2.82	12	2
1:A:271:GLN:NE2	1:A:271:GLN:N	0.46	2.62	28	1
1:A:312:ILE:HG21	1:A:319:TYR:CE2	0.46	2.46	4	1
1:A:376:ILE:N	1:A:376:ILE:CD1	0.46	2.78	29	2
1:A:234:HIS:CE1	1:A:265:LEU:O	0.46	2.69	5	1
1:A:340:GLU:N	1:A:340:GLU:OE1	0.46	2.49	12	1
1:A:224:ASP:O	1:A:225:ASN:OD1	0.46	2.34	1	6
1:A:297:LEU:HD21	1:A:305:LEU:HB3	0.46	1.87	9	1
1:A:357:GLN:N	1:A:357:GLN:CD	0.46	2.73	25	2
1:A:229:VAL:O	1:A:229:VAL:HG23	0.46	2.10	30	2
1:A:376:ILE:N	1:A:376:ILE:HD12	0.46	2.26	29	1
1:A:258:PHE:CD1	1:A:258:PHE:C	0.46	2.93	8	6
1:A:351:ARG:H	1:A:351:ARG:CZ	0.46	2.23	13	2
1:A:235:MET:HE2	1:A:347:THR:HG22	0.46	1.87	9	2
1:A:197:THR:CG2	1:A:198:PHE:N	0.46	2.78	5	1
1:A:240:ASN:OD1	1:A:240:ASN:N	0.46	2.48	14	2
1:A:200:PHE:O	1:A:200:PHE:CD1	0.46	2.68	25	1
1:A:214:THR:N	1:A:240:ASN:HD21	0.46	2.09	1	1
1:A:221:GLU:CD	1:A:274:ARG:O	0.46	2.59	13	23
1:A:316:ASP:C	1:A:318:LEU:H	0.46	2.18	24	6
1:A:240:ASN:CB	1:A:254:ALA:N	0.46	2.79	16	1
1:A:339:ASP:O	1:A:342:GLU:N	0.46	2.49	22	1
1:A:296:PHE:CD1	1:A:296:PHE:O	0.46	2.69	1	2
1:A:279:ILE:CG1	1:A:280:SER:N	0.46	2.79	9	8
1:A:282:SER:OG	1:A:319:TYR:CD2	0.46	2.63	6	1
1:A:370:SER:OG	1:A:371:GLY:N	0.46	2.49	17	1
1:A:281:TRP:HE1	1:A:311:ARG:NH1	0.46	2.08	24	1
1:A:214:THR:H	1:A:240:ASN:ND2	0.45	2.09	22	3
1:A:253:HIS:O	1:A:255:GLU:N	0.45	2.50	18	1
1:A:300:ASN:CG	1:A:300:ASN:O	0.45	2.58	30	1
1:A:308:PHE:CD1	1:A:340:GLU:OE2	0.45	2.70	25	2
1:A:364:GLU:O	1:A:365:HIS:C	0.45	2.59	12	2
1:A:360:ASP:C	1:A:362:LEU:H	0.45	2.19	22	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:228:TRP:CD1	1:A:274:ARG:NH1	0.45	2.84	17	1
1:A:318:LEU:O	1:A:321:GLU:N	0.45	2.47	22	1
1:A:351:ARG:NH2	1:A:353:GLY:CA	0.45	2.79	18	8
1:A:292:GLU:OE1	1:A:292:GLU:CA	0.45	2.63	8	1
1:A:312:ILE:CG2	1:A:319:TYR:OH	0.45	2.64	15	2
1:A:274:ARG:NE	1:A:306:ARG:HH21	0.45	2.09	12	1
1:A:307:ILE:O	1:A:308:PHE:CG	0.45	2.70	15	1
1:A:285:PHE:CE1	1:A:286:SER:OG	0.45	2.65	29	1
1:A:274:ARG:CZ	1:A:306:ARG:NH2	0.45	2.80	12	1
1:A:370:SER:OG	1:A:374:ARG:NH1	0.45	2.49	30	1
1:A:220:VAL:C	1:A:221:GLU:OE1	0.45	2.60	24	10
1:A:326:LEU:O	1:A:329:ALA:N	0.45	2.45	1	3
1:A:220:VAL:C	1:A:221:GLU:OE2	0.45	2.60	29	15
1:A:373:LEU:HD22	1:A:376:ILE:HD12	0.45	1.88	6	1
1:A:337:THR:O	1:A:338:TYR:C	0.45	2.60	9	4
1:A:336:MET:HE2	1:A:341:PHE:CE2	0.45	2.47	22	1
1:A:327:ARG:C	1:A:327:ARG:HE	0.45	2.19	29	1
1:A:347:THR:O	1:A:350:TYR:CE2	0.45	2.70	1	1
1:A:345:TRP:NE1	1:A:351:ARG:CD	0.45	2.80	13	1
1:A:265:LEU:O	1:A:266:GLN:C	0.45	2.60	5	17
1:A:363:GLU:O	1:A:366:SER:N	0.45	2.49	6	2
1:A:224:ASP:O	1:A:225:ASN:CG	0.45	2.59	10	2
1:A:259:LEU:N	1:A:259:LEU:CD2	0.45	2.79	22	3
1:A:306:ARG:HH22	1:A:332:GLN:HE22	0.45	1.55	5	1
1:A:258:PHE:CE1	1:A:262:VAL:HG21	0.45	2.46	24	1
1:A:314:ASP:C	1:A:316:ASP:N	0.45	2.75	21	9
1:A:369:LEU:CD2	1:A:372:ARG:NH2	0.45	2.80	2	1
1:A:268:ASP:O	1:A:271:GLN:OE1	0.45	2.34	18	3
1:A:235:MET:SD	1:A:347:THR:CG2	0.45	3.05	11	4
1:A:224:ASP:O	1:A:225:ASN:ND2	0.45	2.50	10	1
1:A:232:ASP:C	1:A:234:HIS:H	0.45	2.20	12	6
1:A:351:ARG:O	1:A:351:ARG:CG	0.45	2.64	26	1
1:A:285:PHE:O	1:A:286:SER:C	0.45	2.60	25	8
1:A:262:VAL:N	1:A:263:PRO:HD2	0.45	2.27	16	8
1:A:296:PHE:CE1	1:A:300:ASN:OD1	0.44	2.71	3	2
1:A:272:ILE:O	1:A:272:ILE:HG23	0.44	2.12	8	3
1:A:367:GLN:OE1	1:A:367:GLN:CA	0.44	2.65	8	2
1:A:307:ILE:CD1	1:A:331:ALA:HB1	0.44	2.42	15	1
1:A:268:ASP:O	1:A:271:GLN:NE2	0.44	2.49	28	1
1:A:289:CYS:O	1:A:290:ALA:C	0.44	2.61	29	16
1:A:222:ARG:HH21	1:A:271:GLN:HE21	0.44	1.54	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:298:GLN:C	1:A:298:GLN:CD	0.44	2.85	9	1
1:A:312:ILE:CD1	1:A:312:ILE:N	0.44	2.78	24	1
1:A:343:TYR:O	1:A:347:THR:OG1	0.44	2.36	25	7
1:A:350:TYR:CD1	1:A:350:TYR:C	0.44	2.95	7	1
1:A:220:VAL:O	1:A:231:MET:SD	0.44	2.75	30	1
1:A:372:ARG:O	1:A:373:LEU:C	0.44	2.61	11	24
1:A:218:TYR:CE2	1:A:236:GLY:C	0.44	2.96	27	2
1:A:327:ARG:HH11	1:A:377:LEU:CD1	0.44	2.18	16	1
1:A:296:PHE:CE1	1:A:300:ASN:CG	0.44	2.95	30	1
1:A:217:CYS:SG	1:A:278:PHE:O	0.44	2.68	11	4
1:A:340:GLU:CD	1:A:340:GLU:C	0.44	2.85	15	2
1:A:274:ARG:HE	1:A:306:ARG:NH1	0.44	2.09	23	1
1:A:240:ASN:ND2	1:A:253:HIS:N	0.44	2.65	25	1
1:A:321:GLU:H	1:A:321:GLU:CD	0.44	2.20	28	1
1:A:321:GLU:CD	1:A:321:GLU:N	0.44	2.75	28	1
1:A:351:ARG:CG	1:A:352:GLN:H	0.44	2.25	28	1
1:A:324:GLN:HE22	1:A:377:LEU:C	0.44	2.20	1	1
1:A:333:VAL:HG22	1:A:334:SER:N	0.44	2.27	1	7
1:A:240:ASN:O	1:A:252:ARG:O	0.44	2.35	16	2
1:A:259:LEU:HD11	1:A:296:PHE:CD2	0.44	2.48	23	2
1:A:304:ARG:CG	1:A:305:LEU:N	0.44	2.81	21	2
1:A:195:PRO:O	1:A:199:THR:HG23	0.44	2.12	23	1
1:A:254:ALA:C	1:A:256:LEU:N	0.44	2.75	26	1
1:A:299:GLU:OE1	1:A:299:GLU:C	0.44	2.61	30	1
1:A:272:ILE:O	1:A:272:ILE:CG2	0.44	2.66	7	12
1:A:191:TYR:O	1:A:192:LEU:O	0.44	2.36	3	15
1:A:258:PHE:CE1	1:A:262:VAL:HG22	0.44	2.47	1	4
1:A:290:ALA:O	1:A:291:GLY:C	0.44	2.61	16	9
1:A:364:GLU:OE1	1:A:364:GLU:CA	0.44	2.64	5	1
1:A:359:TRP:O	1:A:360:ASP:OD1	0.44	2.36	23	2
1:A:360:ASP:O	1:A:364:GLU:OE1	0.44	2.36	13	1
1:A:218:TYR:CD1	1:A:219:GLU:N	0.44	2.86	14	3
1:A:278:PHE:CE2	1:A:344:CYS:CB	0.44	3.01	17	1
1:A:253:HIS:H	1:A:253:HIS:CD2	0.44	2.31	28	1
1:A:233:GLN:H	1:A:233:GLN:NE2	0.44	2.10	30	1
1:A:342:GLU:OE2	1:A:342:GLU:O	0.44	2.36	30	1
1:A:252:ARG:C	1:A:253:HIS:CD2	0.44	2.96	1	2
1:A:358:PRO:CB	1:A:362:LEU:HD23	0.44	2.43	1	1
1:A:362:LEU:C	1:A:362:LEU:HD13	0.44	2.37	3	4
1:A:373:LEU:O	1:A:374:ARG:C	0.44	2.61	29	3
1:A:268:ASP:OD1	1:A:268:ASP:N	0.44	2.51	7	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:363:GLU:O	1:A:367:GLN:OE1	0.44	2.35	19	2
1:A:198:PHE:CZ	1:A:202:PHE:CE2	0.44	3.06	11	2
1:A:258:PHE:O	1:A:259:LEU:C	0.43	2.61	5	8
1:A:351:ARG:C	1:A:353:GLY:N	0.43	2.76	1	2
1:A:234:HIS:N	1:A:234:HIS:CD2	0.43	2.86	7	1
1:A:277:TRP:CE2	1:A:305:LEU:HD11	0.43	2.48	26	1
1:A:201:ASN:OD1	1:A:280:SER:CB	0.43	2.66	28	1
1:A:260:ASP:N	1:A:260:ASP:OD1	0.43	2.49	5	1
1:A:300:ASN:N	1:A:300:ASN:HD22	0.43	2.11	23	2
1:A:261:LEU:HD21	1:A:265:LEU:HD21	0.43	1.90	18	1
1:A:335:ILE:O	1:A:335:ILE:CG2	0.43	2.66	24	2
1:A:296:PHE:O	1:A:297:LEU:C	0.43	2.61	30	12
1:A:254:ALA:O	1:A:255:GLU:C	0.43	2.61	21	14
1:A:296:PHE:O	1:A:300:ASN:OD1	0.43	2.35	30	1
1:A:231:MET:CE	1:A:234:HIS:CE1	0.43	3.01	18	3
1:A:289:CYS:O	1:A:292:GLU:OE2	0.43	2.36	11	1
1:A:281:TRP:CZ3	1:A:313:TYR:CB	0.43	3.02	13	3
1:A:297:LEU:HD11	1:A:331:ALA:HB2	0.43	1.90	16	1
1:A:285:PHE:CD1	1:A:322:ALA:HB2	0.43	2.48	19	1
1:A:372:ARG:HH11	1:A:372:ARG:CG	0.43	2.26	25	1
1:A:356:PHE:O	1:A:357:GLN:C	0.43	2.61	29	2
1:A:194:ASP:OD1	1:A:197:THR:OG1	0.43	2.37	30	1
1:A:230:LEU:HD13	1:A:231:MET:H	0.43	1.74	2	16
1:A:346:ASP:OD1	1:A:346:ASP:C	0.43	2.62	2	3
1:A:232:ASP:O	1:A:232:ASP:OD1	0.43	2.36	7	1
1:A:299:GLU:C	1:A:300:ASN:OD1	0.43	2.62	8	3
1:A:240:ASN:N	1:A:240:ASN:ND2	0.43	2.65	18	1
1:A:363:GLU:O	1:A:366:SER:CB	0.43	2.67	19	1
1:A:274:ARG:CZ	1:A:306:ARG:NH1	0.43	2.81	23	1
1:A:356:PHE:C	1:A:357:GLN:OE1	0.43	2.62	25	1
1:A:366:SER:O	1:A:370:SER:OG	0.43	2.37	4	6
1:A:372:ARG:HG3	1:A:376:ILE:HD11	0.43	1.89	4	1
1:A:266:GLN:O	1:A:268:ASP:OD1	0.43	2.36	6	1
1:A:306:ARG:HH12	1:A:332:GLN:CD	0.43	2.22	6	1
1:A:225:ASN:OD1	1:A:225:ASN:C	0.43	2.60	14	2
1:A:191:TYR:CD2	1:A:235:MET:O	0.43	2.71	30	1
1:A:191:TYR:O	1:A:192:LEU:C	0.43	2.61	1	6
1:A:332:GLN:NE2	1:A:333:VAL:N	0.43	2.67	1	1
1:A:343:TYR:O	1:A:346:ASP:OD1	0.43	2.36	4	1
1:A:307:ILE:CG2	1:A:308:PHE:N	0.43	2.82	29	3
1:A:267:LEU:O	1:A:268:ASP:OD1	0.43	2.36	9	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:366:SER:CB	1:A:367:GLN:NE2	0.43	2.82	18	2
1:A:364:GLU:C	1:A:366:SER:N	0.43	2.75	12	2
1:A:362:LEU:O	1:A:366:SER:OG	0.43	2.37	21	2
1:A:252:ARG:NH2	1:A:257:ARG:CZ	0.43	2.82	23	1
1:A:350:TYR:CE1	1:A:353:GLY:N	0.43	2.87	27	1
1:A:363:GLU:O	1:A:366:SER:OG	0.43	2.37	27	1
1:A:298:GLN:CD	1:A:298:GLN:C	0.43	2.86	12	14
1:A:286:SER:HG	1:A:325:MET:CE	0.43	2.27	11	1
1:A:351:ARG:HE	1:A:352:GLN:N	0.43	2.12	17	1
1:A:274:ARG:NH2	1:A:304:ARG:HH11	0.43	2.11	21	1
1:A:231:MET:HE1	1:A:273:TYR:OH	0.43	2.13	28	1
1:A:336:MET:SD	1:A:341:PHE:CD2	0.43	3.12	30	1
1:A:283:PRO:O	1:A:284:CYS:O	0.43	2.37	10	3
1:A:367:GLN:O	1:A:370:SER:OG	0.43	2.37	23	4
1:A:306:ARG:CZ	1:A:332:GLN:NE2	0.43	2.82	5	1
1:A:363:GLU:O	1:A:367:GLN:CD	0.43	2.62	8	2
1:A:239:CYS:O	1:A:240:ASN:C	0.43	2.61	25	4
1:A:324:GLN:O	1:A:328:ASP:CG	0.43	2.62	12	1
1:A:356:PHE:CD1	1:A:356:PHE:C	0.43	2.94	19	1
1:A:195:PRO:CB	1:A:351:ARG:NH2	0.43	2.81	5	1
1:A:192:LEU:O	1:A:193:MET:C	0.43	2.62	6	7
1:A:252:ARG:HH11	1:A:252:ARG:CG	0.43	2.27	7	1
1:A:284:CYS:O	1:A:285:PHE:C	0.43	2.62	16	1
1:A:317:PRO:O	1:A:318:LEU:C	0.43	2.62	30	3
1:A:335:ILE:O	1:A:335:ILE:HG23	0.43	2.14	24	2
1:A:315:TYR:C	1:A:316:ASP:OD1	0.42	2.62	28	3
1:A:270:ALA:C	1:A:271:GLN:OE1	0.42	2.62	14	1
1:A:281:TRP:CE3	1:A:313:TYR:CD2	0.42	3.06	30	1
1:A:192:LEU:O	1:A:193:MET:O	0.42	2.37	4	2
1:A:221:GLU:OE2	1:A:274:ARG:O	0.42	2.37	25	2
1:A:346:ASP:O	1:A:350:TYR:CE2	0.42	2.72	8	1
1:A:198:PHE:CE2	1:A:202:PHE:CD1	0.42	3.07	14	1
1:A:265:LEU:N	1:A:265:LEU:HD12	0.42	2.29	16	1
1:A:195:PRO:O	1:A:199:THR:OG1	0.42	2.37	24	2
1:A:360:ASP:OD1	1:A:363:GLU:OE1	0.42	2.36	26	1
1:A:253:HIS:O	1:A:254:ALA:C	0.42	2.62	4	2
1:A:267:LEU:C	1:A:268:ASP:OD1	0.42	2.62	7	4
1:A:367:GLN:NE2	1:A:367:GLN:CA	0.42	2.82	9	1
1:A:267:LEU:O	1:A:268:ASP:CG	0.42	2.62	18	1
1:A:351:ARG:HH21	1:A:353:GLY:N	0.42	2.12	21	2
1:A:221:GLU:OE2	1:A:221:GLU:N	0.42	2.52	23	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:192:LEU:CD2	1:A:192:LEU:N	0.42	2.82	30	1
1:A:194:ASP:OD2	1:A:197:THR:CB	0.42	2.68	3	4
1:A:335:ILE:O	1:A:336:MET:C	0.42	2.62	15	5
1:A:336:MET:HE3	1:A:341:PHE:CE2	0.42	2.50	5	1
1:A:192:LEU:HD13	1:A:350:TYR:H	0.42	1.74	8	1
1:A:358:PRO:CB	1:A:362:LEU:HD21	0.42	2.45	11	1
1:A:271:GLN:N	1:A:271:GLN:OE1	0.42	2.52	16	1
1:A:316:ASP:O	1:A:319:TYR:CD2	0.42	2.72	20	1
1:A:240:ASN:CG	1:A:252:ARG:O	0.42	2.62	5	5
1:A:338:TYR:CZ	1:A:342:GLU:CD	0.42	2.97	5	1
1:A:286:SER:CA	1:A:291:GLY:H	0.42	2.28	6	2
1:A:288:GLY:O	1:A:292:GLU:OE1	0.42	2.36	6	1
1:A:361:GLY:O	1:A:362:LEU:C	0.42	2.62	6	2
1:A:340:GLU:N	1:A:340:GLU:CD	0.42	2.77	12	2
1:A:297:LEU:HD21	1:A:331:ALA:HB2	0.42	1.87	11	1
1:A:194:ASP:OD1	1:A:197:THR:CB	0.42	2.67	30	2
1:A:307:ILE:HD13	1:A:326:LEU:HD21	0.42	1.91	22	3
1:A:194:ASP:OD1	1:A:194:ASP:C	0.42	2.62	13	2
1:A:270:ALA:C	1:A:271:GLN:CD	0.42	2.87	19	2
1:A:194:ASP:OD1	1:A:196:ASP:OD1	0.42	2.37	24	1
1:A:281:TRP:CE3	1:A:313:TYR:CE2	0.42	3.07	30	1
1:A:194:ASP:OD2	1:A:197:THR:OG1	0.42	2.37	3	1
1:A:290:ALA:O	1:A:293:VAL:N	0.42	2.51	7	1
1:A:339:ASP:OD1	1:A:339:ASP:C	0.42	2.63	10	2
1:A:271:GLN:CD	1:A:271:GLN:N	0.42	2.78	13	1
1:A:357:GLN:CD	1:A:357:GLN:H	0.42	2.21	14	1
1:A:214:THR:O	1:A:240:ASN:OD1	0.42	2.37	23	2
1:A:323:LEU:O	1:A:324:GLN:C	0.42	2.63	20	5
1:A:327:ARG:HH21	1:A:377:LEU:HD21	0.42	1.71	2	1
1:A:307:ILE:C	1:A:308:PHE:CG	0.42	2.97	19	4
1:A:221:GLU:OE2	1:A:276:THR:OG1	0.42	2.37	15	2
1:A:214:THR:O	1:A:240:ASN:CG	0.42	2.63	18	1
1:A:336:MET:HE2	1:A:341:PHE:CZ	0.42	2.49	22	1
1:A:360:ASP:O	1:A:363:GLU:OE2	0.42	2.37	24	1
1:A:372:ARG:CG	1:A:372:ARG:NH1	0.42	2.80	25	1
1:A:324:GLN:O	1:A:328:ASP:OD1	0.42	2.38	3	1
1:A:282:SER:OG	1:A:319:TYR:CB	0.42	2.68	9	1
1:A:326:LEU:HD23	1:A:326:LEU:O	0.42	2.15	9	2
1:A:337:THR:OG1	1:A:340:GLU:OE1	0.42	2.37	18	1
1:A:201:ASN:C	1:A:201:ASN:ND2	0.42	2.78	29	1
1:A:366:SER:O	1:A:370:SER:CB	0.42	2.68	8	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:339:ASP:O	1:A:340:GLU:C	0.42	2.63	22	1
1:A:299:GLU:C	1:A:299:GLU:CD	0.42	2.87	30	1
1:A:258:PHE:O	1:A:262:VAL:HG23	0.41	2.15	28	3
1:A:351:ARG:CA	1:A:351:ARG:HE	0.41	2.27	7	1
1:A:193:MET:SD	1:A:237:PHE:CG	0.41	3.13	10	1
1:A:359:TRP:C	1:A:360:ASP:CG	0.41	2.87	14	1
1:A:196:ASP:CG	1:A:197:THR:N	0.41	2.76	16	1
1:A:264:SER:C	1:A:266:GLN:H	0.41	2.21	18	1
1:A:345:TRP:CH2	1:A:349:VAL:HG11	0.41	2.50	23	1
1:A:372:ARG:O	1:A:375:ALA:CB	0.41	2.68	29	1
1:A:299:GLU:OE1	1:A:299:GLU:O	0.41	2.37	30	1
1:A:301:THR:C	1:A:303:VAL:N	0.41	2.78	30	1
1:A:240:ASN:OD1	1:A:252:ARG:O	0.41	2.37	5	2
1:A:351:ARG:NE	1:A:351:ARG:CA	0.41	2.83	7	1
1:A:233:GLN:O	1:A:234:HIS:CD2	0.41	2.72	14	2
1:A:262:VAL:O	1:A:263:PRO:C	0.41	2.63	12	2
1:A:262:VAL:O	1:A:265:LEU:N	0.41	2.50	12	1
1:A:267:LEU:C	1:A:268:ASP:CG	0.41	2.88	18	2
1:A:351:ARG:CZ	1:A:351:ARG:H	0.41	2.28	29	1
1:A:301:THR:C	1:A:303:VAL:H	0.41	2.21	30	1
1:A:376:ILE:CD1	1:A:376:ILE:H	0.41	2.27	4	1
1:A:318:LEU:O	1:A:319:TYR:C	0.41	2.63	16	1
1:A:261:LEU:O	1:A:262:VAL:C	0.41	2.63	23	1
1:A:278:PHE:CD1	1:A:336:MET:SD	0.41	3.14	6	1
1:A:233:GLN:C	1:A:234:HIS:CG	0.41	2.98	28	2
1:A:286:SER:N	1:A:290:ALA:HB3	0.41	2.30	13	1
1:A:344:CYS:O	1:A:347:THR:N	0.41	2.52	19	1
1:A:222:ARG:CZ	1:A:271:GLN:CD	0.41	2.94	9	1
1:A:365:HIS:HD1	1:A:366:SER:N	0.41	2.13	23	1
1:A:316:ASP:O	1:A:316:ASP:CG	0.41	2.63	26	1
1:A:196:ASP:OD1	1:A:196:ASP:C	0.41	2.63	27	1
1:A:274:ARG:HH21	1:A:304:ARG:HE	0.41	1.58	15	1
1:A:373:LEU:C	1:A:373:LEU:CD1	0.41	2.94	19	1
1:A:191:TYR:CE2	1:A:235:MET:O	0.41	2.73	30	1
1:A:338:TYR:CE2	1:A:342:GLU:OE1	0.41	2.74	7	1
1:A:255:GLU:CG	1:A:289:CYS:SG	0.41	3.09	8	1
1:A:350:TYR:O	1:A:350:TYR:CD2	0.41	2.73	18	1
1:A:252:ARG:HH22	1:A:257:ARG:HH21	0.41	1.58	23	1
1:A:356:PHE:CG	1:A:357:GLN:N	0.41	2.89	25	1
1:A:200:PHE:CD1	1:A:200:PHE:C	0.41	2.96	26	1
1:A:252:ARG:CD	1:A:252:ARG:H	0.41	2.27	12	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:327:ARG:NH1	1:A:377:LEU:HD21	0.41	2.31	16	1
1:A:200:PHE:CD2	1:A:200:PHE:C	0.41	2.98	17	1
1:A:300:ASN:OD1	1:A:300:ASN:N	0.41	2.53	19	1
1:A:266:GLN:O	1:A:267:LEU:O	0.41	2.39	24	1
1:A:368:ALA:C	1:A:372:ARG:NH1	0.41	2.79	25	1
1:A:216:LEU:HD23	1:A:254:ALA:CB	0.41	2.46	9	2
1:A:369:LEU:N	1:A:369:LEU:HD12	0.41	2.30	5	1
1:A:218:TYR:OH	1:A:265:LEU:CD2	0.41	2.69	7	1
1:A:252:ARG:CG	1:A:252:ARG:NH1	0.41	2.81	7	1
1:A:281:TRP:CD2	1:A:282:SER:N	0.41	2.89	9	1
1:A:345:TRP:CZ2	1:A:351:ARG:CD	0.41	3.04	14	1
1:A:315:TYR:O	1:A:316:ASP:OD1	0.41	2.39	16	1
1:A:333:VAL:O	1:A:377:LEU:HD21	0.41	2.16	19	1
1:A:328:ASP:OD1	1:A:328:ASP:C	0.41	2.64	20	1
1:A:240:ASN:OD1	1:A:252:ARG:CZ	0.41	2.68	25	1
1:A:274:ARG:HH21	1:A:304:ARG:CZ	0.41	2.29	28	1
1:A:336:MET:CE	1:A:341:PHE:CZ	0.41	3.04	29	1
1:A:290:ALA:O	1:A:294:ARG:N	0.41	2.54	30	1
1:A:326:LEU:O	1:A:327:ARG:C	0.40	2.64	5	1
1:A:367:GLN:CD	1:A:367:GLN:N	0.40	2.76	6	1
1:A:202:PHE:CE1	1:A:280:SER:OG	0.40	2.74	7	1
1:A:294:ARG:C	1:A:296:PHE:N	0.40	2.79	20	1
1:A:293:VAL:CG1	1:A:294:ARG:N	0.40	2.84	22	1
1:A:325:MET:SD	1:A:325:MET:O	0.40	2.79	23	1
1:A:360:ASP:O	1:A:363:GLU:CD	0.40	2.63	24	1
1:A:201:ASN:HD21	1:A:280:SER:CB	0.40	2.28	29	1
1:A:216:LEU:HD23	1:A:254:ALA:HB1	0.40	1.93	9	1
1:A:323:LEU:HD21	1:A:373:LEU:HD11	0.40	1.94	14	1
1:A:369:LEU:O	1:A:370:SER:C	0.40	2.64	15	2
1:A:354:CYS:O	1:A:355:PRO:O	0.40	2.39	21	1
1:A:319:TYR:CD2	1:A:319:TYR:C	0.40	2.97	23	1
1:A:286:SER:OG	1:A:325:MET:SD	0.40	2.75	26	1
1:A:271:GLN:CD	1:A:273:TYR:OH	0.40	2.64	30	1
1:A:308:PHE:CE1	1:A:340:GLU:OE1	0.40	2.75	6	1
1:A:311:ARG:HH12	1:A:365:HIS:CE1	0.40	2.33	14	1
1:A:346:ASP:C	1:A:346:ASP:OD1	0.40	2.63	17	1
1:A:313:TYR:O	1:A:314:ASP:C	0.40	2.65	27	1
1:A:326:LEU:CD2	1:A:326:LEU:C	0.40	2.94	28	1
1:A:360:ASP:O	1:A:361:GLY:C	0.40	2.65	29	1
1:A:259:LEU:HD21	1:A:296:PHE:HB2	0.40	1.92	30	1
1:A:345:TRP:CD1	1:A:345:TRP:C	0.40	2.98	30	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:278:PHE:CE1	1:A:336:MET:SD	0.40	3.15	6	1
1:A:367:GLN:NE2	1:A:368:ALA:H	0.40	2.15	12	1
1:A:194:ASP:O	1:A:195:PRO:C	0.40	2.65	18	2
1:A:274:ARG:NH2	1:A:306:ARG:NE	0.40	2.70	19	1
1:A:294:ARG:O	1:A:295:ALA:C	0.40	2.65	28	1
1:A:192:LEU:N	1:A:192:LEU:HD22	0.40	2.31	30	1
1:A:255:GLU:CA	1:A:255:GLU:OE1	0.40	2.68	7	1
1:A:312:ILE:CG2	1:A:319:TYR:CE1	0.40	3.05	16	1
1:A:238:LEU:CD1	1:A:254:ALA:HB1	0.40	2.47	25	1
1:A:255:GLU:CD	1:A:255:GLU:H	0.40	2.24	28	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	165/205 (80%)	131±4 (80±2%)	25±3 (15±2%)	9±2 (6±1%)	2	21
All	All	4950/6150 (80%)	3936 (80%)	738 (15%)	276 (6%)	2	21

All 34 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	287	TRP	28
1	A	359	TRP	27
1	A	360	ASP	26
1	A	192	LEU	22
1	A	281	TRP	20
1	A	286	SER	14
1	A	269	PRO	12
1	A	314	ASP	12
1	A	282	SER	11
1	A	284	CYS	10
1	A	290	ALA	9
1	A	191	TYR	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	240	ASN	8
1	A	193	MET	7
1	A	267	LEU	7
1	A	313	TYR	6
1	A	259	LEU	5
1	A	358	PRO	5
1	A	355	PRO	5
1	A	283	PRO	5
1	A	317	PRO	4
1	A	297	LEU	4
1	A	285	PHE	4
1	A	351	ARG	3
1	A	270	ALA	3
1	A	336	MET	2
1	A	319	TYR	2
1	A	195	PRO	1
1	A	338	TYR	1
1	A	271	GLN	1
1	A	318	LEU	1
1	A	349	VAL	1
1	A	253	HIS	1
1	A	361	GLY	1

6.3.2 Protein sidechains ⓘ

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles	
1	A	146/182 (80%)	102±4 (70±3%)	44±4 (30±3%)	1	16
All	All	4380/5460 (80%)	3045 (70%)	1335 (30%)	1	16

All 117 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	229	VAL	30
1	A	230	LEU	30
1	A	275	VAL	30

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	293	VAL	30
1	A	302	HIS	30
1	A	303	VAL	30
1	A	334	SER	30
1	A	337	THR	30
1	A	282	SER	29
1	A	272	ILE	28
1	A	351	ARG	28
1	A	327	ARG	27
1	A	332	GLN	26
1	A	341	PHE	26
1	A	216	LEU	24
1	A	261	LEU	23
1	A	354	CYS	22
1	A	312	ILE	22
1	A	373	LEU	22
1	A	217	CYS	21
1	A	194	ASP	20
1	A	323	LEU	19
1	A	339	ASP	19
1	A	362	LEU	19
1	A	314	ASP	18
1	A	199	THR	17
1	A	359	TRP	17
1	A	214	THR	16
1	A	252	ARG	16
1	A	307	ILE	16
1	A	240	ASN	16
1	A	318	LEU	15
1	A	333	VAL	15
1	A	320	LYS	14
1	A	346	ASP	14
1	A	264	SER	13
1	A	360	ASP	13
1	A	366	SER	13
1	A	344	CYS	13
1	A	201	ASN	12
1	A	262	VAL	12
1	A	193	MET	12
1	A	232	ASP	11
1	A	276	THR	11
1	A	313	TYR	11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	363	GLU	11
1	A	349	VAL	11
1	A	257	ARG	11
1	A	325	MET	11
1	A	287	TRP	11
1	A	255	GLU	11
1	A	268	ASP	11
1	A	319	TYR	11
1	A	279	ILE	10
1	A	286	SER	10
1	A	328	ASP	10
1	A	233	GLN	10
1	A	231	MET	10
1	A	284	CYS	9
1	A	298	GLN	9
1	A	299	GLU	9
1	A	315	TYR	9
1	A	365	HIS	9
1	A	256	LEU	9
1	A	196	ASP	9
1	A	259	LEU	8
1	A	239	CYS	8
1	A	352	GLN	8
1	A	311	ARG	8
1	A	350	TYR	8
1	A	191	TYR	8
1	A	324	GLN	7
1	A	377	LEU	7
1	A	281	TRP	7
1	A	336	MET	7
1	A	376	ILE	7
1	A	200	PHE	7
1	A	260	ASP	7
1	A	225	ASN	6
1	A	374	ARG	6
1	A	271	GLN	6
1	A	237	PHE	5
1	A	316	ASP	5
1	A	292	GLU	5
1	A	357	GLN	5
1	A	218	TYR	5
1	A	304	ARG	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	367	GLN	5
1	A	340	GLU	5
1	A	253	HIS	5
1	A	369	LEU	5
1	A	321	GLU	4
1	A	192	LEU	4
1	A	280	SER	4
1	A	356	PHE	4
1	A	343	TYR	3
1	A	372	ARG	3
1	A	364	GLU	3
1	A	234	HIS	3
1	A	235	MET	3
1	A	300	ASN	3
1	A	219	GLU	2
1	A	238	LEU	2
1	A	294	ARG	2
1	A	297	LEU	2
1	A	370	SER	2
1	A	267	LEU	2
1	A	335	ILE	2
1	A	347	THR	2
1	A	222	ARG	2
1	A	306	ARG	1
1	A	308	PHE	1
1	A	266	GLN	1
1	A	274	ARG	1
1	A	202	PHE	1
1	A	221	GLU	1
1	A	301	THR	1

6.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

6.4 Non-standard residues in protein, DNA, RNA chains ⓘ

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](#)

Of 1 ligands modelled in this entry, 1 is monoatomic - leaving 0 for Mogul analysis.

6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation

The completeness of assignment taking into account all chemical shift lists is 67% for the well-defined parts and 64% for the entire structure.

7.1 Chemical shift list 1

File name: working_cs.cif

Chemical shift list name: *assigned_chem_shift_list_1*

7.1.1 Bookkeeping

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

Total number of shifts	1840
Number of shifts mapped to atoms	1788
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	52
Number of shifts with mapping warnings	0
Number of shift outliers (ShiftChecker)	10

The following assigned chemical shifts were not mapped to the molecules present in the coordinate file.

- No matching atom found in the structure. All 52 occurrences are reported below.

List ID	Chain	Res	Type	Atom	Shift Data		
					Value	Uncertainty	Ambiguity
1	A	383	LEU	H	8.259	0.005	1
1	A	383	LEU	HA	4.265	0.006	1
1	A	383	LEU	HB2	1.568	0.001	2
1	A	383	LEU	HB3	1.524	0.013	2
1	A	383	LEU	HD11	0.799	0.005	2
1	A	383	LEU	HD12	0.799	0.005	2
1	A	383	LEU	HD13	0.799	0.005	2
1	A	383	LEU	HD21	0.877	0.003	2
1	A	383	LEU	HD22	0.877	0.003	2
1	A	383	LEU	HD23	0.877	0.003	2
1	A	383	LEU	HG	1.573	0.004	1
1	A	383	LEU	CA	55.309	0.147	1
1	A	383	LEU	CB	41.701	0.158	1
1	A	383	LEU	CD1	23.411	0.018	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

List ID	Chain	Res	Type	Atom	Shift Data		
					Value	Uncertainty	Ambiguity
1	A	383	LEU	CD2	24.897	0.003	2
1	A	383	LEU	CG	26.914	0.001	1
1	A	383	LEU	N	122.433	0.072	1
1	A	384	GLU	H	8.306	0.004	1
1	A	384	GLU	HA	4.17	0.01	1
1	A	384	GLU	HB2	1.832	0.005	2
1	A	384	GLU	HB3	1.88	0.006	2
1	A	384	GLU	HG2	2.18	0.005	2
1	A	384	GLU	HG3	2.116	0.004	2
1	A	384	GLU	CA	56.607	0.053	1
1	A	384	GLU	CB	30.129	0.112	1
1	A	384	GLU	CG	36.22	0.031	1
1	A	384	GLU	N	121.077	0.053	1
1	A	385	HIS	H	8.331	0.006	1
1	A	385	HIS	N	119.501	0.034	1
1	A	386	HIS	HA	4.567	0.001	1
1	A	386	HIS	HB2	2.95	.	2
1	A	386	HIS	HB3	3.019	.	2
1	A	386	HIS	CA	55.998	.	1
1	A	387	HIS	HA	4.491	0.001	1
1	A	387	HIS	HB2	2.902	.	2
1	A	387	HIS	HB3	2.983	.	2
1	A	387	HIS	CA	56.626	0.032	1
1	A	387	HIS	CB	29.649	.	1
1	A	388	HIS	H	8.233	0.007	1
1	A	388	HIS	HA	4.579	0.01	1
1	A	388	HIS	HB2	3.1	.	2
1	A	388	HIS	HB3	3.042	.	2
1	A	388	HIS	CA	56.122	0.16	1
1	A	388	HIS	CB	30.045	0.067	1
1	A	388	HIS	N	120.159	0.059	1
1	A	389	HIS	H	8.044	0.008	1
1	A	389	HIS	HA	4.395	0.005	1
1	A	389	HIS	HB2	3.154	0.003	2
1	A	389	HIS	HB3	3.029	0.007	2
1	A	389	HIS	CA	57.459	0.029	1
1	A	389	HIS	CB	30.415	0.142	1
1	A	389	HIS	N	125.601	0.022	1

7.1.2 Chemical shift referencing ⓘ

The following table shows the suggested chemical shift referencing corrections.

Nucleus	# values	Correction $\pm$ precision, ppm	Suggested action
$^{13}\text{C}_\alpha$	187	-0.41 ± 0.16	None needed (< 0.5 ppm)
$^{13}\text{C}_\beta$	171	0.57 ± 0.09	Should be checked
$^{13}\text{C}'$	0	—	None (insufficient data)
^{15}N	180	-0.13 ± 0.25	None needed (< 0.5 ppm)

7.1.3 Completeness of resonance assignments ⓘ

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the well-defined regions of the structure. The overall completeness is 67%, i.e. 1557 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 2339. 0 out of 27 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	^1H	^{13}C	^{15}N
Backbone	621/819 (76%)	312/331 (94%)	156/330 (47%)	153/158 (97%)
Sidechain	819/1210 (68%)	567/787 (72%)	243/373 (65%)	9/50 (18%)
Aromatic	117/310 (38%)	111/152 (73%)	0/148 (0%)	6/10 (60%)
Overall	1557/2339 (67%)	990/1270 (78%)	399/851 (47%)	168/218 (77%)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 64%, i.e. 1788 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 2807. 0 out of 33 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	^1H	^{13}C	^{15}N
Backbone	713/980 (73%)	357/397 (90%)	181/394 (46%)	175/189 (93%)
Sidechain	958/1498 (64%)	660/970 (68%)	285/457 (62%)	13/71 (18%)
Aromatic	117/329 (36%)	111/161 (69%)	0/158 (0%)	6/10 (60%)
Overall	1788/2807 (64%)	1128/1528 (74%)	466/1009 (46%)	194/270 (72%)

7.1.4 Statistically unusual chemical shifts ⓘ

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

List Id	Chain	Res	Type	Atom	Shift, ppm	Expected range, ppm	Z-score
1	A	351	ARG	HD3	0.32	1.81 – 4.39	-10.8
1	A	277	TRP	HE1	5.50	6.88 – 13.28	-7.2
1	A	255	GLU	H	12.41	5.45 – 11.20	7.1

Continued on next page...

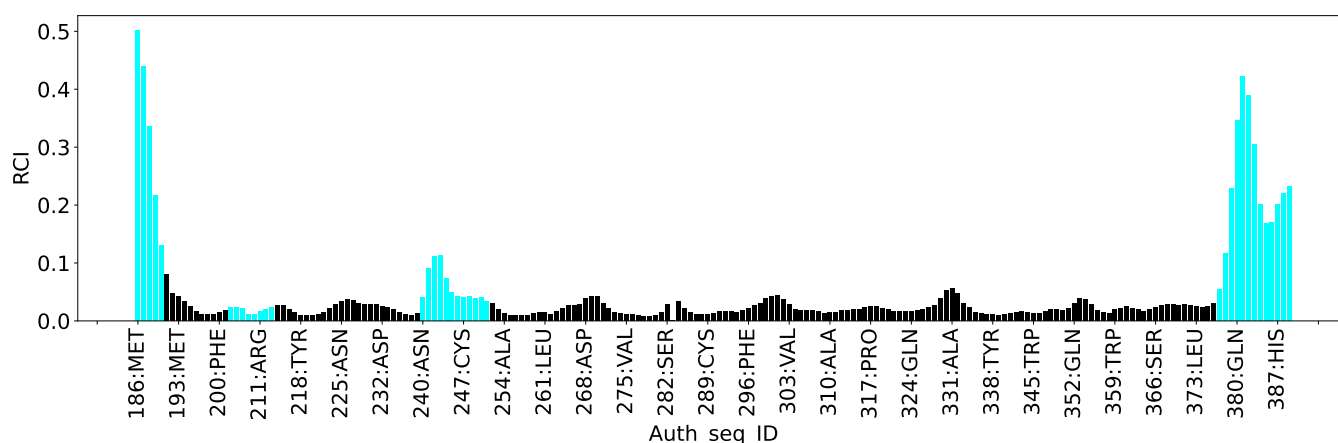
Continued from previous page...

List Id	Chain	Res	Type	Atom	Shift, ppm	Expected range, ppm	Z-score
1	A	223	LEU	HD21	-0.84	-0.65 – 2.13	-5.7
1	A	223	LEU	HD22	-0.84	-0.65 – 2.13	-5.7
1	A	223	LEU	HD23	-0.84	-0.65 – 2.13	-5.7
1	A	351	ARG	HD2	1.85	1.97 – 4.26	-5.5
1	A	347	THR	HG21	-0.03	0.08 – 2.19	-5.5
1	A	347	THR	HG22	-0.03	0.08 – 2.19	-5.5
1	A	347	THR	HG23	-0.03	0.08 – 2.19	-5.5

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:



7.2 Chemical shift list 2

File name: working_cs.cif

Chemical shift list name: *assigned_chem_shift_list_1_dup*

7.2.1 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	388
Number of shifts mapped to atoms	378
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	10
Number of shifts with mapping warnings	0
Number of shift outliers (ShiftChecker)	2

The following assigned chemical shifts were not mapped to the molecules present in the coordinate file.

- No matching atom found in the structure. All 10 occurrences are reported below.

List ID	Chain	Res	Type	Atom	Shift Data		
					Value	Uncertainty	Ambiguity
2	A	383	LEU	H	8.261	.	1
2	A	383	LEU	N	122.451	.	1
2	A	384	GLU	H	8.314	.	1
2	A	384	GLU	N	121.075	.	1
2	A	385	HIS	H	8.458	.	1
2	A	385	HIS	N	119.293	.	1
2	A	389	HIS	H	8.219	.	1
2	A	389	HIS	N	119.965	.	1
2	A	390	HIS	H	8.035	.	1
2	A	390	HIS	N	125.611	.	1

7.2.2 Chemical shift referencing [i](#)

The following table shows the suggested chemical shift referencing corrections.

Nucleus	# values	Correction $\pm$ precision, ppm	Suggested action
$^{13}\text{C}_\alpha$	0	—	None (insufficient data)
$^{13}\text{C}_\beta$	0	—	None (insufficient data)
$^{13}\text{C}'$	0	—	None (insufficient data)
^{15}N	170	0.26 ± 0.43	None needed (< 0.5 ppm)

7.2.3 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 14%, i.e. 329 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 2339. 0 out of 27 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	¹ H	¹³ C	¹⁵ N
Backbone	291/819 (36%)	145/331 (44%)	0/330 (0%)	146/158 (92%)
Sidechain	26/1210 (2%)	17/787 (2%)	0/373 (0%)	9/50 (18%)
Aromatic	12/310 (4%)	6/152 (4%)	0/148 (0%)	6/10 (60%)
Overall	329/2339 (14%)	168/1270 (13%)	0/851 (0%)	161/218 (74%)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 13%, i.e. 378 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 2807. 0 out of 33 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	¹ H	¹³ C	¹⁵ N
Backbone	329/980 (34%)	164/397 (41%)	0/394 (0%)	165/189 (87%)
Sidechain	37/1498 (2%)	24/970 (2%)	0/457 (0%)	13/71 (18%)
Aromatic	12/329 (4%)	6/161 (4%)	0/158 (0%)	6/10 (60%)
Overall	378/2807 (13%)	194/1528 (13%)	0/1009 (0%)	184/270 (68%)

7.2.4 Statistically unusual chemical shifts [i](#)

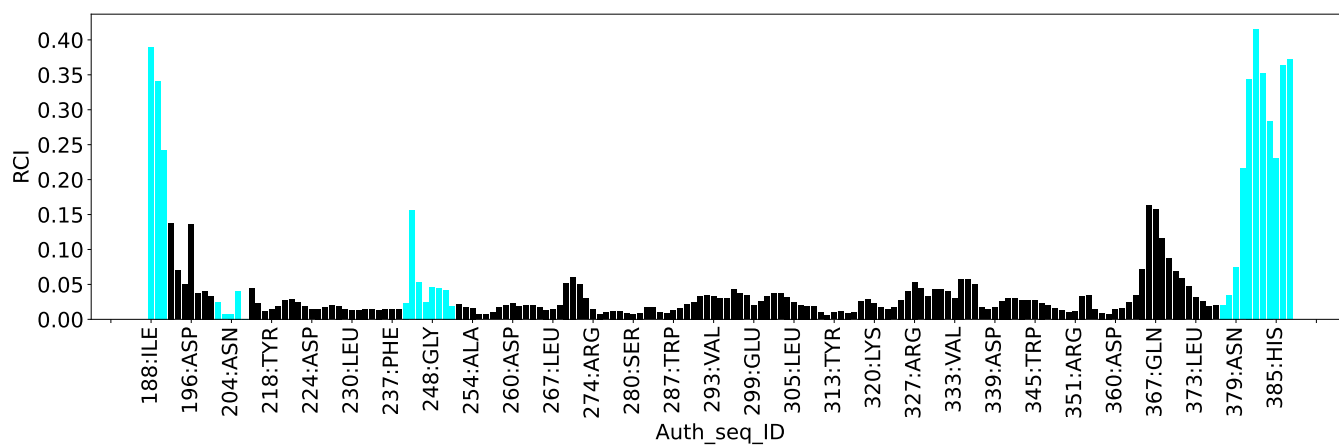
The following table lists the statistically unusual chemical shifts. These are statistical measures, and large deviations from the mean do not necessarily imply incorrect assignments. Molecules containing paramagnetic centres or hemes are expected to give rise to anomalous chemical shifts.

List Id	Chain	Res	Type	Atom	Shift, ppm	Expected range, ppm	Z-score
2	A	255	GLU	H	12.56	5.45 – 11.20	7.4
2	A	277	TRP	HE1	5.52	6.88 – 13.28	-7.1

7.2.5 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	3239
Intra-residue ($ i-j =0$)	1270
Sequential ($ i-j =1$)	639
Medium range ($ i-j >1$ and $ i-j <5$)	338
Long range ($ i-j \geq 5$)	824
Inter-chain	0
Hydrogen bond restraints	166
Disulfide bond restraints	0
Total dihedral-angle restraints	309
Number of unmapped restraints	0
Number of restraints per residue	17.2
Number of long range restraints per residue ¹	4.3

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)	53.2	0.2
0.2-0.5 (Medium)	18.6	0.46
>0.5 (Large)	0.2	1.26

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

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

Bins (°)	Average number of violations per model	Max (°)
1.0-10.0 (Small)	11.2	5.58
10.0-20.0 (Medium)	None	None
>20.0 (Large)	None	None

9 Distance violation analysis ⓘ

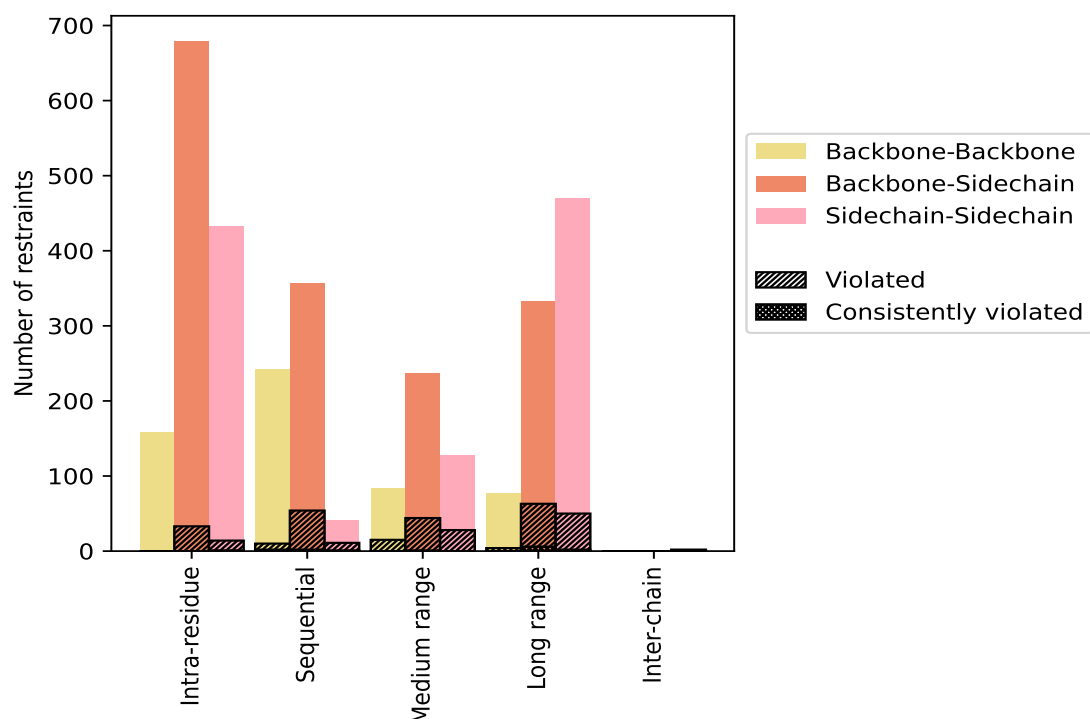
9.1 Summary of distance violations ⓘ

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

Restrains type	Count	% ¹	Violated ³			Consistently Violated ⁴		
			Count	% ²	% ¹	Count	% ²	% ¹
Intra-residue (i-j =0)	1270	39.2	47	3.7	1.5	1	0.1	0.0
Backbone-Backbone	158	4.9	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	679	21.0	33	4.9	1.0	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	433	13.4	14	3.2	0.4	1	0.2	0.0
Sequential (i-j =1)	639	19.7	75	11.7	2.3	5	0.8	0.2
Backbone-Backbone	242	7.5	10	4.1	0.3	2	0.8	0.1
Backbone-Sidechain	356	11.0	54	15.2	1.7	2	0.6	0.1
Sidechain-Sidechain	41	1.3	11	26.8	0.3	1	2.4	0.0
Medium range (i-j >1 & i-j <5)	338	10.4	67	19.8	2.1	1	0.3	0.0
Backbone-Backbone	83	2.6	15	18.1	0.5	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	127	3.9	24	18.9	0.7	1	0.8	0.0
Sidechain-Sidechain	128	4.0	28	21.9	0.9	0	0.0	0.0
Long range (i-j ≥5)	824	25.4	101	12.3	3.1	6	0.7	0.2
Backbone-Backbone	77	2.4	4	5.2	0.1	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	277	8.6	47	17.0	1.5	4	1.4	0.1
Sidechain-Sidechain	470	14.5	50	10.6	1.5	2	0.4	0.1
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	166	5.1	36	21.7	1.1	2	1.2	0.1
Disulfide bond	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Total	3239	100.0	328	10.1	10.1	15	0.5	0.5
Backbone-Backbone	560	17.3	29	5.2	0.9	2	0.4	0.1
Backbone-Sidechain	1605	49.6	194	12.1	6.0	9	0.6	0.3
Sidechain-Sidechain	1074	33.2	105	9.8	3.2	4	0.4	0.1

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

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



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

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

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

Model ID	Number of violations						Mean (Å)	Max (Å)	SD ⁶ (Å)	Median (Å)
	IR ¹	SQ ²	MR ³	LR ⁴	IC ⁵	Total				
1	9	21	9	37	0	76	0.16	0.34	0.06	0.15
2	3	17	6	31	0	57	0.17	0.34	0.06	0.15
3	7	15	13	30	0	65	0.16	0.3	0.05	0.14
4	6	21	16	38	0	81	0.17	0.36	0.06	0.16
5	7	21	10	30	0	68	0.18	0.37	0.06	0.16
6	12	19	13	29	1	74	0.17	0.38	0.06	0.16
7	6	20	21	33	0	80	0.17	0.34	0.06	0.15
8	5	19	12	31	1	68	0.18	0.37	0.06	0.16
9	7	15	18	37	0	77	0.17	0.35	0.06	0.16
10	8	19	13	33	0	73	0.18	0.34	0.06	0.17

Continued on next page...

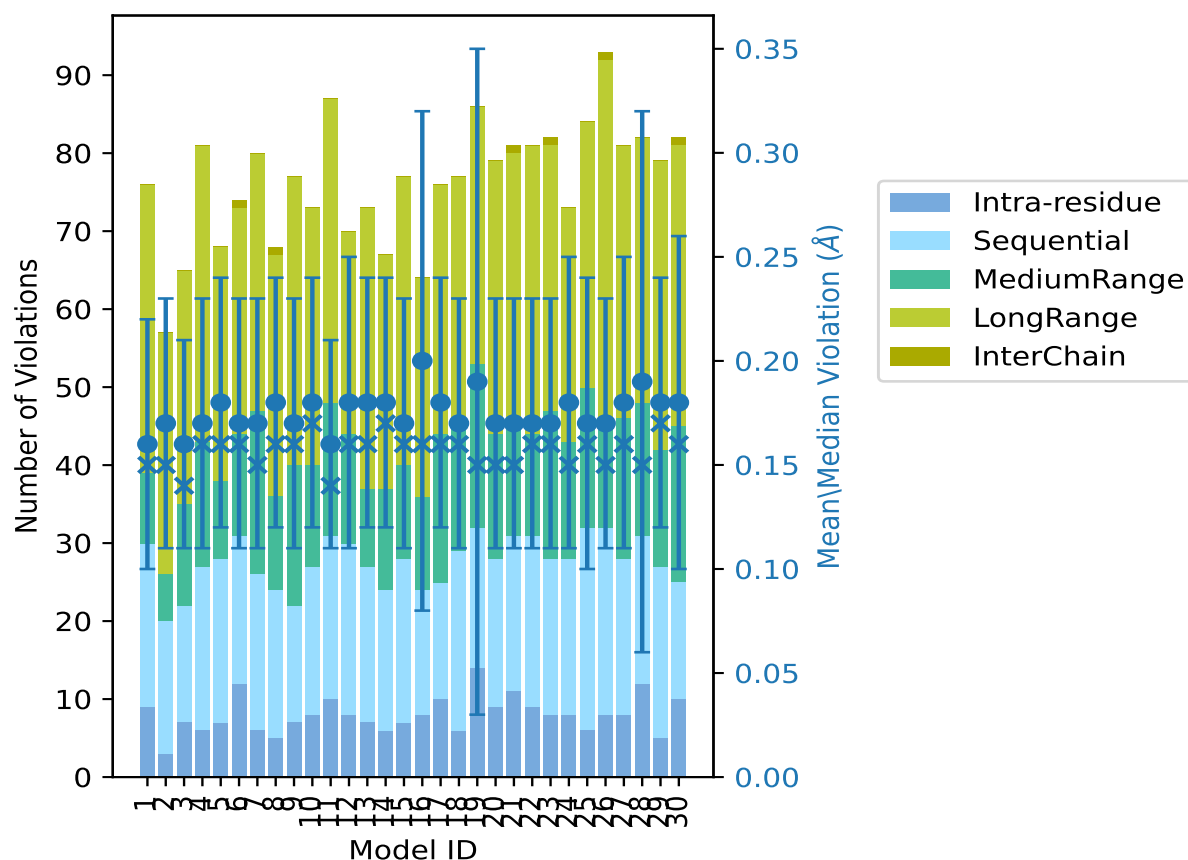
Continued from previous page...

Model ID	Number of violations						Mean (Å)	Max (Å)	SD ⁶ (Å)	Median (Å)
	IR ¹	SQ ²	MR ³	LR ⁴	IC ⁵	Total				
11	10	21	17	39	0	87	0.16	0.32	0.05	0.14
12	8	22	14	26	0	70	0.18	0.45	0.07	0.16
13	7	20	10	36	0	73	0.18	0.37	0.06	0.16
14	6	18	13	30	0	67	0.18	0.39	0.06	0.17
15	7	21	12	37	0	77	0.17	0.38	0.06	0.16
16	8	16	12	28	0	64	0.2	0.9	0.12	0.16
17	10	15	19	32	0	76	0.18	0.38	0.06	0.16
18	6	23	16	32	0	77	0.17	0.34	0.06	0.16
19	14	18	21	33	0	86	0.19	1.26	0.16	0.15
20	9	19	16	35	0	79	0.17	0.38	0.06	0.15
21	11	20	14	35	1	81	0.17	0.36	0.06	0.15
22	9	22	13	37	0	81	0.17	0.42	0.06	0.16
23	8	20	19	34	1	82	0.17	0.35	0.06	0.16
24	8	20	15	30	0	73	0.18	0.39	0.07	0.15
25	6	26	18	34	0	84	0.17	0.44	0.07	0.16
26	8	24	14	46	1	93	0.17	0.34	0.06	0.15
27	8	20	18	35	0	81	0.18	0.44	0.07	0.16
28	12	19	17	34	0	82	0.19	0.94	0.13	0.15
29	5	22	15	37	0	79	0.18	0.38	0.06	0.17
30	10	15	20	36	1	82	0.18	0.43	0.08	0.16

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

⁵Inter-chain restraints, ⁶Standard deviation

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



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

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

Violation analysis may find that some restraints are violated in few models and some are violated in most of models. The following table provides this information as number of violated restraints for a given fraction of the ensemble. In total, 2781(IR:1223, SQ:564, MR:271, LR:723, 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	%
15	19	19	32	0	85	1	3.3
3	6	15	8	0	32	2	6.7
5	9	5	5	0	24	3	10.0
6	7	5	8	0	26	4	13.3
2	7	4	3	0	16	5	16.7
5	2	3	0	0	10	6	20.0

Continued on next page...

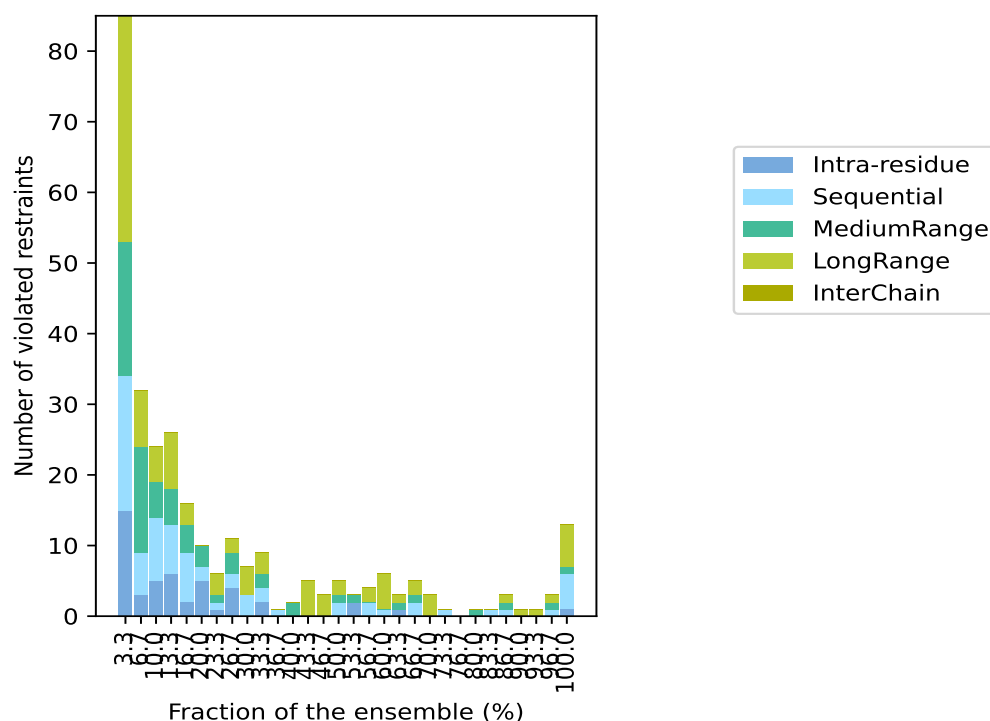
Continued from previous page...

Number of violated restraints						Fraction of the ensemble	
IR ¹	SQ ²	MR ³	LR ⁴	IC ⁵	Total	Count ⁶	%
1	1	1	3	0	6	7	23.3
4	2	3	2	0	11	8	26.7
0	3	0	4	0	7	9	30.0
2	2	2	3	0	9	10	33.3
0	1	0	0	0	1	11	36.7
0	0	2	0	0	2	12	40.0
0	0	0	5	0	5	13	43.3
0	0	0	3	0	3	14	46.7
0	2	1	2	0	5	15	50.0
2	0	1	0	0	3	16	53.3
0	2	0	2	0	4	17	56.7
0	1	0	5	0	6	18	60.0
1	0	1	1	0	3	19	63.3
0	2	1	2	0	5	20	66.7
0	0	0	3	0	3	21	70.0
0	1	0	0	0	1	22	73.3
0	0	0	0	0	0	23	76.7
0	0	1	0	0	1	24	80.0
0	1	0	0	0	1	25	83.3
0	1	1	1	0	3	26	86.7
0	0	0	1	0	1	27	90.0
0	0	0	1	0	1	28	93.3
0	1	1	1	0	3	29	96.7
1	5	1	6	0	13	30	100.0

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

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

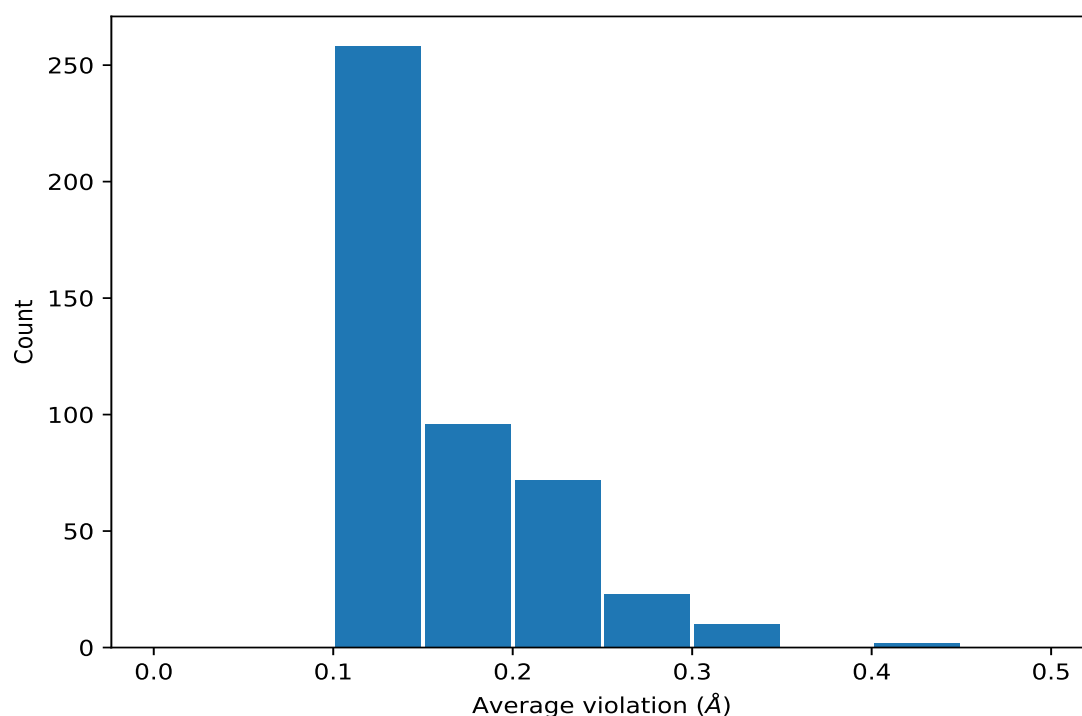
9.3.1 Bar graph : Distance violation statistics for the ensemble [i](#)



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

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

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



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

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

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,484)	1:223:A:LEU:HG	1:228:A:TRP:HE3	30	0.35	0.04	0.34
(1,480)	1:223:A:LEU:HD11	1:224:A:ASP:HB3	30	0.31	0.04	0.31
(1,480)	1:223:A:LEU:HD12	1:224:A:ASP:HB3	30	0.31	0.04	0.31
(1,480)	1:223:A:LEU:HD13	1:224:A:ASP:HB3	30	0.31	0.04	0.31
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG11	1:273:A:TYR:HA	30	0.28	0.06	0.28
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG12	1:273:A:TYR:HA	30	0.28	0.06	0.28
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG13	1:273:A:TYR:HA	30	0.28	0.06	0.28
(1,1524)	1:277:A:TRP:HH2	1:258:A:PHE:HA	30	0.26	0.06	0.27
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD21	30	0.26	0.04	0.26
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD22	30	0.26	0.04	0.26
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD23	30	0.26	0.04	0.26
(1,499)	1:224:A:ASP:H	1:229:A:VAL:HB	30	0.24	0.01	0.24
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG11	1:260:A:ASP:H	30	0.24	0.06	0.24
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG12	1:260:A:ASP:H	30	0.24	0.06	0.24
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG13	1:260:A:ASP:H	30	0.24	0.06	0.24
(1,1317)	1:270:A:ALA:H	1:269:A:PRO:HA	30	0.22	0.02	0.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,501)	1:224:A:ASP:HB3	1:229:A:VAL:HB	30	0.2	0.03	0.2
(1,3061)	1:380:A:GLN:HE22	1:380:A:GLN:HG3	30	0.18	0.0	0.18
(1,553)	1:227:A:THR:H	1:228:A:TRP:H	30	0.18	0.01	0.18
(1,557)	1:227:A:THR:HB	1:228:A:TRP:H	30	0.18	0.04	0.17
(3,37)	1:280:A:SER:H	1:215:A:TYR:O	30	0.16	0.03	0.16
(3,59)	1:332:A:GLN:H	1:305:A:LEU:O	30	0.16	0.03	0.16
(1,621)	1:229:A:VAL:H	1:228:A:TRP:HB2	30	0.15	0.02	0.15
(1,335)	1:217:A:CYS:H	1:216:A:LEU:HB3	29	0.19	0.06	0.16
(1,1491)	1:277:A:TRP:HE1	1:305:A:LEU:HG	29	0.18	0.04	0.17
(1,1646)	1:286:A:SER:H	1:289:A:CYS:HA	29	0.17	0.04	0.18
(1,574)	1:228:A:TRP:HE3	1:221:A:GLU:HG3	28	0.17	0.04	0.18
(1,595)	1:228:A:TRP:HH2	1:222:A:ARG:HA	27	0.15	0.03	0.15
(1,640)	1:230:A:LEU:HD11	1:228:A:TRP:HE3	26	0.19	0.02	0.2
(1,640)	1:230:A:LEU:HD12	1:228:A:TRP:HE3	26	0.19	0.02	0.2
(1,640)	1:230:A:LEU:HD13	1:228:A:TRP:HE3	26	0.19	0.02	0.2
(1,600)	1:229:A:VAL:HB	1:222:A:ARG:H	26	0.16	0.05	0.15
(1,1937)	1:304:A:ARG:H	1:303:A:VAL:HB	26	0.15	0.03	0.15
(1,2713)	1:356:A:PHE:HB2	1:357:A:GLN:H	25	0.18	0.05	0.17
(1,1206)	1:265:A:LEU:HD21	1:262:A:VAL:HB	24	0.21	0.04	0.2
(1,1206)	1:265:A:LEU:HD22	1:262:A:VAL:HB	24	0.21	0.04	0.2
(1,1206)	1:265:A:LEU:HD23	1:262:A:VAL:HB	24	0.21	0.04	0.2
(1,1829)	1:299:A:GLU:HG3	1:300:A:ASN:H	22	0.13	0.02	0.13
(1,2364)	1:333:A:VAL:HB	1:308:A:PHE:HA	21	0.2	0.05	0.21
(1,1101)	1:261:A:LEU:HD21	1:238:A:LEU:HB2	21	0.17	0.05	0.17
(1,1101)	1:261:A:LEU:HD22	1:238:A:LEU:HB2	21	0.17	0.05	0.17
(1,1101)	1:261:A:LEU:HD23	1:238:A:LEU:HB2	21	0.17	0.05	0.17
(1,1380)	1:273:A:TYR:HA	1:223:A:LEU:HD21	21	0.14	0.03	0.13
(1,1380)	1:273:A:TYR:HA	1:223:A:LEU:HD22	21	0.14	0.03	0.13
(1,1380)	1:273:A:TYR:HA	1:223:A:LEU:HD23	21	0.14	0.03	0.13
(1,63)	1:190:A:ARG:H	1:191:A:TYR:H	20	0.19	0.08	0.18
(1,1185)	1:264:A:SER:H	1:261:A:LEU:HA	20	0.17	0.05	0.16
(1,1578)	1:279:A:ILE:HB	1:309:A:ALA:HA	20	0.17	0.06	0.14
(1,1260)	1:267:A:LEU:H	1:266:A:GLN:HB3	20	0.16	0.02	0.16
(1,660)	1:230:A:LEU:HD21	1:219:A:GLU:HB3	20	0.12	0.02	0.12
(1,660)	1:230:A:LEU:HD22	1:219:A:GLU:HB3	20	0.12	0.02	0.12
(1,660)	1:230:A:LEU:HD23	1:219:A:GLU:HB3	20	0.12	0.02	0.12
(1,1229)	1:266:A:GLN:HB3	1:266:A:GLN:H	19	0.16	0.02	0.16
(1,2332)	1:333:A:VAL:HG11	1:308:A:PHE:H	19	0.15	0.02	0.14
(1,2332)	1:333:A:VAL:HG12	1:308:A:PHE:H	19	0.15	0.02	0.14
(1,2332)	1:333:A:VAL:HG13	1:308:A:PHE:H	19	0.15	0.02	0.14
(3,33)	1:276:A:THR:H	1:219:A:GLU:O	19	0.14	0.02	0.13
(1,1155)	1:262:A:VAL:HA	1:265:A:LEU:HB3	19	0.13	0.03	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG21	1:262:A:VAL:HG11	18	0.19	0.05	0.18
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG21	1:262:A:VAL:HG12	18	0.19	0.05	0.18
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG21	1:262:A:VAL:HG13	18	0.19	0.05	0.18
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG22	1:262:A:VAL:HG11	18	0.19	0.05	0.18
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG22	1:262:A:VAL:HG12	18	0.19	0.05	0.18
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG22	1:262:A:VAL:HG13	18	0.19	0.05	0.18
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG23	1:262:A:VAL:HG11	18	0.19	0.05	0.18
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG23	1:262:A:VAL:HG12	18	0.19	0.05	0.18
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG23	1:262:A:VAL:HG13	18	0.19	0.05	0.18
(1,337)	1:217:A:CYS:HB2	1:237:A:PHE:HA	18	0.17	0.03	0.18
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD21	18	0.17	0.03	0.18
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD22	18	0.17	0.03	0.18
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD23	18	0.17	0.03	0.18
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD21	18	0.17	0.03	0.18
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD22	18	0.17	0.03	0.18
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD23	18	0.17	0.03	0.18
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD21	18	0.17	0.03	0.18
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD22	18	0.17	0.03	0.18
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD23	18	0.17	0.03	0.18
(1,306)	1:216:A:LEU:HD11	1:254:A:ALA:H	18	0.17	0.04	0.17
(1,306)	1:216:A:LEU:HD12	1:254:A:ALA:H	18	0.17	0.04	0.17
(1,306)	1:216:A:LEU:HD13	1:254:A:ALA:H	18	0.17	0.04	0.17
(1,1876)	1:302:A:HIS:HD2	1:303:A:VAL:HB	18	0.16	0.05	0.15
(1,719)	1:234:A:HIS:H	1:265:A:LEU:HD11	18	0.15	0.04	0.13
(1,719)	1:234:A:HIS:H	1:265:A:LEU:HD12	18	0.15	0.04	0.13
(1,719)	1:234:A:HIS:H	1:265:A:LEU:HD13	18	0.15	0.04	0.13
(1,1641)	1:285:A:PHE:HE1	1:286:A:SER:HA	17	0.16	0.04	0.16
(1,1641)	1:285:A:PHE:HE2	1:286:A:SER:HA	17	0.16	0.04	0.16
(1,1560)	1:279:A:ILE:HG12	1:309:A:ALA:HA	17	0.16	0.03	0.15
(1,1228)	1:266:A:GLN:H	1:265:A:LEU:HA	17	0.16	0.04	0.16
(1,278)	1:216:A:LEU:HD11	1:258:A:PHE:HB3	17	0.15	0.04	0.14
(1,278)	1:216:A:LEU:HD12	1:258:A:PHE:HB3	17	0.15	0.04	0.14
(1,278)	1:216:A:LEU:HD13	1:258:A:PHE:HB3	17	0.15	0.04	0.14
(1,1164)	1:262:A:VAL:HB	1:265:A:LEU:H	16	0.2	0.05	0.22
(1,1603)	1:281:A:TRP:HE3	1:281:A:TRP:HB2	16	0.13	0.01	0.14
(1,2466)	1:340:A:GLU:H	1:340:A:GLU:HB3	16	0.13	0.02	0.12
(1,1609)	1:281:A:TRP:HE3	1:314:A:ASP:H	15	0.19	0.05	0.18
(1,2023)	1:307:A:ILE:HB	1:308:A:PHE:HA	15	0.16	0.06	0.14
(1,1946)	1:305:A:LEU:HD11	1:306:A:ARG:HA	15	0.15	0.03	0.15
(1,1946)	1:305:A:LEU:HD12	1:306:A:ARG:HA	15	0.15	0.03	0.15
(1,1946)	1:305:A:LEU:HD13	1:306:A:ARG:HA	15	0.15	0.03	0.15
(1,2284)	1:329:A:ALA:H	1:326:A:LEU:HG	15	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)
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE1	1:275:A:VAL:HG21	15	0.13	0.03	0.12
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE1	1:275:A:VAL:HG22	15	0.13	0.03	0.12
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE1	1:275:A:VAL:HG23	15	0.13	0.03	0.12
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE2	1:275:A:VAL:HG21	15	0.13	0.03	0.12
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE2	1:275:A:VAL:HG22	15	0.13	0.03	0.12
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE2	1:275:A:VAL:HG23	15	0.13	0.03	0.12
(1,1523)	1:277:A:TRP:HZ2	1:238:A:LEU:HD21	14	0.13	0.03	0.13
(1,1523)	1:277:A:TRP:HZ2	1:238:A:LEU:HD22	14	0.13	0.03	0.13
(1,1523)	1:277:A:TRP:HZ2	1:238:A:LEU:HD23	14	0.13	0.03	0.13
(1,1970)	1:305:A:LEU:HD21	1:258:A:PHE:HZ	14	0.13	0.03	0.12
(1,1970)	1:305:A:LEU:HD22	1:258:A:PHE:HZ	14	0.13	0.03	0.12
(1,1970)	1:305:A:LEU:HD23	1:258:A:PHE:HZ	14	0.13	0.03	0.12
(1,1373)	1:273:A:TYR:HA	1:221:A:GLU:HB2	14	0.13	0.02	0.12
(1,2117)	1:313:A:TYR:HE1	1:281:A:TRP:HZ3	13	0.22	0.03	0.22
(1,2117)	1:313:A:TYR:HE2	1:281:A:TRP:HZ3	13	0.22	0.03	0.22
(1,816)	1:238:A:LEU:HD11	1:216:A:LEU:HA	13	0.14	0.02	0.14
(1,816)	1:238:A:LEU:HD12	1:216:A:LEU:HA	13	0.14	0.02	0.14
(1,816)	1:238:A:LEU:HD13	1:216:A:LEU:HA	13	0.14	0.02	0.14
(1,816)	1:238:A:LEU:HD21	1:216:A:LEU:HA	13	0.14	0.02	0.14
(1,816)	1:238:A:LEU:HD22	1:216:A:LEU:HA	13	0.14	0.02	0.14
(1,816)	1:238:A:LEU:HD23	1:216:A:LEU:HA	13	0.14	0.02	0.14
(1,1895)	1:303:A:VAL:HB	1:296:A:PHE:HE1	13	0.14	0.04	0.14
(1,1895)	1:303:A:VAL:HB	1:296:A:PHE:HE2	13	0.14	0.04	0.14
(1,1981)	1:305:A:LEU:HD11	1:275:A:VAL:HB	13	0.14	0.03	0.14
(1,1981)	1:305:A:LEU:HD12	1:275:A:VAL:HB	13	0.14	0.03	0.14
(1,1981)	1:305:A:LEU:HD13	1:275:A:VAL:HB	13	0.14	0.03	0.14
(3,24)	1:259:A:LEU:H	1:255:A:GLU:O	13	0.13	0.03	0.12
(1,1562)	1:279:A:ILE:HG13	1:309:A:ALA:HA	13	0.13	0.02	0.13
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD21	12	0.2	0.04	0.2
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD22	12	0.2	0.04	0.2
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD23	12	0.2	0.04	0.2
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD21	12	0.2	0.04	0.2
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD22	12	0.2	0.04	0.2
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD23	12	0.2	0.04	0.2
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD21	12	0.2	0.04	0.2
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD22	12	0.2	0.04	0.2
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD23	12	0.2	0.04	0.2
(1,510)	1:224:A:ASP:H	1:227:A:THR:HG21	12	0.12	0.01	0.12
(1,510)	1:224:A:ASP:H	1:227:A:THR:HG22	12	0.12	0.01	0.12
(1,510)	1:224:A:ASP:H	1:227:A:THR:HG23	12	0.12	0.01	0.12
(3,25)	1:260:A:ASP:H	1:256:A:LEU:O	11	0.18	0.05	0.18
(1,143)	1:194:A:ASP:HB2	1:193:A:MET:HA	11	0.14	0.02	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,3070)	1:255:A:GLU:H	1:255:A:GLU:OE1	10	0.42	0.41	0.18
(1,1551)	1:278:A:PHE:H	1:217:A:CYS:HB3	10	0.28	0.03	0.28
(1,2775)	1:360:A:ASP:HA	1:359:A:TRP:HD1	10	0.27	0.09	0.28
(1,1207)	1:265:A:LEU:HD21	1:263:A:PRO:HD3	10	0.22	0.03	0.22
(1,1207)	1:265:A:LEU:HD22	1:263:A:PRO:HD3	10	0.22	0.03	0.22
(1,1207)	1:265:A:LEU:HD23	1:263:A:PRO:HD3	10	0.22	0.03	0.22
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD11	1:262:A:VAL:HG11	10	0.21	0.02	0.22
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD11	1:262:A:VAL:HG12	10	0.21	0.02	0.22
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD11	1:262:A:VAL:HG13	10	0.21	0.02	0.22
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD12	1:262:A:VAL:HG11	10	0.21	0.02	0.22
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD12	1:262:A:VAL:HG12	10	0.21	0.02	0.22
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD12	1:262:A:VAL:HG13	10	0.21	0.02	0.22
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD13	1:262:A:VAL:HG11	10	0.21	0.02	0.22
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD13	1:262:A:VAL:HG12	10	0.21	0.02	0.22
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD13	1:262:A:VAL:HG13	10	0.21	0.02	0.22
(1,1333)	1:271:A:GLN:HG3	1:271:A:GLN:HA	10	0.16	0.06	0.12
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG11	1:265:A:LEU:HD21	10	0.15	0.02	0.15
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG11	1:265:A:LEU:HD22	10	0.15	0.02	0.15
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG11	1:265:A:LEU:HD23	10	0.15	0.02	0.15
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG12	1:265:A:LEU:HD21	10	0.15	0.02	0.15
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG12	1:265:A:LEU:HD22	10	0.15	0.02	0.15
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG12	1:265:A:LEU:HD23	10	0.15	0.02	0.15
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG13	1:265:A:LEU:HD21	10	0.15	0.02	0.15
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG13	1:265:A:LEU:HD22	10	0.15	0.02	0.15
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG13	1:265:A:LEU:HD23	10	0.15	0.02	0.15
(1,1100)	1:261:A:LEU:HD11	1:238:A:LEU:HB3	10	0.14	0.02	0.13
(1,1100)	1:261:A:LEU:HD12	1:238:A:LEU:HB3	10	0.14	0.02	0.13
(1,1100)	1:261:A:LEU:HD13	1:238:A:LEU:HB3	10	0.14	0.02	0.13
(1,1557)	1:279:A:ILE:H	1:308:A:PHE:H	10	0.13	0.02	0.12
(3,50)	1:309:A:ALA:H	1:334:A:SER:O	10	0.12	0.02	0.11
(1,2758)	1:359:A:TRP:HE3	1:360:A:ASP:H	9	0.2	0.1	0.15
(1,1797)	1:298:A:GLN:HE21	1:299:A:GLU:HB3	9	0.16	0.02	0.15
(1,85)	1:192:A:LEU:HD21	1:348:A:PHE:H	9	0.15	0.05	0.12
(1,85)	1:192:A:LEU:HD22	1:348:A:PHE:H	9	0.15	0.05	0.12
(1,85)	1:192:A:LEU:HD23	1:348:A:PHE:H	9	0.15	0.05	0.12
(1,1768)	1:296:A:PHE:HE1	1:259:A:LEU:HD21	9	0.14	0.03	0.13
(1,1768)	1:296:A:PHE:HE1	1:259:A:LEU:HD22	9	0.14	0.03	0.13
(1,1768)	1:296:A:PHE:HE1	1:259:A:LEU:HD23	9	0.14	0.03	0.13
(1,1768)	1:296:A:PHE:HE2	1:259:A:LEU:HD21	9	0.14	0.03	0.13
(1,1768)	1:296:A:PHE:HE2	1:259:A:LEU:HD22	9	0.14	0.03	0.13
(1,1768)	1:296:A:PHE:HE2	1:259:A:LEU:HD23	9	0.14	0.03	0.13
(1,69)	1:191:A:TYR:H	1:237:A:PHE:HZ	9	0.13	0.05	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,169)	1:196:A:ASP:H	1:195:A:PRO:HB3	9	0.13	0.02	0.13
(3,10)	1:219:A:GLU:H	1:276:A:THR:O	9	0.13	0.02	0.12
(1,1464)	1:275:A:VAL:HB	1:305:A:LEU:HA	9	0.12	0.02	0.12
(1,2781)	1:360:A:ASP:H	1:360:A:ASP:HB2	8	0.33	0.02	0.34
(1,2776)	1:360:A:ASP:HB3	1:360:A:ASP:H	8	0.26	0.1	0.32
(1,2791)	1:362:A:LEU:H	1:359:A:TRP:H	8	0.2	0.03	0.2
(1,106)	1:192:A:LEU:HD21	1:191:A:TYR:HB3	8	0.16	0.05	0.15
(1,106)	1:192:A:LEU:HD22	1:191:A:TYR:HB3	8	0.16	0.05	0.15
(1,106)	1:192:A:LEU:HD23	1:191:A:TYR:HB3	8	0.16	0.05	0.15
(1,254)	1:215:A:TYR:H	1:216:A:LEU:HD21	8	0.15	0.03	0.16
(1,254)	1:215:A:TYR:H	1:216:A:LEU:HD22	8	0.15	0.03	0.16
(1,254)	1:215:A:TYR:H	1:216:A:LEU:HD23	8	0.15	0.03	0.16
(1,1738)	1:296:A:PHE:HE1	1:263:A:PRO:HD2	8	0.15	0.02	0.16
(1,1738)	1:296:A:PHE:HE1	1:263:A:PRO:HD3	8	0.15	0.02	0.16
(1,1738)	1:296:A:PHE:HE2	1:263:A:PRO:HD2	8	0.15	0.02	0.16
(1,1738)	1:296:A:PHE:HE2	1:263:A:PRO:HD3	8	0.15	0.02	0.16
(1,283)	1:216:A:LEU:HD11	1:258:A:PHE:HA	8	0.15	0.03	0.14
(1,283)	1:216:A:LEU:HD12	1:258:A:PHE:HA	8	0.15	0.03	0.14
(1,283)	1:216:A:LEU:HD13	1:258:A:PHE:HA	8	0.15	0.03	0.14
(1,2759)	1:359:A:TRP:HD1	1:362:A:LEU:HA	8	0.14	0.03	0.15
(1,1834)	1:299:A:GLU:HG2	1:296:A:PHE:HD1	8	0.14	0.02	0.14
(1,1834)	1:299:A:GLU:HG2	1:296:A:PHE:HD2	8	0.14	0.02	0.14
(3,16)	1:229:A:VAL:H	1:222:A:ARG:O	8	0.12	0.03	0.11
(1,1778)	1:297:A:LEU:HD11	1:297:A:LEU:HA	8	0.11	0.0	0.11
(1,1778)	1:297:A:LEU:HD12	1:297:A:LEU:HA	8	0.11	0.0	0.11
(1,1778)	1:297:A:LEU:HD13	1:297:A:LEU:HA	8	0.11	0.0	0.11
(1,522)	1:225:A:ASN:HD22	1:225:A:ASN:HD21	8	0.1	0.0	0.1
(1,3071)	1:255:A:GLU:N	1:255:A:GLU:OE1	7	0.4	0.34	0.13
(1,1079)	1:260:A:ASP:H	1:259:A:LEU:HG	7	0.2	0.03	0.21
(1,956)	1:256:A:LEU:H	1:254:A:ALA:H	7	0.13	0.04	0.12
(1,1486)	1:276:A:THR:HG21	1:308:A:PHE:H	7	0.13	0.02	0.12
(1,1486)	1:276:A:THR:HG22	1:308:A:PHE:H	7	0.13	0.02	0.12
(1,1486)	1:276:A:THR:HG23	1:308:A:PHE:H	7	0.13	0.02	0.12
(1,1617)	1:282:A:SER:H	1:309:A:ALA:HA	7	0.12	0.02	0.12
(1,1356)	1:272:A:ILE:HA	1:228:A:TRP:HZ3	7	0.12	0.01	0.12
(1,3029)	1:378:A:GLN:H	1:377:A:LEU:HA	6	0.27	0.08	0.32
(1,735)	1:235:A:MET:HB2	1:235:A:MET:H	6	0.21	0.02	0.21
(1,528)	1:225:A:ASN:HD22	1:225:A:ASN:HB3	6	0.2	0.01	0.2
(1,1148)	1:262:A:VAL:HG21	1:263:A:PRO:HG2	6	0.2	0.05	0.22
(1,1148)	1:262:A:VAL:HG22	1:263:A:PRO:HG2	6	0.2	0.05	0.22
(1,1148)	1:262:A:VAL:HG23	1:263:A:PRO:HG2	6	0.2	0.05	0.22
(1,1141)	1:262:A:VAL:HG11	1:265:A:LEU:HG	6	0.19	0.03	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,1141)	1:262:A:VAL:HG12	1:265:A:LEU:HG	6	0.19	0.03	0.18
(1,1141)	1:262:A:VAL:HG13	1:265:A:LEU:HG	6	0.19	0.03	0.18
(1,1173)	1:262:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HG	6	0.19	0.03	0.18
(1,1173)	1:262:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HG	6	0.19	0.03	0.18
(1,1173)	1:262:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HG	6	0.19	0.03	0.18
(1,1088)	1:261:A:LEU:HD11	1:258:A:PHE:HZ	6	0.16	0.01	0.16
(1,1088)	1:261:A:LEU:HD12	1:258:A:PHE:HZ	6	0.16	0.01	0.16
(1,1088)	1:261:A:LEU:HD13	1:258:A:PHE:HZ	6	0.16	0.01	0.16
(1,2159)	1:320:A:LYS:HD2	1:320:A:LYS:HA	6	0.16	0.06	0.14
(1,1140)	1:262:A:VAL:HG21	1:262:A:VAL:H	6	0.15	0.01	0.15
(1,1140)	1:262:A:VAL:HG22	1:262:A:VAL:H	6	0.15	0.01	0.15
(1,1140)	1:262:A:VAL:HG23	1:262:A:VAL:H	6	0.15	0.01	0.15
(1,2549)	1:345:A:TRP:HE1	1:345:A:TRP:HA	6	0.13	0.02	0.12
(1,2862)	1:367:A:GLN:HG2	1:364:A:GLU:HA	5	0.31	0.14	0.4
(1,145)	1:194:A:ASP:HB3	1:193:A:MET:HA	5	0.2	0.03	0.2
(1,3039)	1:379:A:ASN:HD22	1:379:A:ASN:HA	5	0.2	0.08	0.17
(1,68)	1:191:A:TYR:H	1:192:A:LEU:H	5	0.2	0.04	0.19
(1,79)	1:191:A:TYR:H	1:190:A:ARG:HB2	5	0.18	0.03	0.18
(3,111)	1:265:A:LEU:N	1:262:A:VAL:O	5	0.17	0.03	0.18
(1,1001)	1:258:A:PHE:HZ	1:259:A:LEU:HD11	5	0.16	0.03	0.17
(1,1001)	1:258:A:PHE:HZ	1:259:A:LEU:HD12	5	0.16	0.03	0.17
(1,1001)	1:258:A:PHE:HZ	1:259:A:LEU:HD13	5	0.16	0.03	0.17
(1,1082)	1:260:A:ASP:HA	1:262:A:VAL:H	5	0.15	0.04	0.15
(3,22)	1:257:A:ARG:H	1:253:A:HIS:O	5	0.15	0.02	0.14
(1,2788)	1:361:A:GLY:H	1:360:A:ASP:HA	5	0.14	0.02	0.15
(1,313)	1:216:A:LEU:HD21	1:218:A:TYR:HB2	5	0.14	0.04	0.13
(1,313)	1:216:A:LEU:HD22	1:218:A:TYR:HB2	5	0.14	0.04	0.13
(1,313)	1:216:A:LEU:HD23	1:218:A:TYR:HB2	5	0.14	0.04	0.13
(1,1052)	1:259:A:LEU:HD21	1:259:A:LEU:H	5	0.14	0.01	0.14
(1,1052)	1:259:A:LEU:HD22	1:259:A:LEU:H	5	0.14	0.01	0.14
(1,1052)	1:259:A:LEU:HD23	1:259:A:LEU:H	5	0.14	0.01	0.14
(1,1170)	1:262:A:VAL:H	1:261:A:LEU:HB2	5	0.14	0.02	0.14
(1,1394)	1:273:A:TYR:HB2	1:220:A:VAL:HG21	5	0.12	0.02	0.12
(1,1394)	1:273:A:TYR:HB2	1:220:A:VAL:HG22	5	0.12	0.02	0.12
(1,1394)	1:273:A:TYR:HB2	1:220:A:VAL:HG23	5	0.12	0.02	0.12
(1,1818)	1:298:A:GLN:HE21	1:296:A:PHE:H	5	0.12	0.01	0.12
(1,2298)	1:331:A:ALA:HB1	1:326:A:LEU:HB2	5	0.12	0.01	0.12
(1,2298)	1:331:A:ALA:HB2	1:326:A:LEU:HB2	5	0.12	0.01	0.12
(1,2298)	1:331:A:ALA:HB3	1:326:A:LEU:HB2	5	0.12	0.01	0.12
(1,2766)	1:359:A:TRP:H	1:358:A:PRO:HA	5	0.11	0.0	0.11
(1,2366)	1:333:A:VAL:H	1:327:A:ARG:HB3	5	0.11	0.01	0.1
(3,49)	1:308:A:PHE:H	1:277:A:TRP:O	5	0.11	0.01	0.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,656)	1:230:A:LEU:HD11	1:231:A:MET:H	4	0.32	0.03	0.31
(1,656)	1:230:A:LEU:HD12	1:231:A:MET:H	4	0.32	0.03	0.31
(1,656)	1:230:A:LEU:HD13	1:231:A:MET:H	4	0.32	0.03	0.31
(1,638)	1:230:A:LEU:HD11	1:222:A:ARG:H	4	0.26	0.12	0.24
(1,638)	1:230:A:LEU:HD12	1:222:A:ARG:H	4	0.26	0.12	0.24
(1,638)	1:230:A:LEU:HD13	1:222:A:ARG:H	4	0.26	0.12	0.24
(1,1116)	1:261:A:LEU:HD21	1:262:A:VAL:HG11	4	0.24	0.06	0.22
(1,1116)	1:261:A:LEU:HD21	1:262:A:VAL:HG12	4	0.24	0.06	0.22
(1,1116)	1:261:A:LEU:HD21	1:262:A:VAL:HG13	4	0.24	0.06	0.22
(1,1116)	1:261:A:LEU:HD22	1:262:A:VAL:HG11	4	0.24	0.06	0.22
(1,1116)	1:261:A:LEU:HD22	1:262:A:VAL:HG12	4	0.24	0.06	0.22
(1,1116)	1:261:A:LEU:HD22	1:262:A:VAL:HG13	4	0.24	0.06	0.22
(1,1116)	1:261:A:LEU:HD23	1:262:A:VAL:HG11	4	0.24	0.06	0.22
(1,1116)	1:261:A:LEU:HD23	1:262:A:VAL:HG12	4	0.24	0.06	0.22
(1,1116)	1:261:A:LEU:HD23	1:262:A:VAL:HG13	4	0.24	0.06	0.22
(1,2731)	1:357:A:GLN:H	1:356:A:PHE:HB3	4	0.22	0.03	0.22
(2,1)	1:255:A:GLU:OE1	2:500:A:ZN:ZN	4	0.22	0.08	0.2
(1,523)	1:225:A:ASN:HB2	1:225:A:ASN:HD22	4	0.21	0.09	0.2
(1,658)	1:230:A:LEU:HD21	1:230:A:LEU:H	4	0.2	0.03	0.2
(1,658)	1:230:A:LEU:HD22	1:230:A:LEU:H	4	0.2	0.03	0.2
(1,658)	1:230:A:LEU:HD23	1:230:A:LEU:H	4	0.2	0.03	0.2
(1,673)	1:231:A:MET:H	1:221:A:GLU:H	4	0.18	0.02	0.18
(1,666)	1:230:A:LEU:HD11	1:228:A:TRP:HB2	4	0.16	0.02	0.16
(1,666)	1:230:A:LEU:HD12	1:228:A:TRP:HB2	4	0.16	0.02	0.16
(1,666)	1:230:A:LEU:HD13	1:228:A:TRP:HB2	4	0.16	0.02	0.16
(1,666)	1:230:A:LEU:HD21	1:228:A:TRP:HB2	4	0.16	0.02	0.16
(1,666)	1:230:A:LEU:HD22	1:228:A:TRP:HB2	4	0.16	0.02	0.16
(1,666)	1:230:A:LEU:HD23	1:228:A:TRP:HB2	4	0.16	0.02	0.16
(1,1444)	1:275:A:VAL:HB	1:305:A:LEU:HD21	4	0.15	0.03	0.15
(1,1444)	1:275:A:VAL:HB	1:305:A:LEU:HD22	4	0.15	0.03	0.15
(1,1444)	1:275:A:VAL:HB	1:305:A:LEU:HD23	4	0.15	0.03	0.15
(1,2164)	1:320:A:LYS:HD3	1:320:A:LYS:HA	4	0.15	0.02	0.15
(1,1107)	1:261:A:LEU:HD21	1:264:A:SER:HB2	4	0.15	0.04	0.14
(1,1107)	1:261:A:LEU:HD22	1:264:A:SER:HB2	4	0.15	0.04	0.14
(1,1107)	1:261:A:LEU:HD23	1:264:A:SER:HB2	4	0.15	0.04	0.14
(1,2370)	1:333:A:VAL:H	1:332:A:GLN:HB3	4	0.14	0.02	0.13
(1,2672)	1:351:A:ARG:HD3	1:345:A:TRP:HA	4	0.14	0.03	0.12
(1,1169)	1:262:A:VAL:HG21	1:259:A:LEU:HB2	4	0.13	0.02	0.13
(1,1169)	1:262:A:VAL:HG22	1:259:A:LEU:HB2	4	0.13	0.02	0.13
(1,1169)	1:262:A:VAL:HG23	1:259:A:LEU:HB2	4	0.13	0.02	0.13
(1,1226)	1:266:A:GLN:H	1:265:A:LEU:HD21	4	0.13	0.03	0.13
(1,1226)	1:266:A:GLN:H	1:265:A:LEU:HD22	4	0.13	0.03	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,1226)	1:266:A:GLN:H	1:265:A:LEU:HD23	4	0.13	0.03	0.13
(3,26)	1:261:A:LEU:H	1:257:A:ARG:O	4	0.13	0.02	0.13
(1,1117)	1:261:A:LEU:HD11	1:262:A:VAL:H	4	0.12	0.01	0.12
(1,1117)	1:261:A:LEU:HD12	1:262:A:VAL:H	4	0.12	0.01	0.12
(1,1117)	1:261:A:LEU:HD13	1:262:A:VAL:H	4	0.12	0.01	0.12
(1,1867)	1:302:A:HIS:HD2	1:300:A:ASN:HA	4	0.12	0.01	0.12
(3,120)	1:280:A:SER:N	1:215:A:TYR:O	4	0.12	0.01	0.12
(3,43)	1:298:A:GLN:H	1:294:A:ARG:O	4	0.12	0.01	0.12
(1,288)	1:216:A:LEU:HD21	1:277:A:TRP:HB2	4	0.12	0.02	0.11
(1,288)	1:216:A:LEU:HD22	1:277:A:TRP:HB2	4	0.12	0.02	0.11
(1,288)	1:216:A:LEU:HD23	1:277:A:TRP:HB2	4	0.12	0.02	0.11
(1,823)	1:238:A:LEU:HD11	1:254:A:ALA:HA	4	0.12	0.02	0.11
(1,823)	1:238:A:LEU:HD12	1:254:A:ALA:HA	4	0.12	0.02	0.11
(1,823)	1:238:A:LEU:HD13	1:254:A:ALA:HA	4	0.12	0.02	0.11
(1,2051)	1:309:A:ALA:HB1	1:278:A:PHE:HA	4	0.12	0.0	0.12
(1,2051)	1:309:A:ALA:HB2	1:278:A:PHE:HA	4	0.12	0.0	0.12
(1,2051)	1:309:A:ALA:HB3	1:278:A:PHE:HA	4	0.12	0.0	0.12
(1,2582)	1:346:A:ASP:H	1:344:A:CYS:H	4	0.12	0.01	0.12
(1,727)	1:234:A:HIS:HD2	1:235:A:MET:H	4	0.12	0.0	0.12
(1,311)	1:216:A:LEU:HG	1:277:A:TRP:HD1	4	0.11	0.01	0.11
(1,712)	1:233:A:GLN:HE22	1:233:A:GLN:HG2	4	0.11	0.0	0.11
(1,59)	1:190:A:ARG:HB2	1:190:A:ARG:H	4	0.11	0.01	0.11
(1,3038)	1:379:A:ASN:HD22	1:379:A:ASN:HD21	4	0.1	0.0	0.1
(1,725)	1:234:A:HIS:HB2	1:235:A:MET:H	3	0.33	0.01	0.34
(1,685)	1:231:A:MET:HE1	1:234:A:HIS:HB3	3	0.25	0.03	0.23
(1,685)	1:231:A:MET:HE2	1:234:A:HIS:HB3	3	0.25	0.03	0.23
(1,685)	1:231:A:MET:HE3	1:234:A:HIS:HB3	3	0.25	0.03	0.23
(1,1599)	1:281:A:TRP:HZ3	1:312:A:ILE:HG22	3	0.24	0.04	0.24
(1,1599)	1:281:A:TRP:HZ3	1:312:A:ILE:HG12	3	0.24	0.04	0.24
(1,66)	1:190:A:ARG:H	1:190:A:ARG:HG2	3	0.21	0.05	0.24
(3,21)	1:235:A:MET:H	1:232:A:ASP:O	3	0.21	0.02	0.21
(1,650)	1:230:A:LEU:HD21	1:221:A:GLU:HG3	3	0.2	0.07	0.19
(1,650)	1:230:A:LEU:HD22	1:221:A:GLU:HG3	3	0.2	0.07	0.19
(1,650)	1:230:A:LEU:HD23	1:221:A:GLU:HG3	3	0.2	0.07	0.19
(1,67)	1:190:A:ARG:HA	1:237:A:PHE:HE1	3	0.2	0.07	0.22
(1,67)	1:190:A:ARG:HA	1:237:A:PHE:HE2	3	0.2	0.07	0.22
(1,2858)	1:367:A:GLN:HE22	1:366:A:SER:H	3	0.2	0.05	0.18
(1,473)	1:223:A:LEU:H	1:222:A:ARG:HB2	3	0.18	0.02	0.18
(1,653)	1:230:A:LEU:HD21	1:229:A:VAL:HA	3	0.18	0.05	0.2
(1,653)	1:230:A:LEU:HD22	1:229:A:VAL:HA	3	0.18	0.05	0.2
(1,653)	1:230:A:LEU:HD23	1:229:A:VAL:HA	3	0.18	0.05	0.2
(3,28)	1:265:A:LEU:H	1:262:A:VAL:O	3	0.15	0.01	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,2388)	1:335:A:ILE:H	1:335:A:ILE:HD11	3	0.15	0.02	0.14
(1,2388)	1:335:A:ILE:H	1:335:A:ILE:HD12	3	0.15	0.02	0.14
(1,2388)	1:335:A:ILE:H	1:335:A:ILE:HD13	3	0.15	0.02	0.14
(1,2824)	1:363:A:GLU:HB3	1:362:A:LEU:HD11	3	0.14	0.01	0.14
(1,2824)	1:363:A:GLU:HB3	1:362:A:LEU:HD12	3	0.14	0.01	0.14
(1,2824)	1:363:A:GLU:HB3	1:362:A:LEU:HD13	3	0.14	0.01	0.14
(1,1677)	1:290:A:ALA:H	1:293:A:VAL:H	3	0.14	0.01	0.13
(1,1525)	1:277:A:TRP:HH2	1:293:A:VAL:HB	3	0.14	0.04	0.11
(3,56)	1:326:A:LEU:H	1:322:A:ALA:O	3	0.14	0.02	0.15
(1,381)	1:219:A:GLU:H	1:275:A:VAL:HG11	3	0.13	0.02	0.13
(1,381)	1:219:A:GLU:H	1:275:A:VAL:HG12	3	0.13	0.02	0.13
(1,381)	1:219:A:GLU:H	1:275:A:VAL:HG13	3	0.13	0.02	0.13
(1,1006)	1:258:A:PHE:HE1	1:261:A:LEU:H	3	0.13	0.01	0.13
(1,1006)	1:258:A:PHE:HE2	1:261:A:LEU:H	3	0.13	0.01	0.13
(1,835)	1:241:A:GLU:H	1:240:A:ASN:HB2	3	0.12	0.02	0.12
(3,60)	1:334:A:SER:H	1:307:A:ILE:O	3	0.12	0.02	0.13
(1,97)	1:192:A:LEU:H	1:192:A:LEU:HD11	3	0.12	0.01	0.12
(1,97)	1:192:A:LEU:H	1:192:A:LEU:HD12	3	0.12	0.01	0.12
(1,97)	1:192:A:LEU:H	1:192:A:LEU:HD13	3	0.12	0.01	0.12
(1,995)	1:258:A:PHE:HD1	1:255:A:GLU:HA	3	0.11	0.01	0.12
(1,995)	1:258:A:PHE:HD2	1:255:A:GLU:HA	3	0.11	0.01	0.12
(1,98)	1:192:A:LEU:H	1:192:A:LEU:HG	3	0.11	0.01	0.11
(1,1721)	1:294:A:ARG:H	1:293:A:VAL:HB	3	0.11	0.0	0.11
(1,1998)	1:307:A:ILE:HD11	1:308:A:PHE:H	3	0.11	0.01	0.11
(1,1998)	1:307:A:ILE:HD12	1:308:A:PHE:H	3	0.11	0.01	0.11
(1,1998)	1:307:A:ILE:HD13	1:308:A:PHE:H	3	0.11	0.01	0.11
(1,2003)	1:307:A:ILE:H	1:305:A:LEU:HD11	3	0.11	0.01	0.11
(1,2003)	1:307:A:ILE:H	1:305:A:LEU:HD12	3	0.11	0.01	0.11
(1,2003)	1:307:A:ILE:H	1:305:A:LEU:HD13	3	0.11	0.01	0.11
(1,792)	1:237:A:PHE:HD1	1:238:A:LEU:HA	3	0.11	0.01	0.1
(1,792)	1:237:A:PHE:HD2	1:238:A:LEU:HA	3	0.11	0.01	0.1
(3,110)	1:264:A:SER:N	1:261:A:LEU:O	3	0.11	0.0	0.11
(1,2859)	1:367:A:GLN:HE21	1:367:A:GLN:HE22	3	0.1	0.0	0.1
(1,37)	1:188:A:ILE:H	1:188:A:ILE:HG21	2	0.3	0.01	0.3
(1,37)	1:188:A:ILE:H	1:188:A:ILE:HG22	2	0.3	0.01	0.3
(1,37)	1:188:A:ILE:H	1:188:A:ILE:HG23	2	0.3	0.01	0.3
(1,103)	1:192:A:LEU:HD21	1:191:A:TYR:HB2	2	0.25	0.12	0.25
(1,103)	1:192:A:LEU:HD22	1:191:A:TYR:HB2	2	0.25	0.12	0.25
(1,103)	1:192:A:LEU:HD23	1:191:A:TYR:HB2	2	0.25	0.12	0.25
(2,2)	1:255:A:GLU:OE2	2:500:A:ZN:ZN	2	0.22	0.02	0.22
(1,837)	1:241:A:GLU:H	1:252:A:ARG:HB2	2	0.2	0.04	0.2
(1,16)	1:188:A:ILE:HB	1:188:A:ILE:H	2	0.18	0.01	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,104)	1:192:A:LEU:HD21	1:190:A:ARG:HA	2	0.18	0.0	0.18
(1,104)	1:192:A:LEU:HD22	1:190:A:ARG:HA	2	0.18	0.0	0.18
(1,104)	1:192:A:LEU:HD23	1:190:A:ARG:HA	2	0.18	0.0	0.18
(1,2625)	1:349:A:VAL:HG21	1:351:A:ARG:HD3	2	0.18	0.04	0.18
(1,2625)	1:349:A:VAL:HG22	1:351:A:ARG:HD3	2	0.18	0.04	0.18
(1,2625)	1:349:A:VAL:HG23	1:351:A:ARG:HD3	2	0.18	0.04	0.18
(1,2799)	1:362:A:LEU:HD11	1:359:A:TRP:H	2	0.18	0.0	0.18
(1,2799)	1:362:A:LEU:HD12	1:359:A:TRP:H	2	0.18	0.0	0.18
(1,2799)	1:362:A:LEU:HD13	1:359:A:TRP:H	2	0.18	0.0	0.18
(1,1729)	1:295:A:ALA:HA	1:298:A:GLN:H	2	0.16	0.06	0.16
(1,2772)	1:360:A:ASP:H	1:359:A:TRP:HB2	2	0.16	0.04	0.16
(1,392)	1:220:A:VAL:HB	1:234:A:HIS:HA	2	0.16	0.01	0.16
(1,977)	1:257:A:ARG:HA	1:261:A:LEU:HD11	2	0.15	0.04	0.15
(1,977)	1:257:A:ARG:HA	1:261:A:LEU:HD12	2	0.15	0.04	0.15
(1,977)	1:257:A:ARG:HA	1:261:A:LEU:HD13	2	0.15	0.04	0.15
(1,93)	1:192:A:LEU:HD21	1:237:A:PHE:HZ	2	0.15	0.04	0.15
(1,93)	1:192:A:LEU:HD22	1:237:A:PHE:HZ	2	0.15	0.04	0.15
(1,93)	1:192:A:LEU:HD23	1:237:A:PHE:HZ	2	0.15	0.04	0.15
(1,2750)	1:359:A:TRP:HE3	1:362:A:LEU:HD21	2	0.15	0.02	0.15
(1,2750)	1:359:A:TRP:HE3	1:362:A:LEU:HD22	2	0.15	0.02	0.15
(1,2750)	1:359:A:TRP:HE3	1:362:A:LEU:HD23	2	0.15	0.02	0.15
(3,122)	1:294:A:ARG:N	1:290:A:ALA:O	2	0.15	0.02	0.15
(1,1748)	1:296:A:PHE:HE1	1:297:A:LEU:HD21	2	0.14	0.03	0.14
(1,1748)	1:296:A:PHE:HE1	1:297:A:LEU:HD22	2	0.14	0.03	0.14
(1,1748)	1:296:A:PHE:HE1	1:297:A:LEU:HD23	2	0.14	0.03	0.14
(1,1748)	1:296:A:PHE:HE2	1:297:A:LEU:HD21	2	0.14	0.03	0.14
(1,1748)	1:296:A:PHE:HE2	1:297:A:LEU:HD22	2	0.14	0.03	0.14
(1,1748)	1:296:A:PHE:HE2	1:297:A:LEU:HD23	2	0.14	0.03	0.14
(1,954)	1:256:A:LEU:HD11	1:259:A:LEU:H	2	0.14	0.02	0.14
(1,954)	1:256:A:LEU:HD12	1:259:A:LEU:H	2	0.14	0.02	0.14
(1,954)	1:256:A:LEU:HD13	1:259:A:LEU:H	2	0.14	0.02	0.14
(1,2115)	1:313:A:TYR:HE1	1:315:A:TYR:H	2	0.14	0.02	0.14
(1,2115)	1:313:A:TYR:HE2	1:315:A:TYR:H	2	0.14	0.02	0.14
(1,2690)	1:354:A:CYS:HB3	1:345:A:TRP:HZ2	2	0.14	0.02	0.14
(3,12)	1:222:A:ARG:H	1:229:A:VAL:O	2	0.14	0.01	0.14
(3,104)	1:235:A:MET:N	1:232:A:ASP:O	2	0.14	0.02	0.14
(1,1545)	1:278:A:PHE:H	1:216:A:LEU:HD21	2	0.13	0.02	0.13
(1,1545)	1:278:A:PHE:H	1:216:A:LEU:HD22	2	0.13	0.02	0.13
(1,1545)	1:278:A:PHE:H	1:216:A:LEU:HD23	2	0.13	0.02	0.13
(3,7)	1:216:A:LEU:H	1:238:A:LEU:O	2	0.13	0.0	0.13
(3,70)	1:349:A:VAL:H	1:345:A:TRP:O	2	0.13	0.0	0.13
(1,1205)	1:265:A:LEU:HG	1:267:A:LEU:HD21	2	0.12	0.01	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

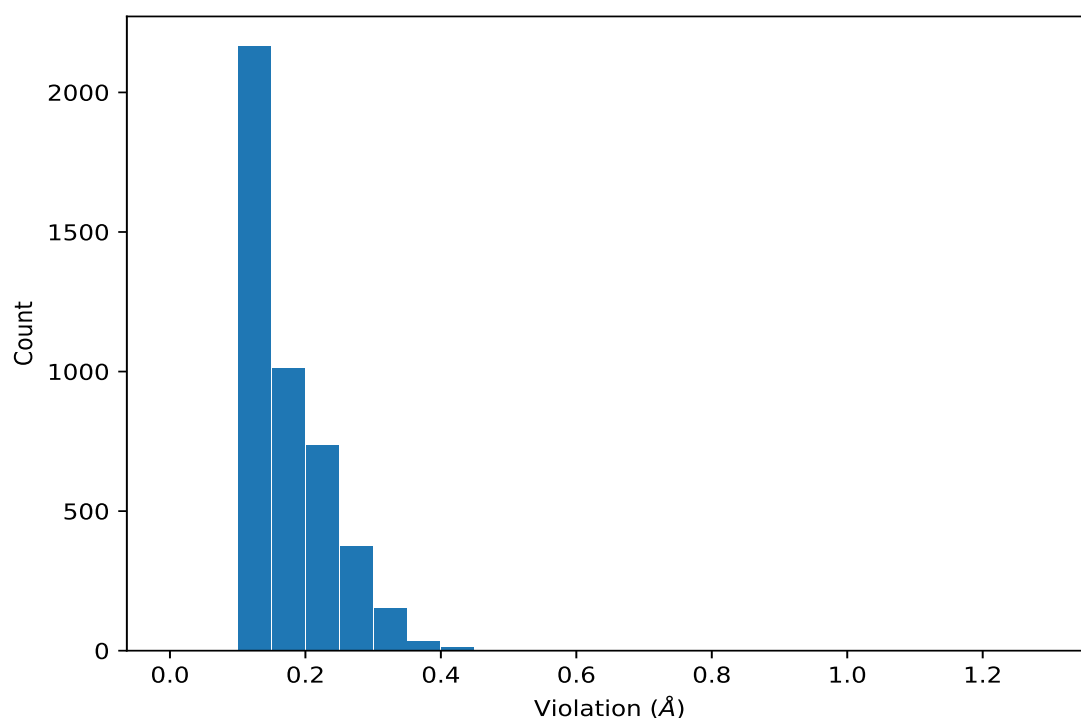
Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,1205)	1:265:A:LEU:HG	1:267:A:LEU:HD22	2	0.12	0.01	0.12
(1,1205)	1:265:A:LEU:HG	1:267:A:LEU:HD23	2	0.12	0.01	0.12
(1,2684)	1:354:A:CYS:H	1:352:A:GLN:HA	2	0.12	0.02	0.12
(1,1327)	1:271:A:GLN:HG2	1:268:A:ASP:HB2	2	0.12	0.0	0.12
(1,1922)	1:303:A:VAL:H	1:304:A:ARG:H	2	0.12	0.0	0.12
(1,2359)	1:333:A:VAL:H	1:332:A:GLN:HG3	2	0.12	0.01	0.12
(1,2717)	1:356:A:PHE:HZ	1:358:A:PRO:HB2	2	0.12	0.0	0.12
(1,2717)	1:356:A:PHE:HZ	1:358:A:PRO:HB3	2	0.12	0.0	0.12
(1,566)	1:228:A:TRP:HH2	1:223:A:LEU:HD21	2	0.12	0.0	0.12
(1,566)	1:228:A:TRP:HH2	1:223:A:LEU:HD22	2	0.12	0.0	0.12
(1,566)	1:228:A:TRP:HH2	1:223:A:LEU:HD23	2	0.12	0.0	0.12
(1,1845)	1:299:A:GLU:H	1:298:A:GLN:HG2	2	0.12	0.0	0.12
(1,1927)	1:303:A:VAL:HG21	1:305:A:LEU:H	2	0.12	0.0	0.12
(1,1927)	1:303:A:VAL:HG22	1:305:A:LEU:H	2	0.12	0.0	0.12
(1,1927)	1:303:A:VAL:HG23	1:305:A:LEU:H	2	0.12	0.0	0.12
(1,2552)	1:345:A:TRP:HD1	1:351:A:ARG:HD3	2	0.12	0.0	0.12
(1,2765)	1:359:A:TRP:HZ2	1:356:A:PHE:HZ	2	0.12	0.0	0.12
(3,107)	1:259:A:LEU:N	1:255:A:GLU:O	2	0.12	0.0	0.12
(1,2737)	1:357:A:GLN:HE22	1:357:A:GLN:HG2	2	0.11	0.0	0.11
(3,48)	1:307:A:ILE:H	1:332:A:GLN:O	2	0.11	0.01	0.11
(1,386)	1:219:A:GLU:H	1:276:A:THR:HG21	2	0.11	0.0	0.11
(1,386)	1:219:A:GLU:H	1:276:A:THR:HG22	2	0.11	0.0	0.11
(1,386)	1:219:A:GLU:H	1:276:A:THR:HG23	2	0.11	0.0	0.11
(1,2867)	1:367:A:GLN:HG3	1:364:A:GLU:HA	2	0.11	0.0	0.11
(3,13)	1:223:A:LEU:H	1:272:A:ILE:O	2	0.11	0.0	0.11

¹Number of violated models, ²Standard deviation

9.5 All violated distance restraints [i](#)

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

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



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

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

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,3070)	1:255:A:GLU:H	1:255:A:GLU:OE1	19	1.26
(1,3071)	1:255:A:GLU:N	1:255:A:GLU:OE1	19	0.96
(1,3070)	1:255:A:GLU:H	1:255:A:GLU:OE1	28	0.94
(1,3070)	1:255:A:GLU:H	1:255:A:GLU:OE1	16	0.9
(1,3071)	1:255:A:GLU:N	1:255:A:GLU:OE1	28	0.7
(1,3071)	1:255:A:GLU:N	1:255:A:GLU:OE1	16	0.66
(1,2758)	1:359:A:TRP:HE3	1:360:A:ASP:H	28	0.46
(1,2862)	1:367:A:GLN:HG2	1:364:A:GLU:HA	12	0.45
(1,2862)	1:367:A:GLN:HG2	1:364:A:GLU:HA	27	0.44
(1,638)	1:230:A:LEU:HD11	1:222:A:ARG:H	25	0.44
(1,638)	1:230:A:LEU:HD12	1:222:A:ARG:H	25	0.44
(1,638)	1:230:A:LEU:HD13	1:222:A:ARG:H	25	0.44
(1,63)	1:190:A:ARG:H	1:191:A:TYR:H	19	0.44
(1,2775)	1:360:A:ASP:HA	1:359:A:TRP:HD1	27	0.43
(1,1821)	1:299:A:GLU:HB2	1:296:A:PHE:HD1	30	0.43
(1,1821)	1:299:A:GLU:HB2	1:296:A:PHE:HD2	30	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,484)	1:223:A:LEU:HG	1:228:A:TRP:HE3	22	0.42
(1,484)	1:223:A:LEU:HG	1:228:A:TRP:HE3	25	0.41
(1,484)	1:223:A:LEU:HG	1:228:A:TRP:HE3	30	0.41
(1,2862)	1:367:A:GLN:HG2	1:364:A:GLU:HA	19	0.4
(1,484)	1:223:A:LEU:HG	1:228:A:TRP:HE3	16	0.4
(1,2776)	1:360:A:ASP:HB3	1:360:A:ASP:H	14	0.39
(1,484)	1:223:A:LEU:HG	1:228:A:TRP:HE3	12	0.39
(1,480)	1:223:A:LEU:HD11	1:224:A:ASP:HB3	24	0.39
(1,480)	1:223:A:LEU:HD12	1:224:A:ASP:HB3	24	0.39
(1,480)	1:223:A:LEU:HD13	1:224:A:ASP:HB3	24	0.39
(1,2047)	1:308:A:PHE:H	1:279:A:ILE:HG21	30	0.38
(1,2047)	1:308:A:PHE:H	1:279:A:ILE:HG22	30	0.38
(1,2047)	1:308:A:PHE:H	1:279:A:ILE:HG23	30	0.38
(1,1524)	1:277:A:TRP:HH2	1:258:A:PHE:HA	28	0.38
(1,484)	1:223:A:LEU:HG	1:228:A:TRP:HE3	6	0.38
(1,484)	1:223:A:LEU:HG	1:228:A:TRP:HE3	17	0.38
(1,484)	1:223:A:LEU:HG	1:228:A:TRP:HE3	20	0.38
(1,484)	1:223:A:LEU:HG	1:228:A:TRP:HE3	28	0.38
(1,484)	1:223:A:LEU:HG	1:228:A:TRP:HE3	29	0.38
(1,480)	1:223:A:LEU:HD11	1:224:A:ASP:HB3	15	0.38
(1,480)	1:223:A:LEU:HD12	1:224:A:ASP:HB3	15	0.38
(1,480)	1:223:A:LEU:HD13	1:224:A:ASP:HB3	15	0.38
(1,1846)	1:299:A:GLU:HB2	1:300:A:ASN:H	30	0.37
(1,484)	1:223:A:LEU:HG	1:228:A:TRP:HE3	13	0.37
(1,480)	1:223:A:LEU:HD11	1:224:A:ASP:HB3	8	0.37
(1,480)	1:223:A:LEU:HD12	1:224:A:ASP:HB3	8	0.37
(1,480)	1:223:A:LEU:HD13	1:224:A:ASP:HB3	8	0.37
(1,103)	1:192:A:LEU:HD21	1:191:A:TYR:HB2	5	0.37
(1,103)	1:192:A:LEU:HD22	1:191:A:TYR:HB2	5	0.37
(1,103)	1:192:A:LEU:HD23	1:191:A:TYR:HB2	5	0.37
(1,1524)	1:277:A:TRP:HH2	1:258:A:PHE:HA	6	0.36
(1,1524)	1:277:A:TRP:HH2	1:258:A:PHE:HA	24	0.36
(1,656)	1:230:A:LEU:HD11	1:231:A:MET:H	25	0.36
(1,656)	1:230:A:LEU:HD12	1:231:A:MET:H	25	0.36
(1,656)	1:230:A:LEU:HD13	1:231:A:MET:H	25	0.36
(1,484)	1:223:A:LEU:HG	1:228:A:TRP:HE3	4	0.36
(1,480)	1:223:A:LEU:HD11	1:224:A:ASP:HB3	21	0.36
(1,480)	1:223:A:LEU:HD12	1:224:A:ASP:HB3	21	0.36
(1,480)	1:223:A:LEU:HD13	1:224:A:ASP:HB3	21	0.36
(1,2781)	1:360:A:ASP:H	1:360:A:ASP:HB2	24	0.35
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG11	1:273:A:TYR:HA	9	0.35
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG12	1:273:A:TYR:HA	9	0.35

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG13	1:273:A:TYR:HA	9	0.35
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG11	1:273:A:TYR:HA	13	0.35
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG12	1:273:A:TYR:HA	13	0.35
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG13	1:273:A:TYR:HA	13	0.35
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG11	1:273:A:TYR:HA	23	0.35
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG12	1:273:A:TYR:HA	23	0.35
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG13	1:273:A:TYR:HA	23	0.35
(1,1524)	1:277:A:TRP:HH2	1:258:A:PHE:HA	16	0.35
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG11	1:260:A:ASP:H	30	0.35
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG12	1:260:A:ASP:H	30	0.35
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG13	1:260:A:ASP:H	30	0.35
(1,484)	1:223:A:LEU:HG	1:228:A:TRP:HE3	9	0.35
(1,484)	1:223:A:LEU:HG	1:228:A:TRP:HE3	19	0.35
(1,480)	1:223:A:LEU:HD11	1:224:A:ASP:HB3	4	0.35
(1,480)	1:223:A:LEU:HD12	1:224:A:ASP:HB3	4	0.35
(1,480)	1:223:A:LEU:HD13	1:224:A:ASP:HB3	4	0.35
(1,480)	1:223:A:LEU:HD11	1:224:A:ASP:HB3	27	0.35
(1,480)	1:223:A:LEU:HD12	1:224:A:ASP:HB3	27	0.35
(1,480)	1:223:A:LEU:HD13	1:224:A:ASP:HB3	27	0.35
(1,2781)	1:360:A:ASP:H	1:360:A:ASP:HB2	12	0.34
(1,2781)	1:360:A:ASP:H	1:360:A:ASP:HB2	19	0.34
(1,2781)	1:360:A:ASP:H	1:360:A:ASP:HB2	22	0.34
(1,2776)	1:360:A:ASP:HB3	1:360:A:ASP:H	18	0.34
(1,2775)	1:360:A:ASP:HA	1:359:A:TRP:HD1	26	0.34
(1,2713)	1:356:A:PHE:HB2	1:357:A:GLN:H	14	0.34
(1,2023)	1:307:A:ILE:HB	1:308:A:PHE:HA	26	0.34
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG21	1:262:A:VAL:HG11	30	0.34
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG21	1:262:A:VAL:HG12	30	0.34
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG21	1:262:A:VAL:HG13	30	0.34
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG22	1:262:A:VAL:HG11	30	0.34
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG22	1:262:A:VAL:HG12	30	0.34
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG22	1:262:A:VAL:HG13	30	0.34
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG23	1:262:A:VAL:HG11	30	0.34
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG23	1:262:A:VAL:HG12	30	0.34
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG23	1:262:A:VAL:HG13	30	0.34
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG11	1:273:A:TYR:HA	19	0.34
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG12	1:273:A:TYR:HA	19	0.34
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG13	1:273:A:TYR:HA	19	0.34
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG11	1:260:A:ASP:H	4	0.34
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG12	1:260:A:ASP:H	4	0.34
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG13	1:260:A:ASP:H	4	0.34
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG11	1:260:A:ASP:H	24	0.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG12	1:260:A:ASP:H	24	0.34
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG13	1:260:A:ASP:H	24	0.34
(1,725)	1:234:A:HIS:HB2	1:235:A:MET:H	7	0.34
(1,725)	1:234:A:HIS:HB2	1:235:A:MET:H	24	0.34
(1,484)	1:223:A:LEU:HG	1:228:A:TRP:HE3	1	0.34
(1,484)	1:223:A:LEU:HG	1:228:A:TRP:HE3	10	0.34
(1,484)	1:223:A:LEU:HG	1:228:A:TRP:HE3	21	0.34
(1,480)	1:223:A:LEU:HD11	1:224:A:ASP:HB3	2	0.34
(1,480)	1:223:A:LEU:HD12	1:224:A:ASP:HB3	2	0.34
(1,480)	1:223:A:LEU:HD13	1:224:A:ASP:HB3	2	0.34
(1,480)	1:223:A:LEU:HD11	1:224:A:ASP:HB3	7	0.34
(1,480)	1:223:A:LEU:HD12	1:224:A:ASP:HB3	7	0.34
(1,480)	1:223:A:LEU:HD13	1:224:A:ASP:HB3	7	0.34
(2,1)	1:255:A:GLU:OE1	2:500:A:ZN:ZN	26	0.33
(1,3029)	1:378:A:GLN:H	1:377:A:LEU:HA	5	0.33
(1,2869)	1:367:A:GLN:HB2	1:364:A:GLU:HA	17	0.33
(1,2781)	1:360:A:ASP:H	1:360:A:ASP:HB2	5	0.33
(1,2781)	1:360:A:ASP:H	1:360:A:ASP:HB2	21	0.33
(1,2776)	1:360:A:ASP:HB3	1:360:A:ASP:H	17	0.33
(1,2776)	1:360:A:ASP:HB3	1:360:A:ASP:H	23	0.33
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG11	1:273:A:TYR:HA	7	0.33
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG12	1:273:A:TYR:HA	7	0.33
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG13	1:273:A:TYR:HA	7	0.33
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG11	1:273:A:TYR:HA	21	0.33
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG12	1:273:A:TYR:HA	21	0.33
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG13	1:273:A:TYR:HA	21	0.33
(1,1524)	1:277:A:TRP:HH2	1:258:A:PHE:HA	15	0.33
(1,1116)	1:261:A:LEU:HD21	1:262:A:VAL:HG11	7	0.33
(1,1116)	1:261:A:LEU:HD21	1:262:A:VAL:HG12	7	0.33
(1,1116)	1:261:A:LEU:HD21	1:262:A:VAL:HG13	7	0.33
(1,1116)	1:261:A:LEU:HD22	1:262:A:VAL:HG11	7	0.33
(1,1116)	1:261:A:LEU:HD22	1:262:A:VAL:HG12	7	0.33
(1,1116)	1:261:A:LEU:HD22	1:262:A:VAL:HG13	7	0.33
(1,1116)	1:261:A:LEU:HD23	1:262:A:VAL:HG11	7	0.33
(1,1116)	1:261:A:LEU:HD23	1:262:A:VAL:HG12	7	0.33
(1,1116)	1:261:A:LEU:HD23	1:262:A:VAL:HG13	7	0.33
(1,484)	1:223:A:LEU:HG	1:228:A:TRP:HE3	5	0.33
(1,484)	1:223:A:LEU:HG	1:228:A:TRP:HE3	26	0.33
(1,480)	1:223:A:LEU:HD11	1:224:A:ASP:HB3	18	0.33
(1,480)	1:223:A:LEU:HD12	1:224:A:ASP:HB3	18	0.33
(1,480)	1:223:A:LEU:HD13	1:224:A:ASP:HB3	18	0.33
(1,3029)	1:378:A:GLN:H	1:377:A:LEU:HA	8	0.32

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,3029)	1:378:A:GLN:H	1:377:A:LEU:HA	10	0.32
(1,2781)	1:360:A:ASP:H	1:360:A:ASP:HB2	30	0.32
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG11	1:273:A:TYR:HA	8	0.32
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG12	1:273:A:TYR:HA	8	0.32
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG13	1:273:A:TYR:HA	8	0.32
(1,1551)	1:278:A:PHE:H	1:217:A:CYS:HB3	27	0.32
(1,1524)	1:277:A:TRP:HH2	1:258:A:PHE:HA	23	0.32
(1,656)	1:230:A:LEU:HD11	1:231:A:MET:H	28	0.32
(1,656)	1:230:A:LEU:HD12	1:231:A:MET:H	28	0.32
(1,656)	1:230:A:LEU:HD13	1:231:A:MET:H	28	0.32
(1,600)	1:229:A:VAL:HB	1:222:A:ARG:H	28	0.32
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD21	30	0.32
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD22	30	0.32
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD23	30	0.32
(1,484)	1:223:A:LEU:HG	1:228:A:TRP:HE3	2	0.32
(1,484)	1:223:A:LEU:HG	1:228:A:TRP:HE3	11	0.32
(1,484)	1:223:A:LEU:HG	1:228:A:TRP:HE3	23	0.32
(1,484)	1:223:A:LEU:HG	1:228:A:TRP:HE3	27	0.32
(1,480)	1:223:A:LEU:HD11	1:224:A:ASP:HB3	5	0.32
(1,480)	1:223:A:LEU:HD12	1:224:A:ASP:HB3	5	0.32
(1,480)	1:223:A:LEU:HD13	1:224:A:ASP:HB3	5	0.32
(1,480)	1:223:A:LEU:HD11	1:224:A:ASP:HB3	10	0.32
(1,480)	1:223:A:LEU:HD12	1:224:A:ASP:HB3	10	0.32
(1,480)	1:223:A:LEU:HD13	1:224:A:ASP:HB3	10	0.32
(1,480)	1:223:A:LEU:HD11	1:224:A:ASP:HB3	11	0.32
(1,480)	1:223:A:LEU:HD12	1:224:A:ASP:HB3	11	0.32
(1,480)	1:223:A:LEU:HD13	1:224:A:ASP:HB3	11	0.32
(1,480)	1:223:A:LEU:HD11	1:224:A:ASP:HB3	19	0.32
(1,480)	1:223:A:LEU:HD12	1:224:A:ASP:HB3	19	0.32
(1,480)	1:223:A:LEU:HD13	1:224:A:ASP:HB3	19	0.32
(1,480)	1:223:A:LEU:HD11	1:224:A:ASP:HB3	25	0.32
(1,480)	1:223:A:LEU:HD12	1:224:A:ASP:HB3	25	0.32
(1,480)	1:223:A:LEU:HD13	1:224:A:ASP:HB3	25	0.32
(1,3029)	1:378:A:GLN:H	1:377:A:LEU:HA	18	0.31
(1,2775)	1:360:A:ASP:HA	1:359:A:TRP:HD1	4	0.31
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG11	1:273:A:TYR:HA	10	0.31
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG12	1:273:A:TYR:HA	10	0.31
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG13	1:273:A:TYR:HA	10	0.31
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG11	1:273:A:TYR:HA	29	0.31
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG12	1:273:A:TYR:HA	29	0.31
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG13	1:273:A:TYR:HA	29	0.31
(1,1578)	1:279:A:ILE:HB	1:309:A:ALA:HA	1	0.31

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1551)	1:278:A:PHE:H	1:217:A:CYS:HB3	23	0.31
(1,1524)	1:277:A:TRP:HH2	1:258:A:PHE:HA	18	0.31
(1,1524)	1:277:A:TRP:HH2	1:258:A:PHE:HA	21	0.31
(1,1524)	1:277:A:TRP:HH2	1:258:A:PHE:HA	25	0.31
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG11	1:260:A:ASP:H	6	0.31
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG12	1:260:A:ASP:H	6	0.31
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG13	1:260:A:ASP:H	6	0.31
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG11	1:260:A:ASP:H	22	0.31
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG12	1:260:A:ASP:H	22	0.31
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG13	1:260:A:ASP:H	22	0.31
(1,725)	1:234:A:HIS:HB2	1:235:A:MET:H	18	0.31
(1,574)	1:228:A:TRP:HE3	1:221:A:GLU:HG3	25	0.31
(1,484)	1:223:A:LEU:HG	1:228:A:TRP:HE3	7	0.31
(1,484)	1:223:A:LEU:HG	1:228:A:TRP:HE3	14	0.31
(1,484)	1:223:A:LEU:HG	1:228:A:TRP:HE3	18	0.31
(1,480)	1:223:A:LEU:HD11	1:224:A:ASP:HB3	9	0.31
(1,480)	1:223:A:LEU:HD12	1:224:A:ASP:HB3	9	0.31
(1,480)	1:223:A:LEU:HD13	1:224:A:ASP:HB3	9	0.31
(1,480)	1:223:A:LEU:HD11	1:224:A:ASP:HB3	12	0.31
(1,480)	1:223:A:LEU:HD12	1:224:A:ASP:HB3	12	0.31
(1,480)	1:223:A:LEU:HD13	1:224:A:ASP:HB3	12	0.31
(1,480)	1:223:A:LEU:HD11	1:224:A:ASP:HB3	14	0.31
(1,480)	1:223:A:LEU:HD12	1:224:A:ASP:HB3	14	0.31
(1,480)	1:223:A:LEU:HD13	1:224:A:ASP:HB3	14	0.31
(1,3039)	1:379:A:ASN:HD22	1:379:A:ASN:HA	30	0.3
(1,2776)	1:360:A:ASP:HB3	1:360:A:ASP:H	11	0.3
(1,2775)	1:360:A:ASP:HA	1:359:A:TRP:HD1	13	0.3
(1,2713)	1:356:A:PHE:HB2	1:357:A:GLN:H	22	0.3
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG11	1:273:A:TYR:HA	1	0.3
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG12	1:273:A:TYR:HA	1	0.3
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG13	1:273:A:TYR:HA	1	0.3
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG11	1:273:A:TYR:HA	3	0.3
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG12	1:273:A:TYR:HA	3	0.3
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG13	1:273:A:TYR:HA	3	0.3
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG11	1:273:A:TYR:HA	15	0.3
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG12	1:273:A:TYR:HA	15	0.3
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG13	1:273:A:TYR:HA	15	0.3
(1,1599)	1:281:A:TRP:HZ3	1:312:A:ILE:HG22	23	0.3
(1,1551)	1:278:A:PHE:H	1:217:A:CYS:HB3	11	0.3
(1,1524)	1:277:A:TRP:HH2	1:258:A:PHE:HA	29	0.3
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG11	1:260:A:ASP:H	17	0.3
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG12	1:260:A:ASP:H	17	0.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG13	1:260:A:ASP:H	17	0.3
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG11	1:260:A:ASP:H	19	0.3
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG12	1:260:A:ASP:H	19	0.3
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG13	1:260:A:ASP:H	19	0.3
(1,656)	1:230:A:LEU:HD11	1:231:A:MET:H	13	0.3
(1,656)	1:230:A:LEU:HD12	1:231:A:MET:H	13	0.3
(1,656)	1:230:A:LEU:HD13	1:231:A:MET:H	13	0.3
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD21	12	0.3
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD22	12	0.3
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD23	12	0.3
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD21	16	0.3
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD22	16	0.3
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD23	16	0.3
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD21	22	0.3
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD22	22	0.3
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD23	22	0.3
(1,523)	1:225:A:ASN:HB2	1:225:A:ASN:HD22	10	0.3
(1,480)	1:223:A:LEU:HD11	1:224:A:ASP:HB3	17	0.3
(1,480)	1:223:A:LEU:HD12	1:224:A:ASP:HB3	17	0.3
(1,480)	1:223:A:LEU:HD13	1:224:A:ASP:HB3	17	0.3
(1,480)	1:223:A:LEU:HD11	1:224:A:ASP:HB3	23	0.3
(1,480)	1:223:A:LEU:HD12	1:224:A:ASP:HB3	23	0.3
(1,480)	1:223:A:LEU:HD13	1:224:A:ASP:HB3	23	0.3
(1,37)	1:188:A:ILE:H	1:188:A:ILE:HG21	17	0.3
(1,37)	1:188:A:ILE:H	1:188:A:ILE:HG22	17	0.3
(1,37)	1:188:A:ILE:H	1:188:A:ILE:HG23	17	0.3
(1,3039)	1:379:A:ASN:HD22	1:379:A:ASN:HA	19	0.29
(1,2775)	1:360:A:ASP:HA	1:359:A:TRP:HD1	20	0.29
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG11	1:273:A:TYR:HA	17	0.29
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG12	1:273:A:TYR:HA	17	0.29
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG13	1:273:A:TYR:HA	17	0.29
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG11	1:273:A:TYR:HA	22	0.29
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG12	1:273:A:TYR:HA	22	0.29
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG13	1:273:A:TYR:HA	22	0.29
(1,1646)	1:286:A:SER:H	1:289:A:CYS:HA	24	0.29
(1,1609)	1:281:A:TRP:HE3	1:314:A:ASP:H	20	0.29
(1,1578)	1:279:A:ILE:HB	1:309:A:ALA:HA	12	0.29
(1,1551)	1:278:A:PHE:H	1:217:A:CYS:HB3	8	0.29
(1,1524)	1:277:A:TRP:HH2	1:258:A:PHE:HA	9	0.29
(1,1333)	1:271:A:GLN:HG3	1:271:A:GLN:HA	9	0.29
(1,1206)	1:265:A:LEU:HD21	1:262:A:VAL:HB	23	0.29
(1,1206)	1:265:A:LEU:HD22	1:262:A:VAL:HB	23	0.29

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1206)	1:265:A:LEU:HD23	1:262:A:VAL:HB	23	0.29
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG11	1:260:A:ASP:H	11	0.29
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG12	1:260:A:ASP:H	11	0.29
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG13	1:260:A:ASP:H	11	0.29
(1,685)	1:231:A:MET:HE1	1:234:A:HIS:HB3	18	0.29
(1,685)	1:231:A:MET:HE2	1:234:A:HIS:HB3	18	0.29
(1,685)	1:231:A:MET:HE3	1:234:A:HIS:HB3	18	0.29
(1,650)	1:230:A:LEU:HD21	1:221:A:GLU:HG3	29	0.29
(1,650)	1:230:A:LEU:HD22	1:221:A:GLU:HG3	29	0.29
(1,650)	1:230:A:LEU:HD23	1:221:A:GLU:HG3	29	0.29
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD21	19	0.29
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD22	19	0.29
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD23	19	0.29
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD21	20	0.29
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD22	20	0.29
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD23	20	0.29
(1,523)	1:225:A:ASN:HB2	1:225:A:ASN:HD22	9	0.29
(1,484)	1:223:A:LEU:HG	1:228:A:TRP:HE3	3	0.29
(1,484)	1:223:A:LEU:HG	1:228:A:TRP:HE3	8	0.29
(1,480)	1:223:A:LEU:HD11	1:224:A:ASP:HB3	1	0.29
(1,480)	1:223:A:LEU:HD12	1:224:A:ASP:HB3	1	0.29
(1,480)	1:223:A:LEU:HD13	1:224:A:ASP:HB3	1	0.29
(1,480)	1:223:A:LEU:HD11	1:224:A:ASP:HB3	3	0.29
(1,480)	1:223:A:LEU:HD12	1:224:A:ASP:HB3	3	0.29
(1,480)	1:223:A:LEU:HD13	1:224:A:ASP:HB3	3	0.29
(1,480)	1:223:A:LEU:HD11	1:224:A:ASP:HB3	13	0.29
(1,480)	1:223:A:LEU:HD12	1:224:A:ASP:HB3	13	0.29
(1,480)	1:223:A:LEU:HD13	1:224:A:ASP:HB3	13	0.29
(1,335)	1:217:A:CYS:H	1:216:A:LEU:HB3	21	0.29
(1,335)	1:217:A:CYS:H	1:216:A:LEU:HB3	25	0.29
(1,306)	1:216:A:LEU:HD11	1:254:A:ALA:H	23	0.29
(1,306)	1:216:A:LEU:HD12	1:254:A:ALA:H	23	0.29
(1,306)	1:216:A:LEU:HD13	1:254:A:ALA:H	23	0.29
(1,37)	1:188:A:ILE:H	1:188:A:ILE:HG21	28	0.29
(1,37)	1:188:A:ILE:H	1:188:A:ILE:HG22	28	0.29
(1,37)	1:188:A:ILE:H	1:188:A:ILE:HG23	28	0.29
(1,2023)	1:307:A:ILE:HB	1:308:A:PHE:HA	11	0.28
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG11	1:273:A:TYR:HA	12	0.28
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG12	1:273:A:TYR:HA	12	0.28
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG13	1:273:A:TYR:HA	12	0.28
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG11	1:273:A:TYR:HA	18	0.28
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG12	1:273:A:TYR:HA	18	0.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG13	1:273:A:TYR:HA	18	0.28
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG11	1:273:A:TYR:HA	24	0.28
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG12	1:273:A:TYR:HA	24	0.28
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG13	1:273:A:TYR:HA	24	0.28
(1,1641)	1:285:A:PHE:HE1	1:286:A:SER:HA	16	0.28
(1,1641)	1:285:A:PHE:HE2	1:286:A:SER:HA	16	0.28
(1,1551)	1:278:A:PHE:H	1:217:A:CYS:HB3	10	0.28
(1,1551)	1:278:A:PHE:H	1:217:A:CYS:HB3	20	0.28
(1,1524)	1:277:A:TRP:HH2	1:258:A:PHE:HA	12	0.28
(1,1207)	1:265:A:LEU:HD21	1:263:A:PRO:HD3	13	0.28
(1,1207)	1:265:A:LEU:HD22	1:263:A:PRO:HD3	13	0.28
(1,1207)	1:265:A:LEU:HD23	1:263:A:PRO:HD3	13	0.28
(1,656)	1:230:A:LEU:HD11	1:231:A:MET:H	29	0.28
(1,656)	1:230:A:LEU:HD12	1:231:A:MET:H	29	0.28
(1,656)	1:230:A:LEU:HD13	1:231:A:MET:H	29	0.28
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD21	1	0.28
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD22	1	0.28
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD23	1	0.28
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD21	6	0.28
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD22	6	0.28
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD23	6	0.28
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD21	17	0.28
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD22	17	0.28
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD23	17	0.28
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD21	25	0.28
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD22	25	0.28
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD23	25	0.28
(1,480)	1:223:A:LEU:HD11	1:224:A:ASP:HB3	6	0.28
(1,480)	1:223:A:LEU:HD12	1:224:A:ASP:HB3	6	0.28
(1,480)	1:223:A:LEU:HD13	1:224:A:ASP:HB3	6	0.28
(1,480)	1:223:A:LEU:HD11	1:224:A:ASP:HB3	16	0.28
(1,480)	1:223:A:LEU:HD12	1:224:A:ASP:HB3	16	0.28
(1,480)	1:223:A:LEU:HD13	1:224:A:ASP:HB3	16	0.28
(1,480)	1:223:A:LEU:HD11	1:224:A:ASP:HB3	20	0.28
(1,480)	1:223:A:LEU:HD12	1:224:A:ASP:HB3	20	0.28
(1,480)	1:223:A:LEU:HD13	1:224:A:ASP:HB3	20	0.28
(1,480)	1:223:A:LEU:HD11	1:224:A:ASP:HB3	28	0.28
(1,480)	1:223:A:LEU:HD12	1:224:A:ASP:HB3	28	0.28
(1,480)	1:223:A:LEU:HD13	1:224:A:ASP:HB3	28	0.28
(1,63)	1:190:A:ARG:H	1:191:A:TYR:H	28	0.28
(3,74)	1:368:A:ALA:H	1:364:A:GLU:O	17	0.27
(1,2781)	1:360:A:ASP:H	1:360:A:ASP:HB2	14	0.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2775)	1:360:A:ASP:HA	1:359:A:TRP:HD1	10	0.27
(1,2364)	1:333:A:VAL:HB	1:308:A:PHE:HA	4	0.27
(1,2117)	1:313:A:TYR:HE1	1:281:A:TRP:HZ3	8	0.27
(1,2117)	1:313:A:TYR:HE2	1:281:A:TRP:HZ3	8	0.27
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG11	1:273:A:TYR:HA	2	0.27
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG12	1:273:A:TYR:HA	2	0.27
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG13	1:273:A:TYR:HA	2	0.27
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG11	1:273:A:TYR:HA	20	0.27
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG12	1:273:A:TYR:HA	20	0.27
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG13	1:273:A:TYR:HA	20	0.27
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG11	1:273:A:TYR:HA	28	0.27
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG12	1:273:A:TYR:HA	28	0.27
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG13	1:273:A:TYR:HA	28	0.27
(1,1876)	1:302:A:HIS:HD2	1:303:A:VAL:HB	16	0.27
(1,1876)	1:302:A:HIS:HD2	1:303:A:VAL:HB	30	0.27
(1,1609)	1:281:A:TRP:HE3	1:314:A:ASP:H	3	0.27
(1,1551)	1:278:A:PHE:H	1:217:A:CYS:HB3	17	0.27
(1,1524)	1:277:A:TRP:HH2	1:258:A:PHE:HA	10	0.27
(1,1524)	1:277:A:TRP:HH2	1:258:A:PHE:HA	13	0.27
(1,1524)	1:277:A:TRP:HH2	1:258:A:PHE:HA	14	0.27
(1,1524)	1:277:A:TRP:HH2	1:258:A:PHE:HA	30	0.27
(1,1491)	1:277:A:TRP:HE1	1:305:A:LEU:HG	12	0.27
(1,1206)	1:265:A:LEU:HD21	1:262:A:VAL:HB	15	0.27
(1,1206)	1:265:A:LEU:HD22	1:262:A:VAL:HB	15	0.27
(1,1206)	1:265:A:LEU:HD23	1:262:A:VAL:HB	15	0.27
(1,1206)	1:265:A:LEU:HD21	1:262:A:VAL:HB	28	0.27
(1,1206)	1:265:A:LEU:HD22	1:262:A:VAL:HB	28	0.27
(1,1206)	1:265:A:LEU:HD23	1:262:A:VAL:HB	28	0.27
(1,1185)	1:264:A:SER:H	1:261:A:LEU:HA	30	0.27
(1,1164)	1:262:A:VAL:HB	1:265:A:LEU:H	25	0.27
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG11	1:260:A:ASP:H	16	0.27
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG12	1:260:A:ASP:H	16	0.27
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG13	1:260:A:ASP:H	16	0.27
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG11	1:260:A:ASP:H	25	0.27
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG12	1:260:A:ASP:H	25	0.27
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG13	1:260:A:ASP:H	25	0.27
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG11	1:260:A:ASP:H	27	0.27
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG12	1:260:A:ASP:H	27	0.27
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG13	1:260:A:ASP:H	27	0.27
(1,600)	1:229:A:VAL:HB	1:222:A:ARG:H	13	0.27
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD21	4	0.27
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD22	4	0.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD23	4	0.27
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD21	13	0.27
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD22	13	0.27
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD23	13	0.27
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD21	21	0.27
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD22	21	0.27
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD23	21	0.27
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD21	26	0.27
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD22	26	0.27
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD23	26	0.27
(1,484)	1:223:A:LEU:HG	1:228:A:TRP:HE3	15	0.27
(1,480)	1:223:A:LEU:HD11	1:224:A:ASP:HB3	22	0.27
(1,480)	1:223:A:LEU:HD12	1:224:A:ASP:HB3	22	0.27
(1,480)	1:223:A:LEU:HD13	1:224:A:ASP:HB3	22	0.27
(1,335)	1:217:A:CYS:H	1:216:A:LEU:HB3	14	0.27
(1,335)	1:217:A:CYS:H	1:216:A:LEU:HB3	29	0.27
(1,68)	1:191:A:TYR:H	1:192:A:LEU:H	8	0.27
(1,67)	1:190:A:ARG:HA	1:237:A:PHE:HE1	27	0.27
(1,67)	1:190:A:ARG:HA	1:237:A:PHE:HE2	27	0.27
(1,63)	1:190:A:ARG:H	1:191:A:TYR:H	5	0.27
(1,2858)	1:367:A:GLN:HE22	1:366:A:SER:H	19	0.26
(1,2731)	1:357:A:GLN:H	1:356:A:PHE:HB3	19	0.26
(1,2713)	1:356:A:PHE:HB2	1:357:A:GLN:H	24	0.26
(1,2117)	1:313:A:TYR:HE1	1:281:A:TRP:HZ3	15	0.26
(1,2117)	1:313:A:TYR:HE2	1:281:A:TRP:HZ3	15	0.26
(1,1578)	1:279:A:ILE:HB	1:309:A:ALA:HA	2	0.26
(1,1551)	1:278:A:PHE:H	1:217:A:CYS:HB3	30	0.26
(1,1524)	1:277:A:TRP:HH2	1:258:A:PHE:HA	1	0.26
(1,1524)	1:277:A:TRP:HH2	1:258:A:PHE:HA	8	0.26
(1,1207)	1:265:A:LEU:HD21	1:263:A:PRO:HD3	7	0.26
(1,1207)	1:265:A:LEU:HD22	1:263:A:PRO:HD3	7	0.26
(1,1207)	1:265:A:LEU:HD23	1:263:A:PRO:HD3	7	0.26
(1,1206)	1:265:A:LEU:HD21	1:262:A:VAL:HB	25	0.26
(1,1206)	1:265:A:LEU:HD22	1:262:A:VAL:HB	25	0.26
(1,1206)	1:265:A:LEU:HD23	1:262:A:VAL:HB	25	0.26
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG11	1:260:A:ASP:H	12	0.26
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG12	1:260:A:ASP:H	12	0.26
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG13	1:260:A:ASP:H	12	0.26
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG11	1:260:A:ASP:H	28	0.26
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG12	1:260:A:ASP:H	28	0.26
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG13	1:260:A:ASP:H	28	0.26
(1,600)	1:229:A:VAL:HB	1:222:A:ARG:H	29	0.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD21	2	0.26
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD22	2	0.26
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD23	2	0.26
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD21	5	0.26
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD22	5	0.26
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD23	5	0.26
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD21	10	0.26
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD22	10	0.26
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD23	10	0.26
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD21	27	0.26
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD22	27	0.26
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD23	27	0.26
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD21	28	0.26
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD22	28	0.26
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD23	28	0.26
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD21	29	0.26
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD22	29	0.26
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD23	29	0.26
(1,499)	1:224:A:ASP:H	1:229:A:VAL:HB	26	0.26
(1,499)	1:224:A:ASP:H	1:229:A:VAL:HB	30	0.26
(1,484)	1:223:A:LEU:HG	1:228:A:TRP:HE3	24	0.26
(1,480)	1:223:A:LEU:HD11	1:224:A:ASP:HB3	26	0.26
(1,480)	1:223:A:LEU:HD12	1:224:A:ASP:HB3	26	0.26
(1,480)	1:223:A:LEU:HD13	1:224:A:ASP:HB3	26	0.26
(1,480)	1:223:A:LEU:HD11	1:224:A:ASP:HB3	29	0.26
(1,480)	1:223:A:LEU:HD12	1:224:A:ASP:HB3	29	0.26
(1,480)	1:223:A:LEU:HD13	1:224:A:ASP:HB3	29	0.26
(1,335)	1:217:A:CYS:H	1:216:A:LEU:HB3	7	0.26
(1,335)	1:217:A:CYS:H	1:216:A:LEU:HB3	12	0.26
(1,335)	1:217:A:CYS:H	1:216:A:LEU:HB3	13	0.26
(1,335)	1:217:A:CYS:H	1:216:A:LEU:HB3	16	0.26
(1,302)	1:216:A:LEU:HD21	1:255:A:GLU:HB2	26	0.26
(1,302)	1:216:A:LEU:HD22	1:255:A:GLU:HB2	26	0.26
(1,302)	1:216:A:LEU:HD23	1:255:A:GLU:HB2	26	0.26
(1,69)	1:191:A:TYR:H	1:237:A:PHE:HZ	10	0.26
(3,25)	1:260:A:ASP:H	1:256:A:LEU:O	22	0.25
(1,2775)	1:360:A:ASP:HA	1:359:A:TRP:HD1	8	0.25
(1,2758)	1:359:A:TRP:HE3	1:360:A:ASP:H	27	0.25
(1,2364)	1:333:A:VAL:HB	1:308:A:PHE:HA	9	0.25
(1,2364)	1:333:A:VAL:HB	1:308:A:PHE:HA	28	0.25
(1,2159)	1:320:A:LYS:HD2	1:320:A:LYS:HA	16	0.25
(1,1937)	1:304:A:ARG:H	1:303:A:VAL:HB	9	0.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG11	1:273:A:TYR:HA	4	0.25
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG12	1:273:A:TYR:HA	4	0.25
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG13	1:273:A:TYR:HA	4	0.25
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG11	1:273:A:TYR:HA	14	0.25
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG12	1:273:A:TYR:HA	14	0.25
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG13	1:273:A:TYR:HA	14	0.25
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG11	1:273:A:TYR:HA	25	0.25
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG12	1:273:A:TYR:HA	25	0.25
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG13	1:273:A:TYR:HA	25	0.25
(1,1646)	1:286:A:SER:H	1:289:A:CYS:HA	5	0.25
(1,1646)	1:286:A:SER:H	1:289:A:CYS:HA	29	0.25
(1,1609)	1:281:A:TRP:HE3	1:314:A:ASP:H	10	0.25
(1,1551)	1:278:A:PHE:H	1:217:A:CYS:HB3	9	0.25
(1,1524)	1:277:A:TRP:HH2	1:258:A:PHE:HA	5	0.25
(1,1524)	1:277:A:TRP:HH2	1:258:A:PHE:HA	27	0.25
(1,1491)	1:277:A:TRP:HE1	1:305:A:LEU:HG	16	0.25
(1,1317)	1:270:A:ALA:H	1:269:A:PRO:HA	2	0.25
(1,1317)	1:270:A:ALA:H	1:269:A:PRO:HA	12	0.25
(1,1317)	1:270:A:ALA:H	1:269:A:PRO:HA	13	0.25
(1,1317)	1:270:A:ALA:H	1:269:A:PRO:HA	27	0.25
(1,1206)	1:265:A:LEU:HD21	1:262:A:VAL:HB	10	0.25
(1,1206)	1:265:A:LEU:HD22	1:262:A:VAL:HB	10	0.25
(1,1206)	1:265:A:LEU:HD23	1:262:A:VAL:HB	10	0.25
(1,1206)	1:265:A:LEU:HD21	1:262:A:VAL:HB	21	0.25
(1,1206)	1:265:A:LEU:HD22	1:262:A:VAL:HB	21	0.25
(1,1206)	1:265:A:LEU:HD23	1:262:A:VAL:HB	21	0.25
(1,1206)	1:265:A:LEU:HD21	1:262:A:VAL:HB	29	0.25
(1,1206)	1:265:A:LEU:HD22	1:262:A:VAL:HB	29	0.25
(1,1206)	1:265:A:LEU:HD23	1:262:A:VAL:HB	29	0.25
(1,1185)	1:264:A:SER:H	1:261:A:LEU:HA	16	0.25
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD21	4	0.25
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD22	4	0.25
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD23	4	0.25
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD21	4	0.25
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD22	4	0.25
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD23	4	0.25
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD21	4	0.25
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD22	4	0.25
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD23	4	0.25
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD21	20	0.25
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD22	20	0.25
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD23	20	0.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD21	20	0.25
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD22	20	0.25
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD23	20	0.25
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD21	20	0.25
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD22	20	0.25
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD23	20	0.25
(1,1116)	1:261:A:LEU:HD21	1:262:A:VAL:HG11	25	0.25
(1,1116)	1:261:A:LEU:HD21	1:262:A:VAL:HG12	25	0.25
(1,1116)	1:261:A:LEU:HD21	1:262:A:VAL:HG13	25	0.25
(1,1116)	1:261:A:LEU:HD22	1:262:A:VAL:HG11	25	0.25
(1,1116)	1:261:A:LEU:HD22	1:262:A:VAL:HG12	25	0.25
(1,1116)	1:261:A:LEU:HD22	1:262:A:VAL:HG13	25	0.25
(1,1116)	1:261:A:LEU:HD23	1:262:A:VAL:HG11	25	0.25
(1,1116)	1:261:A:LEU:HD23	1:262:A:VAL:HG12	25	0.25
(1,1116)	1:261:A:LEU:HD23	1:262:A:VAL:HG13	25	0.25
(1,1101)	1:261:A:LEU:HD21	1:238:A:LEU:HB2	17	0.25
(1,1101)	1:261:A:LEU:HD22	1:238:A:LEU:HB2	17	0.25
(1,1101)	1:261:A:LEU:HD23	1:238:A:LEU:HB2	17	0.25
(1,735)	1:235:A:MET:HB2	1:235:A:MET:H	24	0.25
(1,658)	1:230:A:LEU:HD21	1:230:A:LEU:H	13	0.25
(1,658)	1:230:A:LEU:HD22	1:230:A:LEU:H	13	0.25
(1,658)	1:230:A:LEU:HD23	1:230:A:LEU:H	13	0.25
(1,638)	1:230:A:LEU:HD11	1:222:A:ARG:H	28	0.25
(1,638)	1:230:A:LEU:HD12	1:222:A:ARG:H	28	0.25
(1,638)	1:230:A:LEU:HD13	1:222:A:ARG:H	28	0.25
(1,600)	1:229:A:VAL:HB	1:222:A:ARG:H	25	0.25
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD21	3	0.25
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD22	3	0.25
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD23	3	0.25
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD21	9	0.25
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD22	9	0.25
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD23	9	0.25
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD21	11	0.25
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD22	11	0.25
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD23	11	0.25
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD21	23	0.25
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD22	23	0.25
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD23	23	0.25
(1,557)	1:227:A:THR:HB	1:228:A:TRP:H	16	0.25
(1,501)	1:224:A:ASP:HB3	1:229:A:VAL:HB	3	0.25
(1,501)	1:224:A:ASP:HB3	1:229:A:VAL:HB	26	0.25
(1,499)	1:224:A:ASP:H	1:229:A:VAL:HB	1	0.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,499)	1:224:A:ASP:H	1:229:A:VAL:HB	2	0.25
(1,499)	1:224:A:ASP:H	1:229:A:VAL:HB	3	0.25
(1,499)	1:224:A:ASP:H	1:229:A:VAL:HB	5	0.25
(1,499)	1:224:A:ASP:H	1:229:A:VAL:HB	11	0.25
(1,499)	1:224:A:ASP:H	1:229:A:VAL:HB	17	0.25
(1,499)	1:224:A:ASP:H	1:229:A:VAL:HB	19	0.25
(1,499)	1:224:A:ASP:H	1:229:A:VAL:HB	21	0.25
(1,480)	1:223:A:LEU:HD11	1:224:A:ASP:HB3	30	0.25
(1,480)	1:223:A:LEU:HD12	1:224:A:ASP:HB3	30	0.25
(1,480)	1:223:A:LEU:HD13	1:224:A:ASP:HB3	30	0.25
(1,335)	1:217:A:CYS:H	1:216:A:LEU:HB3	3	0.25
(1,335)	1:217:A:CYS:H	1:216:A:LEU:HB3	6	0.25
(1,335)	1:217:A:CYS:H	1:216:A:LEU:HB3	9	0.25
(1,335)	1:217:A:CYS:H	1:216:A:LEU:HB3	24	0.25
(1,145)	1:194:A:ASP:HB3	1:193:A:MET:HA	29	0.25
(1,106)	1:192:A:LEU:HD21	1:191:A:TYR:HB3	10	0.25
(1,106)	1:192:A:LEU:HD22	1:191:A:TYR:HB3	10	0.25
(1,106)	1:192:A:LEU:HD23	1:191:A:TYR:HB3	10	0.25
(1,85)	1:192:A:LEU:HD21	1:348:A:PHE:H	5	0.25
(1,85)	1:192:A:LEU:HD22	1:348:A:PHE:H	5	0.25
(1,85)	1:192:A:LEU:HD23	1:348:A:PHE:H	5	0.25
(1,66)	1:190:A:ARG:H	1:190:A:ARG:HG2	15	0.25
(3,25)	1:260:A:ASP:H	1:256:A:LEU:O	11	0.24
(2,2)	1:255:A:GLU:OE2	2:500:A:ZN:ZN	30	0.24
(1,2791)	1:362:A:LEU:H	1:359:A:TRP:H	18	0.24
(1,2775)	1:360:A:ASP:HA	1:359:A:TRP:HD1	25	0.24
(1,2364)	1:333:A:VAL:HB	1:308:A:PHE:HA	5	0.24
(1,2364)	1:333:A:VAL:HB	1:308:A:PHE:HA	13	0.24
(1,2117)	1:313:A:TYR:HE1	1:281:A:TRP:HZ3	17	0.24
(1,2117)	1:313:A:TYR:HE2	1:281:A:TRP:HZ3	17	0.24
(1,2117)	1:313:A:TYR:HE1	1:281:A:TRP:HZ3	20	0.24
(1,2117)	1:313:A:TYR:HE2	1:281:A:TRP:HZ3	20	0.24
(1,2117)	1:313:A:TYR:HE1	1:281:A:TRP:HZ3	29	0.24
(1,2117)	1:313:A:TYR:HE2	1:281:A:TRP:HZ3	29	0.24
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG21	1:262:A:VAL:HG11	7	0.24
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG21	1:262:A:VAL:HG12	7	0.24
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG21	1:262:A:VAL:HG13	7	0.24
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG22	1:262:A:VAL:HG11	7	0.24
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG22	1:262:A:VAL:HG12	7	0.24
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG22	1:262:A:VAL:HG13	7	0.24
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG23	1:262:A:VAL:HG11	7	0.24
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG23	1:262:A:VAL:HG12	7	0.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG23	1:262:A:VAL:HG13	7	0.24
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG21	1:262:A:VAL:HG11	16	0.24
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG21	1:262:A:VAL:HG12	16	0.24
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG21	1:262:A:VAL:HG13	16	0.24
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG22	1:262:A:VAL:HG11	16	0.24
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG22	1:262:A:VAL:HG12	16	0.24
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG22	1:262:A:VAL:HG13	16	0.24
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG23	1:262:A:VAL:HG11	16	0.24
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG23	1:262:A:VAL:HG12	16	0.24
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG23	1:262:A:VAL:HG13	16	0.24
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG11	1:273:A:TYR:HA	5	0.24
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG12	1:273:A:TYR:HA	5	0.24
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG13	1:273:A:TYR:HA	5	0.24
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG11	1:273:A:TYR:HA	6	0.24
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG12	1:273:A:TYR:HA	6	0.24
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG13	1:273:A:TYR:HA	6	0.24
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG11	1:273:A:TYR:HA	27	0.24
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG12	1:273:A:TYR:HA	27	0.24
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG13	1:273:A:TYR:HA	27	0.24
(1,1641)	1:285:A:PHE:HE1	1:286:A:SER:HA	24	0.24
(1,1641)	1:285:A:PHE:HE2	1:286:A:SER:HA	24	0.24
(1,1599)	1:281:A:TRP:HZ3	1:312:A:ILE:HG22	1	0.24
(1,1524)	1:277:A:TRP:HH2	1:258:A:PHE:HA	26	0.24
(1,1491)	1:277:A:TRP:HE1	1:305:A:LEU:HG	15	0.24
(1,1333)	1:271:A:GLN:HG3	1:271:A:GLN:HA	30	0.24
(1,1317)	1:270:A:ALA:H	1:269:A:PRO:HA	3	0.24
(1,1317)	1:270:A:ALA:H	1:269:A:PRO:HA	5	0.24
(1,1317)	1:270:A:ALA:H	1:269:A:PRO:HA	7	0.24
(1,1317)	1:270:A:ALA:H	1:269:A:PRO:HA	14	0.24
(1,1317)	1:270:A:ALA:H	1:269:A:PRO:HA	21	0.24
(1,1317)	1:270:A:ALA:H	1:269:A:PRO:HA	24	0.24
(1,1317)	1:270:A:ALA:H	1:269:A:PRO:HA	26	0.24
(1,1207)	1:265:A:LEU:HD21	1:263:A:PRO:HD3	18	0.24
(1,1207)	1:265:A:LEU:HD22	1:263:A:PRO:HD3	18	0.24
(1,1207)	1:265:A:LEU:HD23	1:263:A:PRO:HD3	18	0.24
(1,1206)	1:265:A:LEU:HD21	1:262:A:VAL:HB	9	0.24
(1,1206)	1:265:A:LEU:HD22	1:262:A:VAL:HB	9	0.24
(1,1206)	1:265:A:LEU:HD23	1:262:A:VAL:HB	9	0.24
(1,1185)	1:264:A:SER:H	1:261:A:LEU:HA	27	0.24
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD21	17	0.24
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD22	17	0.24
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD23	17	0.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD21	17	0.24
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD22	17	0.24
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD23	17	0.24
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD21	17	0.24
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD22	17	0.24
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD23	17	0.24
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD21	22	0.24
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD22	22	0.24
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD23	22	0.24
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD21	22	0.24
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD22	22	0.24
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD23	22	0.24
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD21	22	0.24
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD22	22	0.24
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD23	22	0.24
(1,1164)	1:262:A:VAL:HB	1:265:A:LEU:H	7	0.24
(1,1164)	1:262:A:VAL:HB	1:265:A:LEU:H	18	0.24
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG11	1:260:A:ASP:H	20	0.24
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG12	1:260:A:ASP:H	20	0.24
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG13	1:260:A:ASP:H	20	0.24
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG11	1:260:A:ASP:H	21	0.24
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG12	1:260:A:ASP:H	21	0.24
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG13	1:260:A:ASP:H	21	0.24
(1,1148)	1:262:A:VAL:HG21	1:263:A:PRO:HG2	6	0.24
(1,1148)	1:262:A:VAL:HG22	1:263:A:PRO:HG2	6	0.24
(1,1148)	1:262:A:VAL:HG23	1:263:A:PRO:HG2	6	0.24
(1,1148)	1:262:A:VAL:HG21	1:263:A:PRO:HG2	28	0.24
(1,1148)	1:262:A:VAL:HG22	1:263:A:PRO:HG2	28	0.24
(1,1148)	1:262:A:VAL:HG23	1:263:A:PRO:HG2	28	0.24
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD11	1:262:A:VAL:HG11	13	0.24
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD11	1:262:A:VAL:HG12	13	0.24
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD11	1:262:A:VAL:HG13	13	0.24
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD12	1:262:A:VAL:HG11	13	0.24
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD12	1:262:A:VAL:HG12	13	0.24
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD12	1:262:A:VAL:HG13	13	0.24
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD13	1:262:A:VAL:HG11	13	0.24
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD13	1:262:A:VAL:HG12	13	0.24
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD13	1:262:A:VAL:HG13	13	0.24
(1,1101)	1:261:A:LEU:HD21	1:238:A:LEU:HB2	11	0.24
(1,1101)	1:261:A:LEU:HD22	1:238:A:LEU:HB2	11	0.24
(1,1101)	1:261:A:LEU:HD23	1:238:A:LEU:HB2	11	0.24
(1,837)	1:241:A:GLU:H	1:252:A:ARG:HB2	16	0.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,595)	1:228:A:TRP:HH2	1:222:A:ARG:HA	28	0.24
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD21	8	0.24
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD22	8	0.24
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD23	8	0.24
(1,557)	1:227:A:THR:HB	1:228:A:TRP:H	13	0.24
(1,557)	1:227:A:THR:HB	1:228:A:TRP:H	22	0.24
(1,557)	1:227:A:THR:HB	1:228:A:TRP:H	29	0.24
(1,501)	1:224:A:ASP:HB3	1:229:A:VAL:HB	1	0.24
(1,501)	1:224:A:ASP:HB3	1:229:A:VAL:HB	2	0.24
(1,501)	1:224:A:ASP:HB3	1:229:A:VAL:HB	23	0.24
(1,499)	1:224:A:ASP:H	1:229:A:VAL:HB	4	0.24
(1,499)	1:224:A:ASP:H	1:229:A:VAL:HB	6	0.24
(1,499)	1:224:A:ASP:H	1:229:A:VAL:HB	10	0.24
(1,499)	1:224:A:ASP:H	1:229:A:VAL:HB	12	0.24
(1,499)	1:224:A:ASP:H	1:229:A:VAL:HB	14	0.24
(1,499)	1:224:A:ASP:H	1:229:A:VAL:HB	20	0.24
(1,499)	1:224:A:ASP:H	1:229:A:VAL:HB	22	0.24
(1,499)	1:224:A:ASP:H	1:229:A:VAL:HB	23	0.24
(1,499)	1:224:A:ASP:H	1:229:A:VAL:HB	25	0.24
(1,499)	1:224:A:ASP:H	1:229:A:VAL:HB	27	0.24
(1,499)	1:224:A:ASP:H	1:229:A:VAL:HB	28	0.24
(1,66)	1:190:A:ARG:H	1:190:A:ARG:HG2	27	0.24
(1,63)	1:190:A:ARG:H	1:191:A:TYR:H	30	0.24
(3,25)	1:260:A:ASP:H	1:256:A:LEU:O	20	0.23
(3,21)	1:235:A:MET:H	1:232:A:ASP:O	7	0.23
(1,2731)	1:357:A:GLN:H	1:356:A:PHE:HB3	28	0.23
(1,2364)	1:333:A:VAL:HB	1:308:A:PHE:HA	6	0.23
(1,2364)	1:333:A:VAL:HB	1:308:A:PHE:HA	7	0.23
(1,2159)	1:320:A:LYS:HD2	1:320:A:LYS:HA	1	0.23
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD21	14	0.23
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD22	14	0.23
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD23	14	0.23
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD21	14	0.23
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD22	14	0.23
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD23	14	0.23
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD21	14	0.23
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD22	14	0.23
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD23	14	0.23
(1,1895)	1:303:A:VAL:HB	1:296:A:PHE:HE1	30	0.23
(1,1895)	1:303:A:VAL:HB	1:296:A:PHE:HE2	30	0.23
(1,1876)	1:302:A:HIS:HD2	1:303:A:VAL:HB	24	0.23
(1,1876)	1:302:A:HIS:HD2	1:303:A:VAL:HB	27	0.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1560)	1:279:A:ILE:HG12	1:309:A:ALA:HA	10	0.23
(1,1551)	1:278:A:PHE:H	1:217:A:CYS:HB3	15	0.23
(1,1491)	1:277:A:TRP:HE1	1:305:A:LEU:HG	24	0.23
(1,1317)	1:270:A:ALA:H	1:269:A:PRO:HA	18	0.23
(1,1207)	1:265:A:LEU:HD21	1:263:A:PRO:HD3	21	0.23
(1,1207)	1:265:A:LEU:HD22	1:263:A:PRO:HD3	21	0.23
(1,1207)	1:265:A:LEU:HD23	1:263:A:PRO:HD3	21	0.23
(1,1206)	1:265:A:LEU:HD21	1:262:A:VAL:HB	14	0.23
(1,1206)	1:265:A:LEU:HD22	1:262:A:VAL:HB	14	0.23
(1,1206)	1:265:A:LEU:HD23	1:262:A:VAL:HB	14	0.23
(1,1173)	1:262:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HG	16	0.23
(1,1173)	1:262:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HG	16	0.23
(1,1173)	1:262:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HG	16	0.23
(1,1164)	1:262:A:VAL:HB	1:265:A:LEU:H	9	0.23
(1,1164)	1:262:A:VAL:HB	1:265:A:LEU:H	28	0.23
(1,1164)	1:262:A:VAL:HB	1:265:A:LEU:H	29	0.23
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG11	1:260:A:ASP:H	1	0.23
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG12	1:260:A:ASP:H	1	0.23
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG13	1:260:A:ASP:H	1	0.23
(1,1148)	1:262:A:VAL:HG21	1:263:A:PRO:HG2	24	0.23
(1,1148)	1:262:A:VAL:HG22	1:263:A:PRO:HG2	24	0.23
(1,1148)	1:262:A:VAL:HG23	1:263:A:PRO:HG2	24	0.23
(1,1141)	1:262:A:VAL:HG11	1:265:A:LEU:HG	27	0.23
(1,1141)	1:262:A:VAL:HG12	1:265:A:LEU:HG	27	0.23
(1,1141)	1:262:A:VAL:HG13	1:265:A:LEU:HG	27	0.23
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD11	1:262:A:VAL:HG11	29	0.23
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD11	1:262:A:VAL:HG12	29	0.23
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD11	1:262:A:VAL:HG13	29	0.23
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD12	1:262:A:VAL:HG11	29	0.23
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD12	1:262:A:VAL:HG12	29	0.23
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD12	1:262:A:VAL:HG13	29	0.23
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD13	1:262:A:VAL:HG11	29	0.23
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD13	1:262:A:VAL:HG12	29	0.23
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD13	1:262:A:VAL:HG13	29	0.23
(1,1079)	1:260:A:ASP:H	1:259:A:LEU:HG	17	0.23
(1,956)	1:256:A:LEU:H	1:254:A:ALA:H	4	0.23
(1,735)	1:235:A:MET:HB2	1:235:A:MET:H	16	0.23
(1,685)	1:231:A:MET:HE1	1:234:A:HIS:HB3	24	0.23
(1,685)	1:231:A:MET:HE2	1:234:A:HIS:HB3	24	0.23
(1,685)	1:231:A:MET:HE3	1:234:A:HIS:HB3	24	0.23
(1,653)	1:230:A:LEU:HD21	1:229:A:VAL:HA	29	0.23
(1,653)	1:230:A:LEU:HD22	1:229:A:VAL:HA	29	0.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,653)	1:230:A:LEU:HD23	1:229:A:VAL:HA	29	0.23
(1,640)	1:230:A:LEU:HD11	1:228:A:TRP:HE3	4	0.23
(1,640)	1:230:A:LEU:HD12	1:228:A:TRP:HE3	4	0.23
(1,640)	1:230:A:LEU:HD13	1:228:A:TRP:HE3	4	0.23
(1,595)	1:228:A:TRP:HH2	1:222:A:ARG:HA	29	0.23
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD21	14	0.23
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD22	14	0.23
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD23	14	0.23
(1,557)	1:227:A:THR:HB	1:228:A:TRP:H	6	0.23
(1,557)	1:227:A:THR:HB	1:228:A:TRP:H	20	0.23
(1,557)	1:227:A:THR:HB	1:228:A:TRP:H	28	0.23
(1,557)	1:227:A:THR:HB	1:228:A:TRP:H	30	0.23
(1,501)	1:224:A:ASP:HB3	1:229:A:VAL:HB	5	0.23
(1,501)	1:224:A:ASP:HB3	1:229:A:VAL:HB	11	0.23
(1,501)	1:224:A:ASP:HB3	1:229:A:VAL:HB	14	0.23
(1,501)	1:224:A:ASP:HB3	1:229:A:VAL:HB	30	0.23
(1,499)	1:224:A:ASP:H	1:229:A:VAL:HB	8	0.23
(1,499)	1:224:A:ASP:H	1:229:A:VAL:HB	9	0.23
(1,499)	1:224:A:ASP:H	1:229:A:VAL:HB	13	0.23
(1,499)	1:224:A:ASP:H	1:229:A:VAL:HB	16	0.23
(1,337)	1:217:A:CYS:HB2	1:237:A:PHE:HA	6	0.23
(1,337)	1:217:A:CYS:HB2	1:237:A:PHE:HA	26	0.23
(1,335)	1:217:A:CYS:H	1:216:A:LEU:HB3	4	0.23
(1,306)	1:216:A:LEU:HD11	1:254:A:ALA:H	8	0.23
(1,306)	1:216:A:LEU:HD12	1:254:A:ALA:H	8	0.23
(1,306)	1:216:A:LEU:HD13	1:254:A:ALA:H	8	0.23
(1,278)	1:216:A:LEU:HD11	1:258:A:PHE:HB3	16	0.23
(1,278)	1:216:A:LEU:HD12	1:258:A:PHE:HB3	16	0.23
(1,278)	1:216:A:LEU:HD13	1:258:A:PHE:HB3	16	0.23
(1,63)	1:190:A:ARG:H	1:191:A:TYR:H	2	0.23
(3,59)	1:332:A:GLN:H	1:305:A:LEU:O	15	0.22
(3,59)	1:332:A:GLN:H	1:305:A:LEU:O	18	0.22
(3,59)	1:332:A:GLN:H	1:305:A:LEU:O	22	0.22
(3,59)	1:332:A:GLN:H	1:305:A:LEU:O	29	0.22
(3,37)	1:280:A:SER:H	1:215:A:TYR:O	10	0.22
(3,37)	1:280:A:SER:H	1:215:A:TYR:O	27	0.22
(1,3070)	1:255:A:GLU:H	1:255:A:GLU:OE1	21	0.22
(1,2791)	1:362:A:LEU:H	1:359:A:TRP:H	11	0.22
(1,2791)	1:362:A:LEU:H	1:359:A:TRP:H	17	0.22
(1,2773)	1:360:A:ASP:H	1:359:A:TRP:H	14	0.22
(1,2731)	1:357:A:GLN:H	1:356:A:PHE:HB3	20	0.22
(1,2625)	1:349:A:VAL:HG21	1:351:A:ARG:HD3	23	0.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2625)	1:349:A:VAL:HG22	1:351:A:ARG:HD3	23	0.22
(1,2625)	1:349:A:VAL:HG23	1:351:A:ARG:HD3	23	0.22
(1,2364)	1:333:A:VAL:HB	1:308:A:PHE:HA	10	0.22
(1,2364)	1:333:A:VAL:HB	1:308:A:PHE:HA	18	0.22
(1,2117)	1:313:A:TYR:HE1	1:281:A:TRP:HZ3	9	0.22
(1,2117)	1:313:A:TYR:HE2	1:281:A:TRP:HZ3	9	0.22
(1,2117)	1:313:A:TYR:HE1	1:281:A:TRP:HZ3	13	0.22
(1,2117)	1:313:A:TYR:HE2	1:281:A:TRP:HZ3	13	0.22
(1,2117)	1:313:A:TYR:HE1	1:281:A:TRP:HZ3	26	0.22
(1,2117)	1:313:A:TYR:HE2	1:281:A:TRP:HZ3	26	0.22
(1,2117)	1:313:A:TYR:HE1	1:281:A:TRP:HZ3	27	0.22
(1,2117)	1:313:A:TYR:HE2	1:281:A:TRP:HZ3	27	0.22
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG21	1:262:A:VAL:HG11	6	0.22
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG21	1:262:A:VAL:HG12	6	0.22
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG21	1:262:A:VAL:HG13	6	0.22
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG22	1:262:A:VAL:HG11	6	0.22
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG22	1:262:A:VAL:HG12	6	0.22
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG22	1:262:A:VAL:HG13	6	0.22
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG23	1:262:A:VAL:HG11	6	0.22
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG23	1:262:A:VAL:HG12	6	0.22
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG23	1:262:A:VAL:HG13	6	0.22
(1,1729)	1:295:A:ALA:HA	1:298:A:GLN:H	26	0.22
(1,1646)	1:286:A:SER:H	1:289:A:CYS:HA	1	0.22
(1,1609)	1:281:A:TRP:HE3	1:314:A:ASP:H	4	0.22
(1,1578)	1:279:A:ILE:HB	1:309:A:ALA:HA	7	0.22
(1,1524)	1:277:A:TRP:HH2	1:258:A:PHE:HA	19	0.22
(1,1524)	1:277:A:TRP:HH2	1:258:A:PHE:HA	20	0.22
(1,1491)	1:277:A:TRP:HE1	1:305:A:LEU:HG	21	0.22
(1,1491)	1:277:A:TRP:HE1	1:305:A:LEU:HG	29	0.22
(1,1380)	1:273:A:TYR:HA	1:223:A:LEU:HD21	28	0.22
(1,1380)	1:273:A:TYR:HA	1:223:A:LEU:HD22	28	0.22
(1,1380)	1:273:A:TYR:HA	1:223:A:LEU:HD23	28	0.22
(1,1333)	1:271:A:GLN:HG3	1:271:A:GLN:HA	17	0.22
(1,1207)	1:265:A:LEU:HD21	1:263:A:PRO:HD3	23	0.22
(1,1207)	1:265:A:LEU:HD22	1:263:A:PRO:HD3	23	0.22
(1,1207)	1:265:A:LEU:HD23	1:263:A:PRO:HD3	23	0.22
(1,1207)	1:265:A:LEU:HD21	1:263:A:PRO:HD3	29	0.22
(1,1207)	1:265:A:LEU:HD22	1:263:A:PRO:HD3	29	0.22
(1,1207)	1:265:A:LEU:HD23	1:263:A:PRO:HD3	29	0.22
(1,1185)	1:264:A:SER:H	1:261:A:LEU:HA	12	0.22
(1,1173)	1:262:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HG	27	0.22
(1,1173)	1:262:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HG	27	0.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1173)	1:262:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HG	27	0.22
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD21	11	0.22
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD22	11	0.22
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD23	11	0.22
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD21	11	0.22
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD22	11	0.22
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD23	11	0.22
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD21	11	0.22
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD22	11	0.22
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD23	11	0.22
(1,1164)	1:262:A:VAL:HB	1:265:A:LEU:H	10	0.22
(1,1164)	1:262:A:VAL:HB	1:265:A:LEU:H	14	0.22
(1,1164)	1:262:A:VAL:HB	1:265:A:LEU:H	15	0.22
(1,1164)	1:262:A:VAL:HB	1:265:A:LEU:H	21	0.22
(1,1164)	1:262:A:VAL:HB	1:265:A:LEU:H	23	0.22
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG11	1:260:A:ASP:H	5	0.22
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG12	1:260:A:ASP:H	5	0.22
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG13	1:260:A:ASP:H	5	0.22
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG11	1:260:A:ASP:H	26	0.22
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG12	1:260:A:ASP:H	26	0.22
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG13	1:260:A:ASP:H	26	0.22
(1,1141)	1:262:A:VAL:HG11	1:265:A:LEU:HG	12	0.22
(1,1141)	1:262:A:VAL:HG12	1:265:A:LEU:HG	12	0.22
(1,1141)	1:262:A:VAL:HG13	1:265:A:LEU:HG	12	0.22
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD11	1:262:A:VAL:HG11	9	0.22
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD11	1:262:A:VAL:HG12	9	0.22
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD11	1:262:A:VAL:HG13	9	0.22
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD12	1:262:A:VAL:HG11	9	0.22
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD12	1:262:A:VAL:HG12	9	0.22
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD12	1:262:A:VAL:HG13	9	0.22
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD13	1:262:A:VAL:HG11	9	0.22
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD13	1:262:A:VAL:HG12	9	0.22
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD13	1:262:A:VAL:HG13	9	0.22
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD11	1:262:A:VAL:HG11	10	0.22
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD11	1:262:A:VAL:HG12	10	0.22
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD11	1:262:A:VAL:HG13	10	0.22
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD12	1:262:A:VAL:HG11	10	0.22
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD12	1:262:A:VAL:HG12	10	0.22
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD12	1:262:A:VAL:HG13	10	0.22
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD13	1:262:A:VAL:HG11	10	0.22
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD13	1:262:A:VAL:HG12	10	0.22
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD13	1:262:A:VAL:HG13	10	0.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD11	1:262:A:VAL:HG11	15	0.22
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD11	1:262:A:VAL:HG12	15	0.22
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD11	1:262:A:VAL:HG13	15	0.22
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD12	1:262:A:VAL:HG11	15	0.22
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD12	1:262:A:VAL:HG12	15	0.22
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD12	1:262:A:VAL:HG13	15	0.22
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD13	1:262:A:VAL:HG11	15	0.22
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD13	1:262:A:VAL:HG12	15	0.22
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD13	1:262:A:VAL:HG13	15	0.22
(1,1101)	1:261:A:LEU:HD21	1:238:A:LEU:HB2	4	0.22
(1,1101)	1:261:A:LEU:HD22	1:238:A:LEU:HB2	4	0.22
(1,1101)	1:261:A:LEU:HD23	1:238:A:LEU:HB2	4	0.22
(1,1101)	1:261:A:LEU:HD21	1:238:A:LEU:HB2	19	0.22
(1,1101)	1:261:A:LEU:HD22	1:238:A:LEU:HB2	19	0.22
(1,1101)	1:261:A:LEU:HD23	1:238:A:LEU:HB2	19	0.22
(1,1082)	1:260:A:ASP:HA	1:262:A:VAL:H	20	0.22
(1,1079)	1:260:A:ASP:H	1:259:A:LEU:HG	4	0.22
(1,1079)	1:260:A:ASP:H	1:259:A:LEU:HG	20	0.22
(1,735)	1:235:A:MET:HB2	1:235:A:MET:H	12	0.22
(1,685)	1:231:A:MET:HE1	1:234:A:HIS:HB3	7	0.22
(1,685)	1:231:A:MET:HE2	1:234:A:HIS:HB3	7	0.22
(1,685)	1:231:A:MET:HE3	1:234:A:HIS:HB3	7	0.22
(1,673)	1:231:A:MET:H	1:221:A:GLU:H	13	0.22
(1,658)	1:230:A:LEU:HD21	1:230:A:LEU:H	29	0.22
(1,658)	1:230:A:LEU:HD22	1:230:A:LEU:H	29	0.22
(1,658)	1:230:A:LEU:HD23	1:230:A:LEU:H	29	0.22
(1,640)	1:230:A:LEU:HD11	1:228:A:TRP:HE3	5	0.22
(1,640)	1:230:A:LEU:HD12	1:228:A:TRP:HE3	5	0.22
(1,640)	1:230:A:LEU:HD13	1:228:A:TRP:HE3	5	0.22
(1,640)	1:230:A:LEU:HD11	1:228:A:TRP:HE3	26	0.22
(1,640)	1:230:A:LEU:HD12	1:228:A:TRP:HE3	26	0.22
(1,640)	1:230:A:LEU:HD13	1:228:A:TRP:HE3	26	0.22
(1,638)	1:230:A:LEU:HD11	1:222:A:ARG:H	13	0.22
(1,638)	1:230:A:LEU:HD12	1:222:A:ARG:H	13	0.22
(1,638)	1:230:A:LEU:HD13	1:222:A:ARG:H	13	0.22
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD21	18	0.22
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD22	18	0.22
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD23	18	0.22
(1,574)	1:228:A:TRP:HE3	1:221:A:GLU:HG3	2	0.22
(1,553)	1:227:A:THR:H	1:228:A:TRP:H	14	0.22
(1,501)	1:224:A:ASP:HB3	1:229:A:VAL:HB	7	0.22
(1,501)	1:224:A:ASP:HB3	1:229:A:VAL:HB	17	0.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,501)	1:224:A:ASP:HB3	1:229:A:VAL:HB	27	0.22
(1,499)	1:224:A:ASP:H	1:229:A:VAL:HB	7	0.22
(1,499)	1:224:A:ASP:H	1:229:A:VAL:HB	15	0.22
(1,499)	1:224:A:ASP:H	1:229:A:VAL:HB	18	0.22
(1,499)	1:224:A:ASP:H	1:229:A:VAL:HB	29	0.22
(1,361)	1:218:A:TYR:H	1:217:A:CYS:HB3	3	0.22
(1,313)	1:216:A:LEU:HD21	1:218:A:TYR:HB2	3	0.22
(1,313)	1:216:A:LEU:HD22	1:218:A:TYR:HB2	3	0.22
(1,313)	1:216:A:LEU:HD23	1:218:A:TYR:HB2	3	0.22
(1,67)	1:190:A:ARG:HA	1:237:A:PHE:HE1	30	0.22
(1,67)	1:190:A:ARG:HA	1:237:A:PHE:HE2	30	0.22
(1,63)	1:190:A:ARG:H	1:191:A:TYR:H	8	0.22
(1,53)	1:190:A:ARG:HG3	1:190:A:ARG:HA	22	0.22
(3,37)	1:280:A:SER:H	1:215:A:TYR:O	17	0.21
(3,25)	1:260:A:ASP:H	1:256:A:LEU:O	4	0.21
(3,21)	1:235:A:MET:H	1:232:A:ASP:O	18	0.21
(2,1)	1:255:A:GLU:OE1	2:500:A:ZN:ZN	6	0.21
(1,2791)	1:362:A:LEU:H	1:359:A:TRP:H	5	0.21
(1,2772)	1:360:A:ASP:H	1:359:A:TRP:HB2	29	0.21
(1,2713)	1:356:A:PHE:HB2	1:357:A:GLN:H	1	0.21
(1,2364)	1:333:A:VAL:HB	1:308:A:PHE:HA	14	0.21
(1,2364)	1:333:A:VAL:HB	1:308:A:PHE:HA	23	0.21
(1,2364)	1:333:A:VAL:HB	1:308:A:PHE:HA	27	0.21
(1,2117)	1:313:A:TYR:HE1	1:281:A:TRP:HZ3	10	0.21
(1,2117)	1:313:A:TYR:HE2	1:281:A:TRP:HZ3	10	0.21
(1,1981)	1:305:A:LEU:HD11	1:275:A:VAL:HB	22	0.21
(1,1981)	1:305:A:LEU:HD12	1:275:A:VAL:HB	22	0.21
(1,1981)	1:305:A:LEU:HD13	1:275:A:VAL:HB	22	0.21
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD21	8	0.21
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD22	8	0.21
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD23	8	0.21
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD21	8	0.21
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD22	8	0.21
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD23	8	0.21
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD21	8	0.21
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD22	8	0.21
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD23	8	0.21
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD21	21	0.21
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD22	21	0.21
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD23	21	0.21
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD21	21	0.21
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD22	21	0.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD23	21	0.21
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD21	21	0.21
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD22	21	0.21
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD23	21	0.21
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG21	1:262:A:VAL:HG11	12	0.21
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG21	1:262:A:VAL:HG12	12	0.21
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG21	1:262:A:VAL:HG13	12	0.21
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG22	1:262:A:VAL:HG11	12	0.21
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG22	1:262:A:VAL:HG12	12	0.21
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG22	1:262:A:VAL:HG13	12	0.21
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG23	1:262:A:VAL:HG11	12	0.21
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG23	1:262:A:VAL:HG12	12	0.21
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG23	1:262:A:VAL:HG13	12	0.21
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG21	1:262:A:VAL:HG11	21	0.21
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG21	1:262:A:VAL:HG12	21	0.21
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG21	1:262:A:VAL:HG13	21	0.21
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG22	1:262:A:VAL:HG11	21	0.21
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG22	1:262:A:VAL:HG12	21	0.21
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG22	1:262:A:VAL:HG13	21	0.21
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG23	1:262:A:VAL:HG11	21	0.21
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG23	1:262:A:VAL:HG12	21	0.21
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG23	1:262:A:VAL:HG13	21	0.21
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG11	1:273:A:TYR:HA	11	0.21
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG12	1:273:A:TYR:HA	11	0.21
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG13	1:273:A:TYR:HA	11	0.21
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG11	1:273:A:TYR:HA	26	0.21
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG12	1:273:A:TYR:HA	26	0.21
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG13	1:273:A:TYR:HA	26	0.21
(1,1797)	1:298:A:GLN:HE21	1:299:A:GLU:HB3	26	0.21
(1,1609)	1:281:A:TRP:HE3	1:314:A:ASP:H	27	0.21
(1,1524)	1:277:A:TRP:HH2	1:258:A:PHE:HA	7	0.21
(1,1524)	1:277:A:TRP:HH2	1:258:A:PHE:HA	22	0.21
(1,1491)	1:277:A:TRP:HE1	1:305:A:LEU:HG	20	0.21
(1,1491)	1:277:A:TRP:HE1	1:305:A:LEU:HG	27	0.21
(1,1317)	1:270:A:ALA:H	1:269:A:PRO:HA	1	0.21
(1,1317)	1:270:A:ALA:H	1:269:A:PRO:HA	4	0.21
(1,1317)	1:270:A:ALA:H	1:269:A:PRO:HA	6	0.21
(1,1317)	1:270:A:ALA:H	1:269:A:PRO:HA	8	0.21
(1,1317)	1:270:A:ALA:H	1:269:A:PRO:HA	10	0.21
(1,1317)	1:270:A:ALA:H	1:269:A:PRO:HA	11	0.21
(1,1317)	1:270:A:ALA:H	1:269:A:PRO:HA	15	0.21
(1,1317)	1:270:A:ALA:H	1:269:A:PRO:HA	16	0.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1317)	1:270:A:ALA:H	1:269:A:PRO:HA	17	0.21
(1,1317)	1:270:A:ALA:H	1:269:A:PRO:HA	19	0.21
(1,1317)	1:270:A:ALA:H	1:269:A:PRO:HA	20	0.21
(1,1317)	1:270:A:ALA:H	1:269:A:PRO:HA	22	0.21
(1,1317)	1:270:A:ALA:H	1:269:A:PRO:HA	23	0.21
(1,1317)	1:270:A:ALA:H	1:269:A:PRO:HA	25	0.21
(1,1317)	1:270:A:ALA:H	1:269:A:PRO:HA	28	0.21
(1,1317)	1:270:A:ALA:H	1:269:A:PRO:HA	29	0.21
(1,1317)	1:270:A:ALA:H	1:269:A:PRO:HA	30	0.21
(1,1228)	1:266:A:GLN:H	1:265:A:LEU:HA	27	0.21
(1,1207)	1:265:A:LEU:HD21	1:263:A:PRO:HD3	14	0.21
(1,1207)	1:265:A:LEU:HD22	1:263:A:PRO:HD3	14	0.21
(1,1207)	1:265:A:LEU:HD23	1:263:A:PRO:HD3	14	0.21
(1,1206)	1:265:A:LEU:HD21	1:262:A:VAL:HB	18	0.21
(1,1206)	1:265:A:LEU:HD22	1:262:A:VAL:HB	18	0.21
(1,1206)	1:265:A:LEU:HD23	1:262:A:VAL:HB	18	0.21
(1,1185)	1:264:A:SER:H	1:261:A:LEU:HA	4	0.21
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD21	19	0.21
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD22	19	0.21
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD23	19	0.21
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD21	19	0.21
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD22	19	0.21
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD23	19	0.21
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD21	19	0.21
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD22	19	0.21
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD23	19	0.21
(1,1164)	1:262:A:VAL:HB	1:265:A:LEU:H	13	0.21
(1,1148)	1:262:A:VAL:HG21	1:263:A:PRO:HG2	30	0.21
(1,1148)	1:262:A:VAL:HG22	1:263:A:PRO:HG2	30	0.21
(1,1148)	1:262:A:VAL:HG23	1:263:A:PRO:HG2	30	0.21
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD11	1:262:A:VAL:HG11	18	0.21
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD11	1:262:A:VAL:HG12	18	0.21
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD11	1:262:A:VAL:HG13	18	0.21
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD12	1:262:A:VAL:HG11	18	0.21
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD12	1:262:A:VAL:HG12	18	0.21
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD12	1:262:A:VAL:HG13	18	0.21
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD13	1:262:A:VAL:HG11	18	0.21
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD13	1:262:A:VAL:HG12	18	0.21
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD13	1:262:A:VAL:HG13	18	0.21
(1,1107)	1:261:A:LEU:HD21	1:264:A:SER:HB2	6	0.21
(1,1107)	1:261:A:LEU:HD22	1:264:A:SER:HB2	6	0.21
(1,1107)	1:261:A:LEU:HD23	1:264:A:SER:HB2	6	0.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1101)	1:261:A:LEU:HD21	1:238:A:LEU:HB2	20	0.21
(1,1101)	1:261:A:LEU:HD22	1:238:A:LEU:HB2	20	0.21
(1,1101)	1:261:A:LEU:HD23	1:238:A:LEU:HB2	20	0.21
(1,1101)	1:261:A:LEU:HD21	1:238:A:LEU:HB2	22	0.21
(1,1101)	1:261:A:LEU:HD22	1:238:A:LEU:HB2	22	0.21
(1,1101)	1:261:A:LEU:HD23	1:238:A:LEU:HB2	22	0.21
(1,1079)	1:260:A:ASP:H	1:259:A:LEU:HG	11	0.21
(1,1079)	1:260:A:ASP:H	1:259:A:LEU:HG	22	0.21
(1,719)	1:234:A:HIS:H	1:265:A:LEU:HD11	8	0.21
(1,719)	1:234:A:HIS:H	1:265:A:LEU:HD12	8	0.21
(1,719)	1:234:A:HIS:H	1:265:A:LEU:HD13	8	0.21
(1,640)	1:230:A:LEU:HD11	1:228:A:TRP:HE3	1	0.21
(1,640)	1:230:A:LEU:HD12	1:228:A:TRP:HE3	1	0.21
(1,640)	1:230:A:LEU:HD13	1:228:A:TRP:HE3	1	0.21
(1,640)	1:230:A:LEU:HD11	1:228:A:TRP:HE3	2	0.21
(1,640)	1:230:A:LEU:HD12	1:228:A:TRP:HE3	2	0.21
(1,640)	1:230:A:LEU:HD13	1:228:A:TRP:HE3	2	0.21
(1,640)	1:230:A:LEU:HD11	1:228:A:TRP:HE3	8	0.21
(1,640)	1:230:A:LEU:HD12	1:228:A:TRP:HE3	8	0.21
(1,640)	1:230:A:LEU:HD13	1:228:A:TRP:HE3	8	0.21
(1,640)	1:230:A:LEU:HD11	1:228:A:TRP:HE3	11	0.21
(1,640)	1:230:A:LEU:HD12	1:228:A:TRP:HE3	11	0.21
(1,640)	1:230:A:LEU:HD13	1:228:A:TRP:HE3	11	0.21
(1,640)	1:230:A:LEU:HD11	1:228:A:TRP:HE3	17	0.21
(1,640)	1:230:A:LEU:HD12	1:228:A:TRP:HE3	17	0.21
(1,640)	1:230:A:LEU:HD13	1:228:A:TRP:HE3	17	0.21
(1,640)	1:230:A:LEU:HD11	1:228:A:TRP:HE3	19	0.21
(1,640)	1:230:A:LEU:HD12	1:228:A:TRP:HE3	19	0.21
(1,640)	1:230:A:LEU:HD13	1:228:A:TRP:HE3	19	0.21
(1,640)	1:230:A:LEU:HD11	1:228:A:TRP:HE3	21	0.21
(1,640)	1:230:A:LEU:HD12	1:228:A:TRP:HE3	21	0.21
(1,640)	1:230:A:LEU:HD13	1:228:A:TRP:HE3	21	0.21
(1,640)	1:230:A:LEU:HD11	1:228:A:TRP:HE3	27	0.21
(1,640)	1:230:A:LEU:HD12	1:228:A:TRP:HE3	27	0.21
(1,640)	1:230:A:LEU:HD13	1:228:A:TRP:HE3	27	0.21
(1,574)	1:228:A:TRP:HE3	1:221:A:GLU:HG3	7	0.21
(1,574)	1:228:A:TRP:HE3	1:221:A:GLU:HG3	24	0.21
(1,528)	1:225:A:ASN:HD22	1:225:A:ASN:HB3	1	0.21
(1,528)	1:225:A:ASN:HD22	1:225:A:ASN:HB3	3	0.21
(1,528)	1:225:A:ASN:HD22	1:225:A:ASN:HB3	26	0.21
(1,501)	1:224:A:ASP:HB3	1:229:A:VAL:HB	9	0.21
(1,501)	1:224:A:ASP:HB3	1:229:A:VAL:HB	10	0.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,501)	1:224:A:ASP:HB3	1:229:A:VAL:HB	15	0.21
(1,335)	1:217:A:CYS:H	1:216:A:LEU:HB3	26	0.21
(1,283)	1:216:A:LEU:HD11	1:258:A:PHE:HA	21	0.21
(1,283)	1:216:A:LEU:HD12	1:258:A:PHE:HA	21	0.21
(1,283)	1:216:A:LEU:HD13	1:258:A:PHE:HA	21	0.21
(1,145)	1:194:A:ASP:HB3	1:193:A:MET:HA	2	0.21
(1,58)	1:190:A:ARG:HD3	1:190:A:ARG:HA	15	0.21
(3,111)	1:265:A:LEU:N	1:262:A:VAL:O	12	0.2
(3,59)	1:332:A:GLN:H	1:305:A:LEU:O	14	0.2
(3,37)	1:280:A:SER:H	1:215:A:TYR:O	8	0.2
(3,37)	1:280:A:SER:H	1:215:A:TYR:O	15	0.2
(3,25)	1:260:A:ASP:H	1:256:A:LEU:O	26	0.2
(3,24)	1:259:A:LEU:H	1:255:A:GLU:O	22	0.2
(2,2)	1:255:A:GLU:OE2	2:500:A:ZN:ZN	8	0.2
(2,1)	1:255:A:GLU:OE1	2:500:A:ZN:ZN	23	0.2
(1,2713)	1:356:A:PHE:HB2	1:357:A:GLN:H	12	0.2
(1,2713)	1:356:A:PHE:HB2	1:357:A:GLN:H	21	0.2
(1,2364)	1:333:A:VAL:HB	1:308:A:PHE:HA	1	0.2
(1,2341)	1:333:A:VAL:HG21	1:308:A:PHE:H	18	0.2
(1,2341)	1:333:A:VAL:HG22	1:308:A:PHE:H	18	0.2
(1,2341)	1:333:A:VAL:HG23	1:308:A:PHE:H	18	0.2
(1,2117)	1:313:A:TYR:HE1	1:281:A:TRP:HZ3	14	0.2
(1,2117)	1:313:A:TYR:HE2	1:281:A:TRP:HZ3	14	0.2
(1,2117)	1:313:A:TYR:HE1	1:281:A:TRP:HZ3	23	0.2
(1,2117)	1:313:A:TYR:HE2	1:281:A:TRP:HZ3	23	0.2
(1,1970)	1:305:A:LEU:HD21	1:258:A:PHE:HZ	11	0.2
(1,1970)	1:305:A:LEU:HD22	1:258:A:PHE:HZ	11	0.2
(1,1970)	1:305:A:LEU:HD23	1:258:A:PHE:HZ	11	0.2
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD21	9	0.2
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD22	9	0.2
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD23	9	0.2
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD21	9	0.2
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD22	9	0.2
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD23	9	0.2
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD21	9	0.2
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD22	9	0.2
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD23	9	0.2
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD21	15	0.2
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD22	15	0.2
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD23	15	0.2
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD21	15	0.2
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD22	15	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD23	15	0.2
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD21	15	0.2
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD22	15	0.2
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD23	15	0.2
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD21	26	0.2
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD22	26	0.2
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD23	26	0.2
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD21	26	0.2
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD22	26	0.2
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD23	26	0.2
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD21	26	0.2
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD22	26	0.2
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD23	26	0.2
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG21	1:262:A:VAL:HG11	24	0.2
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG21	1:262:A:VAL:HG12	24	0.2
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG21	1:262:A:VAL:HG13	24	0.2
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG22	1:262:A:VAL:HG11	24	0.2
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG22	1:262:A:VAL:HG12	24	0.2
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG22	1:262:A:VAL:HG13	24	0.2
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG23	1:262:A:VAL:HG11	24	0.2
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG23	1:262:A:VAL:HG12	24	0.2
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG23	1:262:A:VAL:HG13	24	0.2
(1,1876)	1:302:A:HIS:HD2	1:303:A:VAL:HB	6	0.2
(1,1768)	1:296:A:PHE:HE1	1:259:A:LEU:HD21	8	0.2
(1,1768)	1:296:A:PHE:HE1	1:259:A:LEU:HD22	8	0.2
(1,1768)	1:296:A:PHE:HE1	1:259:A:LEU:HD23	8	0.2
(1,1768)	1:296:A:PHE:HE2	1:259:A:LEU:HD21	8	0.2
(1,1768)	1:296:A:PHE:HE2	1:259:A:LEU:HD22	8	0.2
(1,1768)	1:296:A:PHE:HE2	1:259:A:LEU:HD23	8	0.2
(1,1646)	1:286:A:SER:H	1:289:A:CYS:HA	10	0.2
(1,1646)	1:286:A:SER:H	1:289:A:CYS:HA	19	0.2
(1,1646)	1:286:A:SER:H	1:289:A:CYS:HA	30	0.2
(1,1641)	1:285:A:PHE:HE1	1:286:A:SER:HA	14	0.2
(1,1641)	1:285:A:PHE:HE2	1:286:A:SER:HA	14	0.2
(1,1609)	1:281:A:TRP:HE3	1:314:A:ASP:H	14	0.2
(1,1578)	1:279:A:ILE:HB	1:309:A:ALA:HA	6	0.2
(1,1560)	1:279:A:ILE:HG12	1:309:A:ALA:HA	27	0.2
(1,1523)	1:277:A:TRP:HZ2	1:238:A:LEU:HD21	4	0.2
(1,1523)	1:277:A:TRP:HZ2	1:238:A:LEU:HD22	4	0.2
(1,1523)	1:277:A:TRP:HZ2	1:238:A:LEU:HD23	4	0.2
(1,1491)	1:277:A:TRP:HE1	1:305:A:LEU:HG	30	0.2
(1,1317)	1:270:A:ALA:H	1:269:A:PRO:HA	9	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1228)	1:266:A:GLN:H	1:265:A:LEU:HA	12	0.2
(1,1228)	1:266:A:GLN:H	1:265:A:LEU:HA	16	0.2
(1,1228)	1:266:A:GLN:H	1:265:A:LEU:HA	24	0.2
(1,1228)	1:266:A:GLN:H	1:265:A:LEU:HA	30	0.2
(1,1207)	1:265:A:LEU:HD21	1:263:A:PRO:HD3	15	0.2
(1,1207)	1:265:A:LEU:HD22	1:263:A:PRO:HD3	15	0.2
(1,1207)	1:265:A:LEU:HD23	1:263:A:PRO:HD3	15	0.2
(1,1206)	1:265:A:LEU:HD21	1:262:A:VAL:HB	3	0.2
(1,1206)	1:265:A:LEU:HD22	1:262:A:VAL:HB	3	0.2
(1,1206)	1:265:A:LEU:HD23	1:262:A:VAL:HB	3	0.2
(1,1206)	1:265:A:LEU:HD21	1:262:A:VAL:HB	4	0.2
(1,1206)	1:265:A:LEU:HD22	1:262:A:VAL:HB	4	0.2
(1,1206)	1:265:A:LEU:HD23	1:262:A:VAL:HB	4	0.2
(1,1206)	1:265:A:LEU:HD21	1:262:A:VAL:HB	8	0.2
(1,1206)	1:265:A:LEU:HD22	1:262:A:VAL:HB	8	0.2
(1,1206)	1:265:A:LEU:HD23	1:262:A:VAL:HB	8	0.2
(1,1185)	1:264:A:SER:H	1:261:A:LEU:HA	22	0.2
(1,1173)	1:262:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HG	30	0.2
(1,1173)	1:262:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HG	30	0.2
(1,1173)	1:262:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HG	30	0.2
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD21	26	0.2
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD22	26	0.2
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD23	26	0.2
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD21	26	0.2
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD22	26	0.2
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD23	26	0.2
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD21	26	0.2
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD22	26	0.2
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD23	26	0.2
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG11	1:260:A:ASP:H	2	0.2
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG12	1:260:A:ASP:H	2	0.2
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG13	1:260:A:ASP:H	2	0.2
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG11	1:265:A:LEU:HD21	18	0.2
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG11	1:265:A:LEU:HD22	18	0.2
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG11	1:265:A:LEU:HD23	18	0.2
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG12	1:265:A:LEU:HD21	18	0.2
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG12	1:265:A:LEU:HD22	18	0.2
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG12	1:265:A:LEU:HD23	18	0.2
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG13	1:265:A:LEU:HD21	18	0.2
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG13	1:265:A:LEU:HD22	18	0.2
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG13	1:265:A:LEU:HD23	18	0.2
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD11	1:262:A:VAL:HG11	21	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD11	1:262:A:VAL:HG12	21	0.2
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD11	1:262:A:VAL:HG13	21	0.2
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD12	1:262:A:VAL:HG11	21	0.2
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD12	1:262:A:VAL:HG12	21	0.2
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD12	1:262:A:VAL:HG13	21	0.2
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD13	1:262:A:VAL:HG11	21	0.2
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD13	1:262:A:VAL:HG12	21	0.2
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD13	1:262:A:VAL:HG13	21	0.2
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD11	1:262:A:VAL:HG11	23	0.2
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD11	1:262:A:VAL:HG12	23	0.2
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD11	1:262:A:VAL:HG13	23	0.2
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD12	1:262:A:VAL:HG11	23	0.2
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD12	1:262:A:VAL:HG12	23	0.2
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD12	1:262:A:VAL:HG13	23	0.2
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD13	1:262:A:VAL:HG11	23	0.2
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD13	1:262:A:VAL:HG12	23	0.2
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD13	1:262:A:VAL:HG13	23	0.2
(1,1101)	1:261:A:LEU:HD21	1:238:A:LEU:HB2	23	0.2
(1,1101)	1:261:A:LEU:HD22	1:238:A:LEU:HB2	23	0.2
(1,1101)	1:261:A:LEU:HD23	1:238:A:LEU:HB2	23	0.2
(1,735)	1:235:A:MET:HB2	1:235:A:MET:H	3	0.2
(1,735)	1:235:A:MET:HB2	1:235:A:MET:H	6	0.2
(1,719)	1:234:A:HIS:H	1:265:A:LEU:HD11	1	0.2
(1,719)	1:234:A:HIS:H	1:265:A:LEU:HD12	1	0.2
(1,719)	1:234:A:HIS:H	1:265:A:LEU:HD13	1	0.2
(1,653)	1:230:A:LEU:HD21	1:229:A:VAL:HA	13	0.2
(1,653)	1:230:A:LEU:HD22	1:229:A:VAL:HA	13	0.2
(1,653)	1:230:A:LEU:HD23	1:229:A:VAL:HA	13	0.2
(1,640)	1:230:A:LEU:HD11	1:228:A:TRP:HE3	3	0.2
(1,640)	1:230:A:LEU:HD12	1:228:A:TRP:HE3	3	0.2
(1,640)	1:230:A:LEU:HD13	1:228:A:TRP:HE3	3	0.2
(1,640)	1:230:A:LEU:HD11	1:228:A:TRP:HE3	12	0.2
(1,640)	1:230:A:LEU:HD12	1:228:A:TRP:HE3	12	0.2
(1,640)	1:230:A:LEU:HD13	1:228:A:TRP:HE3	12	0.2
(1,640)	1:230:A:LEU:HD11	1:228:A:TRP:HE3	18	0.2
(1,640)	1:230:A:LEU:HD12	1:228:A:TRP:HE3	18	0.2
(1,640)	1:230:A:LEU:HD13	1:228:A:TRP:HE3	18	0.2
(1,640)	1:230:A:LEU:HD11	1:228:A:TRP:HE3	20	0.2
(1,640)	1:230:A:LEU:HD12	1:228:A:TRP:HE3	20	0.2
(1,640)	1:230:A:LEU:HD13	1:228:A:TRP:HE3	20	0.2
(1,640)	1:230:A:LEU:HD11	1:228:A:TRP:HE3	22	0.2
(1,640)	1:230:A:LEU:HD12	1:228:A:TRP:HE3	22	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,640)	1:230:A:LEU:HD13	1:228:A:TRP:HE3	22	0.2
(1,621)	1:229:A:VAL:H	1:228:A:TRP:HB2	28	0.2
(1,595)	1:228:A:TRP:HH2	1:222:A:ARG:HA	13	0.2
(1,595)	1:228:A:TRP:HH2	1:222:A:ARG:HA	25	0.2
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD21	15	0.2
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD22	15	0.2
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD23	15	0.2
(1,574)	1:228:A:TRP:HE3	1:221:A:GLU:HG3	12	0.2
(1,574)	1:228:A:TRP:HE3	1:221:A:GLU:HG3	14	0.2
(1,557)	1:227:A:THR:HB	1:228:A:TRP:H	12	0.2
(1,557)	1:227:A:THR:HB	1:228:A:TRP:H	18	0.2
(1,553)	1:227:A:THR:H	1:228:A:TRP:H	3	0.2
(1,553)	1:227:A:THR:H	1:228:A:TRP:H	7	0.2
(1,553)	1:227:A:THR:H	1:228:A:TRP:H	15	0.2
(1,553)	1:227:A:THR:H	1:228:A:TRP:H	24	0.2
(1,528)	1:225:A:ASN:HD22	1:225:A:ASN:HB3	23	0.2
(1,528)	1:225:A:ASN:HD22	1:225:A:ASN:HB3	25	0.2
(1,501)	1:224:A:ASP:HB3	1:229:A:VAL:HB	4	0.2
(1,501)	1:224:A:ASP:HB3	1:229:A:VAL:HB	8	0.2
(1,501)	1:224:A:ASP:HB3	1:229:A:VAL:HB	19	0.2
(1,501)	1:224:A:ASP:HB3	1:229:A:VAL:HB	21	0.2
(1,501)	1:224:A:ASP:HB3	1:229:A:VAL:HB	22	0.2
(1,501)	1:224:A:ASP:HB3	1:229:A:VAL:HB	24	0.2
(1,473)	1:223:A:LEU:H	1:222:A:ARG:HB2	12	0.2
(1,337)	1:217:A:CYS:HB2	1:237:A:PHE:HA	29	0.2
(1,306)	1:216:A:LEU:HD11	1:254:A:ALA:H	5	0.2
(1,306)	1:216:A:LEU:HD12	1:254:A:ALA:H	5	0.2
(1,306)	1:216:A:LEU:HD13	1:254:A:ALA:H	5	0.2
(1,306)	1:216:A:LEU:HD11	1:254:A:ALA:H	18	0.2
(1,306)	1:216:A:LEU:HD12	1:254:A:ALA:H	18	0.2
(1,306)	1:216:A:LEU:HD13	1:254:A:ALA:H	18	0.2
(1,306)	1:216:A:LEU:HD11	1:254:A:ALA:H	30	0.2
(1,306)	1:216:A:LEU:HD12	1:254:A:ALA:H	30	0.2
(1,306)	1:216:A:LEU:HD13	1:254:A:ALA:H	30	0.2
(1,278)	1:216:A:LEU:HD11	1:258:A:PHE:HB3	25	0.2
(1,278)	1:216:A:LEU:HD12	1:258:A:PHE:HB3	25	0.2
(1,278)	1:216:A:LEU:HD13	1:258:A:PHE:HB3	25	0.2
(1,145)	1:194:A:ASP:HB3	1:193:A:MET:HA	12	0.2
(1,79)	1:191:A:TYR:H	1:190:A:ARG:HB2	15	0.2
(1,79)	1:191:A:TYR:H	1:190:A:ARG:HB2	21	0.2
(1,68)	1:191:A:TYR:H	1:192:A:LEU:H	19	0.2
(1,63)	1:190:A:ARG:H	1:191:A:TYR:H	4	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,63)	1:190:A:ARG:H	1:191:A:TYR:H	22	0.2
(3,111)	1:265:A:LEU:N	1:262:A:VAL:O	16	0.19
(3,59)	1:332:A:GLN:H	1:305:A:LEU:O	26	0.19
(3,37)	1:280:A:SER:H	1:215:A:TYR:O	1	0.19
(3,37)	1:280:A:SER:H	1:215:A:TYR:O	4	0.19
(3,37)	1:280:A:SER:H	1:215:A:TYR:O	9	0.19
(3,37)	1:280:A:SER:H	1:215:A:TYR:O	13	0.19
(3,37)	1:280:A:SER:H	1:215:A:TYR:O	19	0.19
(3,22)	1:257:A:ARG:H	1:253:A:HIS:O	6	0.19
(3,10)	1:219:A:GLU:H	1:276:A:THR:O	24	0.19
(1,3070)	1:255:A:GLU:H	1:255:A:GLU:OE1	6	0.19
(1,3061)	1:380:A:GLN:HE22	1:380:A:GLN:HG3	1	0.19
(1,3061)	1:380:A:GLN:HE22	1:380:A:GLN:HG3	3	0.19
(1,3061)	1:380:A:GLN:HE22	1:380:A:GLN:HG3	4	0.19
(1,3061)	1:380:A:GLN:HE22	1:380:A:GLN:HG3	8	0.19
(1,3061)	1:380:A:GLN:HE22	1:380:A:GLN:HG3	10	0.19
(1,3061)	1:380:A:GLN:HE22	1:380:A:GLN:HG3	13	0.19
(1,3061)	1:380:A:GLN:HE22	1:380:A:GLN:HG3	17	0.19
(1,3061)	1:380:A:GLN:HE22	1:380:A:GLN:HG3	18	0.19
(1,3061)	1:380:A:GLN:HE22	1:380:A:GLN:HG3	22	0.19
(1,3061)	1:380:A:GLN:HE22	1:380:A:GLN:HG3	26	0.19
(1,3061)	1:380:A:GLN:HE22	1:380:A:GLN:HG3	27	0.19
(1,3061)	1:380:A:GLN:HE22	1:380:A:GLN:HG3	29	0.19
(1,2759)	1:359:A:TRP:HD1	1:362:A:LEU:HA	26	0.19
(1,2364)	1:333:A:VAL:HB	1:308:A:PHE:HA	3	0.19
(1,2332)	1:333:A:VAL:HG11	1:308:A:PHE:H	25	0.19
(1,2332)	1:333:A:VAL:HG12	1:308:A:PHE:H	25	0.19
(1,2332)	1:333:A:VAL:HG13	1:308:A:PHE:H	25	0.19
(1,2332)	1:333:A:VAL:HG11	1:308:A:PHE:H	26	0.19
(1,2332)	1:333:A:VAL:HG12	1:308:A:PHE:H	26	0.19
(1,2332)	1:333:A:VAL:HG13	1:308:A:PHE:H	26	0.19
(1,2270)	1:328:A:ASP:H	1:327:A:ARG:HD3	4	0.19
(1,1937)	1:304:A:ARG:H	1:303:A:VAL:HB	14	0.19
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD21	1	0.19
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD22	1	0.19
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD23	1	0.19
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD21	1	0.19
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD22	1	0.19
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD23	1	0.19
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD21	1	0.19
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD22	1	0.19
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD23	1	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD21	10	0.19
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD22	10	0.19
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD23	10	0.19
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD21	10	0.19
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD22	10	0.19
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD23	10	0.19
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD21	10	0.19
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD22	10	0.19
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD23	10	0.19
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG21	1:262:A:VAL:HG11	18	0.19
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG21	1:262:A:VAL:HG12	18	0.19
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG21	1:262:A:VAL:HG13	18	0.19
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG22	1:262:A:VAL:HG11	18	0.19
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG22	1:262:A:VAL:HG12	18	0.19
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG22	1:262:A:VAL:HG13	18	0.19
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG23	1:262:A:VAL:HG11	18	0.19
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG23	1:262:A:VAL:HG12	18	0.19
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG23	1:262:A:VAL:HG13	18	0.19
(1,1895)	1:303:A:VAL:HB	1:296:A:PHE:HE1	26	0.19
(1,1895)	1:303:A:VAL:HB	1:296:A:PHE:HE2	26	0.19
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE1	1:275:A:VAL:HG21	9	0.19
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE1	1:275:A:VAL:HG22	9	0.19
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE1	1:275:A:VAL:HG23	9	0.19
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE2	1:275:A:VAL:HG21	9	0.19
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE2	1:275:A:VAL:HG22	9	0.19
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE2	1:275:A:VAL:HG23	9	0.19
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE1	1:275:A:VAL:HG21	23	0.19
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE1	1:275:A:VAL:HG22	23	0.19
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE1	1:275:A:VAL:HG23	23	0.19
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE2	1:275:A:VAL:HG21	23	0.19
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE2	1:275:A:VAL:HG22	23	0.19
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE2	1:275:A:VAL:HG23	23	0.19
(1,1646)	1:286:A:SER:H	1:289:A:CYS:HA	20	0.19
(1,1646)	1:286:A:SER:H	1:289:A:CYS:HA	26	0.19
(1,1641)	1:285:A:PHE:HE1	1:286:A:SER:HA	12	0.19
(1,1641)	1:285:A:PHE:HE2	1:286:A:SER:HA	12	0.19
(1,1609)	1:281:A:TRP:HE3	1:314:A:ASP:H	29	0.19
(1,1599)	1:281:A:TRP:HZ3	1:312:A:ILE:HG12	22	0.19
(1,1578)	1:279:A:ILE:HB	1:309:A:ALA:HA	21	0.19
(1,1578)	1:279:A:ILE:HB	1:309:A:ALA:HA	28	0.19
(1,1560)	1:279:A:ILE:HG12	1:309:A:ALA:HA	15	0.19
(1,1560)	1:279:A:ILE:HG12	1:309:A:ALA:HA	30	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1525)	1:277:A:TRP:HH2	1:293:A:VAL:HB	5	0.19
(1,1524)	1:277:A:TRP:HH2	1:258:A:PHE:HA	2	0.19
(1,1524)	1:277:A:TRP:HH2	1:258:A:PHE:HA	3	0.19
(1,1491)	1:277:A:TRP:HE1	1:305:A:LEU:HG	18	0.19
(1,1491)	1:277:A:TRP:HE1	1:305:A:LEU:HG	23	0.19
(1,1260)	1:267:A:LEU:H	1:266:A:GLN:HB3	4	0.19
(1,1260)	1:267:A:LEU:H	1:266:A:GLN:HB3	5	0.19
(1,1260)	1:267:A:LEU:H	1:266:A:GLN:HB3	12	0.19
(1,1260)	1:267:A:LEU:H	1:266:A:GLN:HB3	25	0.19
(1,1228)	1:266:A:GLN:H	1:265:A:LEU:HA	6	0.19
(1,1206)	1:265:A:LEU:HD21	1:262:A:VAL:HB	2	0.19
(1,1206)	1:265:A:LEU:HD22	1:262:A:VAL:HB	2	0.19
(1,1206)	1:265:A:LEU:HD23	1:262:A:VAL:HB	2	0.19
(1,1206)	1:265:A:LEU:HD21	1:262:A:VAL:HB	5	0.19
(1,1206)	1:265:A:LEU:HD22	1:262:A:VAL:HB	5	0.19
(1,1206)	1:265:A:LEU:HD23	1:262:A:VAL:HB	5	0.19
(1,1206)	1:265:A:LEU:HD21	1:262:A:VAL:HB	13	0.19
(1,1206)	1:265:A:LEU:HD22	1:262:A:VAL:HB	13	0.19
(1,1206)	1:265:A:LEU:HD23	1:262:A:VAL:HB	13	0.19
(1,1206)	1:265:A:LEU:HD21	1:262:A:VAL:HB	17	0.19
(1,1206)	1:265:A:LEU:HD22	1:262:A:VAL:HB	17	0.19
(1,1206)	1:265:A:LEU:HD23	1:262:A:VAL:HB	17	0.19
(1,1206)	1:265:A:LEU:HD21	1:262:A:VAL:HB	22	0.19
(1,1206)	1:265:A:LEU:HD22	1:262:A:VAL:HB	22	0.19
(1,1206)	1:265:A:LEU:HD23	1:262:A:VAL:HB	22	0.19
(1,1206)	1:265:A:LEU:HD21	1:262:A:VAL:HB	26	0.19
(1,1206)	1:265:A:LEU:HD22	1:262:A:VAL:HB	26	0.19
(1,1206)	1:265:A:LEU:HD23	1:262:A:VAL:HB	26	0.19
(1,1185)	1:264:A:SER:H	1:261:A:LEU:HA	11	0.19
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD21	1	0.19
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD22	1	0.19
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD23	1	0.19
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD21	1	0.19
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD22	1	0.19
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD23	1	0.19
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD21	1	0.19
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD22	1	0.19
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD23	1	0.19
(1,1155)	1:262:A:VAL:HA	1:265:A:LEU:HB3	29	0.19
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG11	1:260:A:ASP:H	3	0.19
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG12	1:260:A:ASP:H	3	0.19
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG13	1:260:A:ASP:H	3	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG11	1:260:A:ASP:H	8	0.19
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG12	1:260:A:ASP:H	8	0.19
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG13	1:260:A:ASP:H	8	0.19
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG11	1:260:A:ASP:H	18	0.19
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG12	1:260:A:ASP:H	18	0.19
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG13	1:260:A:ASP:H	18	0.19
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG11	1:260:A:ASP:H	23	0.19
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG12	1:260:A:ASP:H	23	0.19
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG13	1:260:A:ASP:H	23	0.19
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG11	1:260:A:ASP:H	29	0.19
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG12	1:260:A:ASP:H	29	0.19
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG13	1:260:A:ASP:H	29	0.19
(1,1148)	1:262:A:VAL:HG21	1:263:A:PRO:HG2	25	0.19
(1,1148)	1:262:A:VAL:HG22	1:263:A:PRO:HG2	25	0.19
(1,1148)	1:262:A:VAL:HG23	1:263:A:PRO:HG2	25	0.19
(1,1141)	1:262:A:VAL:HG11	1:265:A:LEU:HG	16	0.19
(1,1141)	1:262:A:VAL:HG12	1:265:A:LEU:HG	16	0.19
(1,1141)	1:262:A:VAL:HG13	1:265:A:LEU:HG	16	0.19
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD11	1:262:A:VAL:HG11	14	0.19
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD11	1:262:A:VAL:HG12	14	0.19
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD11	1:262:A:VAL:HG13	14	0.19
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD12	1:262:A:VAL:HG11	14	0.19
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD12	1:262:A:VAL:HG12	14	0.19
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD12	1:262:A:VAL:HG13	14	0.19
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD13	1:262:A:VAL:HG11	14	0.19
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD13	1:262:A:VAL:HG12	14	0.19
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD13	1:262:A:VAL:HG13	14	0.19
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD11	1:262:A:VAL:HG11	28	0.19
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD11	1:262:A:VAL:HG12	28	0.19
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD11	1:262:A:VAL:HG13	28	0.19
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD12	1:262:A:VAL:HG11	28	0.19
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD12	1:262:A:VAL:HG12	28	0.19
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD12	1:262:A:VAL:HG13	28	0.19
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD13	1:262:A:VAL:HG11	28	0.19
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD13	1:262:A:VAL:HG12	28	0.19
(1,1110)	1:261:A:LEU:HD13	1:262:A:VAL:HG13	28	0.19
(1,1101)	1:261:A:LEU:HD21	1:238:A:LEU:HB2	14	0.19
(1,1101)	1:261:A:LEU:HD22	1:238:A:LEU:HB2	14	0.19
(1,1101)	1:261:A:LEU:HD23	1:238:A:LEU:HB2	14	0.19
(1,1079)	1:260:A:ASP:H	1:259:A:LEU:HG	5	0.19
(1,977)	1:257:A:ARG:HA	1:261:A:LEU:HD11	25	0.19
(1,977)	1:257:A:ARG:HA	1:261:A:LEU:HD12	25	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,977)	1:257:A:ARG:HA	1:261:A:LEU:HD13	25	0.19
(1,719)	1:234:A:HIS:H	1:265:A:LEU:HD11	2	0.19
(1,719)	1:234:A:HIS:H	1:265:A:LEU:HD12	2	0.19
(1,719)	1:234:A:HIS:H	1:265:A:LEU:HD13	2	0.19
(1,719)	1:234:A:HIS:H	1:265:A:LEU:HD11	19	0.19
(1,719)	1:234:A:HIS:H	1:265:A:LEU:HD12	19	0.19
(1,719)	1:234:A:HIS:H	1:265:A:LEU:HD13	19	0.19
(1,666)	1:230:A:LEU:HD11	1:228:A:TRP:HB2	13	0.19
(1,666)	1:230:A:LEU:HD12	1:228:A:TRP:HB2	13	0.19
(1,666)	1:230:A:LEU:HD13	1:228:A:TRP:HB2	13	0.19
(1,666)	1:230:A:LEU:HD21	1:228:A:TRP:HB2	13	0.19
(1,666)	1:230:A:LEU:HD22	1:228:A:TRP:HB2	13	0.19
(1,666)	1:230:A:LEU:HD23	1:228:A:TRP:HB2	13	0.19
(1,660)	1:230:A:LEU:HD21	1:219:A:GLU:HB3	7	0.19
(1,660)	1:230:A:LEU:HD22	1:219:A:GLU:HB3	7	0.19
(1,660)	1:230:A:LEU:HD23	1:219:A:GLU:HB3	7	0.19
(1,650)	1:230:A:LEU:HD21	1:221:A:GLU:HG3	28	0.19
(1,650)	1:230:A:LEU:HD22	1:221:A:GLU:HG3	28	0.19
(1,650)	1:230:A:LEU:HD23	1:221:A:GLU:HG3	28	0.19
(1,640)	1:230:A:LEU:HD11	1:228:A:TRP:HE3	10	0.19
(1,640)	1:230:A:LEU:HD12	1:228:A:TRP:HE3	10	0.19
(1,640)	1:230:A:LEU:HD13	1:228:A:TRP:HE3	10	0.19
(1,640)	1:230:A:LEU:HD11	1:228:A:TRP:HE3	14	0.19
(1,640)	1:230:A:LEU:HD12	1:228:A:TRP:HE3	14	0.19
(1,640)	1:230:A:LEU:HD13	1:228:A:TRP:HE3	14	0.19
(1,640)	1:230:A:LEU:HD11	1:228:A:TRP:HE3	16	0.19
(1,640)	1:230:A:LEU:HD12	1:228:A:TRP:HE3	16	0.19
(1,640)	1:230:A:LEU:HD13	1:228:A:TRP:HE3	16	0.19
(1,640)	1:230:A:LEU:HD11	1:228:A:TRP:HE3	30	0.19
(1,640)	1:230:A:LEU:HD12	1:228:A:TRP:HE3	30	0.19
(1,640)	1:230:A:LEU:HD13	1:228:A:TRP:HE3	30	0.19
(1,621)	1:229:A:VAL:H	1:228:A:TRP:HB2	7	0.19
(1,621)	1:229:A:VAL:H	1:228:A:TRP:HB2	25	0.19
(1,600)	1:229:A:VAL:HB	1:222:A:ARG:H	23	0.19
(1,574)	1:228:A:TRP:HE3	1:221:A:GLU:HG3	5	0.19
(1,574)	1:228:A:TRP:HE3	1:221:A:GLU:HG3	10	0.19
(1,574)	1:228:A:TRP:HE3	1:221:A:GLU:HG3	17	0.19
(1,574)	1:228:A:TRP:HE3	1:221:A:GLU:HG3	18	0.19
(1,574)	1:228:A:TRP:HE3	1:221:A:GLU:HG3	30	0.19
(1,557)	1:227:A:THR:HB	1:228:A:TRP:H	17	0.19
(1,553)	1:227:A:THR:H	1:228:A:TRP:H	2	0.19
(1,553)	1:227:A:THR:H	1:228:A:TRP:H	4	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,553)	1:227:A:THR:H	1:228:A:TRP:H	8	0.19
(1,553)	1:227:A:THR:H	1:228:A:TRP:H	9	0.19
(1,553)	1:227:A:THR:H	1:228:A:TRP:H	10	0.19
(1,553)	1:227:A:THR:H	1:228:A:TRP:H	18	0.19
(1,553)	1:227:A:THR:H	1:228:A:TRP:H	19	0.19
(1,553)	1:227:A:THR:H	1:228:A:TRP:H	21	0.19
(1,553)	1:227:A:THR:H	1:228:A:TRP:H	23	0.19
(1,553)	1:227:A:THR:H	1:228:A:TRP:H	27	0.19
(1,501)	1:224:A:ASP:HB3	1:229:A:VAL:HB	12	0.19
(1,501)	1:224:A:ASP:HB3	1:229:A:VAL:HB	20	0.19
(1,499)	1:224:A:ASP:H	1:229:A:VAL:HB	24	0.19
(1,337)	1:217:A:CYS:HB2	1:237:A:PHE:HA	7	0.19
(1,337)	1:217:A:CYS:HB2	1:237:A:PHE:HA	12	0.19
(1,337)	1:217:A:CYS:HB2	1:237:A:PHE:HA	13	0.19
(1,337)	1:217:A:CYS:HB2	1:237:A:PHE:HA	21	0.19
(1,337)	1:217:A:CYS:HB2	1:237:A:PHE:HA	22	0.19
(1,337)	1:217:A:CYS:HB2	1:237:A:PHE:HA	24	0.19
(1,306)	1:216:A:LEU:HD11	1:254:A:ALA:H	29	0.19
(1,306)	1:216:A:LEU:HD12	1:254:A:ALA:H	29	0.19
(1,306)	1:216:A:LEU:HD13	1:254:A:ALA:H	29	0.19
(1,283)	1:216:A:LEU:HD11	1:258:A:PHE:HA	29	0.19
(1,283)	1:216:A:LEU:HD12	1:258:A:PHE:HA	29	0.19
(1,283)	1:216:A:LEU:HD13	1:258:A:PHE:HA	29	0.19
(1,278)	1:216:A:LEU:HD11	1:258:A:PHE:HB3	7	0.19
(1,278)	1:216:A:LEU:HD12	1:258:A:PHE:HB3	7	0.19
(1,278)	1:216:A:LEU:HD13	1:258:A:PHE:HB3	7	0.19
(1,254)	1:215:A:TYR:H	1:216:A:LEU:HD21	26	0.19
(1,254)	1:215:A:TYR:H	1:216:A:LEU:HD22	26	0.19
(1,254)	1:215:A:TYR:H	1:216:A:LEU:HD23	26	0.19
(1,145)	1:194:A:ASP:HB3	1:193:A:MET:HA	23	0.19
(1,106)	1:192:A:LEU:HD21	1:191:A:TYR:HB3	20	0.19
(1,106)	1:192:A:LEU:HD22	1:191:A:TYR:HB3	20	0.19
(1,106)	1:192:A:LEU:HD23	1:191:A:TYR:HB3	20	0.19
(1,93)	1:192:A:LEU:HD21	1:237:A:PHE:HZ	27	0.19
(1,93)	1:192:A:LEU:HD22	1:237:A:PHE:HZ	27	0.19
(1,93)	1:192:A:LEU:HD23	1:237:A:PHE:HZ	27	0.19
(1,85)	1:192:A:LEU:HD21	1:348:A:PHE:H	19	0.19
(1,85)	1:192:A:LEU:HD22	1:348:A:PHE:H	19	0.19
(1,85)	1:192:A:LEU:HD23	1:348:A:PHE:H	19	0.19
(1,85)	1:192:A:LEU:HD21	1:348:A:PHE:H	21	0.19
(1,85)	1:192:A:LEU:HD22	1:348:A:PHE:H	21	0.19
(1,85)	1:192:A:LEU:HD23	1:348:A:PHE:H	21	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,68)	1:191:A:TYR:H	1:192:A:LEU:H	21	0.19
(1,63)	1:190:A:ARG:H	1:191:A:TYR:H	6	0.19
(1,63)	1:190:A:ARG:H	1:191:A:TYR:H	15	0.19
(1,16)	1:188:A:ILE:HB	1:188:A:ILE:H	28	0.19
(3,111)	1:265:A:LEU:N	1:262:A:VAL:O	27	0.18
(3,59)	1:332:A:GLN:H	1:305:A:LEU:O	3	0.18
(3,59)	1:332:A:GLN:H	1:305:A:LEU:O	9	0.18
(3,59)	1:332:A:GLN:H	1:305:A:LEU:O	13	0.18
(3,33)	1:276:A:THR:H	1:219:A:GLU:O	2	0.18
(3,25)	1:260:A:ASP:H	1:256:A:LEU:O	17	0.18
(3,21)	1:235:A:MET:H	1:232:A:ASP:O	24	0.18
(3,16)	1:229:A:VAL:H	1:222:A:ARG:O	24	0.18
(1,3061)	1:380:A:GLN:HE22	1:380:A:GLN:HG3	2	0.18
(1,3061)	1:380:A:GLN:HE22	1:380:A:GLN:HG3	5	0.18
(1,3061)	1:380:A:GLN:HE22	1:380:A:GLN:HG3	6	0.18
(1,3061)	1:380:A:GLN:HE22	1:380:A:GLN:HG3	7	0.18
(1,3061)	1:380:A:GLN:HE22	1:380:A:GLN:HG3	9	0.18
(1,3061)	1:380:A:GLN:HE22	1:380:A:GLN:HG3	11	0.18
(1,3061)	1:380:A:GLN:HE22	1:380:A:GLN:HG3	12	0.18
(1,3061)	1:380:A:GLN:HE22	1:380:A:GLN:HG3	14	0.18
(1,3061)	1:380:A:GLN:HE22	1:380:A:GLN:HG3	15	0.18
(1,3061)	1:380:A:GLN:HE22	1:380:A:GLN:HG3	16	0.18
(1,3061)	1:380:A:GLN:HE22	1:380:A:GLN:HG3	19	0.18
(1,3061)	1:380:A:GLN:HE22	1:380:A:GLN:HG3	20	0.18
(1,3061)	1:380:A:GLN:HE22	1:380:A:GLN:HG3	21	0.18
(1,3061)	1:380:A:GLN:HE22	1:380:A:GLN:HG3	23	0.18
(1,3061)	1:380:A:GLN:HE22	1:380:A:GLN:HG3	24	0.18
(1,3061)	1:380:A:GLN:HE22	1:380:A:GLN:HG3	25	0.18
(1,3061)	1:380:A:GLN:HE22	1:380:A:GLN:HG3	28	0.18
(1,3061)	1:380:A:GLN:HE22	1:380:A:GLN:HG3	30	0.18
(1,3029)	1:378:A:GLN:H	1:377:A:LEU:HA	15	0.18
(1,2858)	1:367:A:GLN:HE22	1:366:A:SER:H	27	0.18
(1,2799)	1:362:A:LEU:HD11	1:359:A:TRP:H	29	0.18
(1,2799)	1:362:A:LEU:HD12	1:359:A:TRP:H	29	0.18
(1,2799)	1:362:A:LEU:HD13	1:359:A:TRP:H	29	0.18
(1,2791)	1:362:A:LEU:H	1:359:A:TRP:H	12	0.18
(1,2791)	1:362:A:LEU:H	1:359:A:TRP:H	23	0.18
(1,2791)	1:362:A:LEU:H	1:359:A:TRP:H	30	0.18
(1,2776)	1:360:A:ASP:HB3	1:360:A:ASP:H	27	0.18
(1,2758)	1:359:A:TRP:HE3	1:360:A:ASP:H	25	0.18
(1,2731)	1:357:A:GLN:H	1:356:A:PHE:HB3	29	0.18
(1,2713)	1:356:A:PHE:HB2	1:357:A:GLN:H	5	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2713)	1:356:A:PHE:HB2	1:357:A:GLN:H	17	0.18
(1,2713)	1:356:A:PHE:HB2	1:357:A:GLN:H	26	0.18
(1,2672)	1:351:A:ARG:HD3	1:345:A:TRP:HA	19	0.18
(1,2490)	1:342:A:GLU:H	1:342:A:GLU:HG3	30	0.18
(1,2388)	1:335:A:ILE:H	1:335:A:ILE:HD11	15	0.18
(1,2388)	1:335:A:ILE:H	1:335:A:ILE:HD12	15	0.18
(1,2388)	1:335:A:ILE:H	1:335:A:ILE:HD13	15	0.18
(1,2370)	1:333:A:VAL:H	1:332:A:GLN:HB3	26	0.18
(1,2364)	1:333:A:VAL:HB	1:308:A:PHE:HA	22	0.18
(1,1981)	1:305:A:LEU:HD11	1:275:A:VAL:HB	6	0.18
(1,1981)	1:305:A:LEU:HD12	1:275:A:VAL:HB	6	0.18
(1,1981)	1:305:A:LEU:HD13	1:275:A:VAL:HB	6	0.18
(1,1946)	1:305:A:LEU:HD11	1:306:A:ARG:HA	15	0.18
(1,1946)	1:305:A:LEU:HD12	1:306:A:ARG:HA	15	0.18
(1,1946)	1:305:A:LEU:HD13	1:306:A:ARG:HA	15	0.18
(1,1946)	1:305:A:LEU:HD11	1:306:A:ARG:HA	18	0.18
(1,1946)	1:305:A:LEU:HD12	1:306:A:ARG:HA	18	0.18
(1,1946)	1:305:A:LEU:HD13	1:306:A:ARG:HA	18	0.18
(1,1946)	1:305:A:LEU:HD11	1:306:A:ARG:HA	19	0.18
(1,1946)	1:305:A:LEU:HD12	1:306:A:ARG:HA	19	0.18
(1,1946)	1:305:A:LEU:HD13	1:306:A:ARG:HA	19	0.18
(1,1937)	1:304:A:ARG:H	1:303:A:VAL:HB	10	0.18
(1,1937)	1:304:A:ARG:H	1:303:A:VAL:HB	23	0.18
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD21	23	0.18
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD22	23	0.18
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD23	23	0.18
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD21	23	0.18
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD22	23	0.18
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD23	23	0.18
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD21	23	0.18
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD22	23	0.18
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD23	23	0.18
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG21	1:262:A:VAL:HG11	13	0.18
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG21	1:262:A:VAL:HG12	13	0.18
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG21	1:262:A:VAL:HG13	13	0.18
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG22	1:262:A:VAL:HG11	13	0.18
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG22	1:262:A:VAL:HG12	13	0.18
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG22	1:262:A:VAL:HG13	13	0.18
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG23	1:262:A:VAL:HG11	13	0.18
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG23	1:262:A:VAL:HG12	13	0.18
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG23	1:262:A:VAL:HG13	13	0.18
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG21	1:262:A:VAL:HG11	14	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG21	1:262:A:VAL:HG12	14	0.18
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG21	1:262:A:VAL:HG13	14	0.18
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG22	1:262:A:VAL:HG11	14	0.18
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG22	1:262:A:VAL:HG12	14	0.18
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG22	1:262:A:VAL:HG13	14	0.18
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG23	1:262:A:VAL:HG11	14	0.18
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG23	1:262:A:VAL:HG12	14	0.18
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG23	1:262:A:VAL:HG13	14	0.18
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG21	1:262:A:VAL:HG11	23	0.18
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG21	1:262:A:VAL:HG12	23	0.18
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG21	1:262:A:VAL:HG13	23	0.18
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG22	1:262:A:VAL:HG11	23	0.18
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG22	1:262:A:VAL:HG12	23	0.18
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG22	1:262:A:VAL:HG13	23	0.18
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG23	1:262:A:VAL:HG11	23	0.18
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG23	1:262:A:VAL:HG12	23	0.18
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG23	1:262:A:VAL:HG13	23	0.18
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG21	1:262:A:VAL:HG11	27	0.18
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG21	1:262:A:VAL:HG12	27	0.18
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG21	1:262:A:VAL:HG13	27	0.18
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG22	1:262:A:VAL:HG11	27	0.18
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG22	1:262:A:VAL:HG12	27	0.18
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG22	1:262:A:VAL:HG13	27	0.18
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG23	1:262:A:VAL:HG11	27	0.18
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG23	1:262:A:VAL:HG12	27	0.18
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG23	1:262:A:VAL:HG13	27	0.18
(1,1876)	1:302:A:HIS:HD2	1:303:A:VAL:HB	12	0.18
(1,1748)	1:296:A:PHE:HE1	1:297:A:LEU:HD21	26	0.18
(1,1748)	1:296:A:PHE:HE1	1:297:A:LEU:HD22	26	0.18
(1,1748)	1:296:A:PHE:HE1	1:297:A:LEU:HD23	26	0.18
(1,1748)	1:296:A:PHE:HE2	1:297:A:LEU:HD21	26	0.18
(1,1748)	1:296:A:PHE:HE2	1:297:A:LEU:HD22	26	0.18
(1,1748)	1:296:A:PHE:HE2	1:297:A:LEU:HD23	26	0.18
(1,1646)	1:286:A:SER:H	1:289:A:CYS:HA	3	0.18
(1,1646)	1:286:A:SER:H	1:289:A:CYS:HA	7	0.18
(1,1646)	1:286:A:SER:H	1:289:A:CYS:HA	14	0.18
(1,1646)	1:286:A:SER:H	1:289:A:CYS:HA	18	0.18
(1,1646)	1:286:A:SER:H	1:289:A:CYS:HA	23	0.18
(1,1646)	1:286:A:SER:H	1:289:A:CYS:HA	25	0.18
(1,1609)	1:281:A:TRP:HE3	1:314:A:ASP:H	8	0.18
(1,1491)	1:277:A:TRP:HE1	1:305:A:LEU:HG	1	0.18
(1,1491)	1:277:A:TRP:HE1	1:305:A:LEU:HG	17	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1444)	1:275:A:VAL:HB	1:305:A:LEU:HD21	21	0.18
(1,1444)	1:275:A:VAL:HB	1:305:A:LEU:HD22	21	0.18
(1,1444)	1:275:A:VAL:HB	1:305:A:LEU:HD23	21	0.18
(1,1444)	1:275:A:VAL:HB	1:305:A:LEU:HD21	25	0.18
(1,1444)	1:275:A:VAL:HB	1:305:A:LEU:HD22	25	0.18
(1,1444)	1:275:A:VAL:HB	1:305:A:LEU:HD23	25	0.18
(1,1260)	1:267:A:LEU:H	1:266:A:GLN:HB3	8	0.18
(1,1229)	1:266:A:GLN:HB3	1:266:A:GLN:H	8	0.18
(1,1229)	1:266:A:GLN:HB3	1:266:A:GLN:H	9	0.18
(1,1228)	1:266:A:GLN:H	1:265:A:LEU:HA	19	0.18
(1,1207)	1:265:A:LEU:HD21	1:263:A:PRO:HD3	9	0.18
(1,1207)	1:265:A:LEU:HD22	1:263:A:PRO:HD3	9	0.18
(1,1207)	1:265:A:LEU:HD23	1:263:A:PRO:HD3	9	0.18
(1,1206)	1:265:A:LEU:HD21	1:262:A:VAL:HB	1	0.18
(1,1206)	1:265:A:LEU:HD22	1:262:A:VAL:HB	1	0.18
(1,1206)	1:265:A:LEU:HD23	1:262:A:VAL:HB	1	0.18
(1,1206)	1:265:A:LEU:HD21	1:262:A:VAL:HB	19	0.18
(1,1206)	1:265:A:LEU:HD22	1:262:A:VAL:HB	19	0.18
(1,1206)	1:265:A:LEU:HD23	1:262:A:VAL:HB	19	0.18
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD21	5	0.18
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD22	5	0.18
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD23	5	0.18
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD21	5	0.18
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD22	5	0.18
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD23	5	0.18
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD21	5	0.18
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD22	5	0.18
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD23	5	0.18
(1,1155)	1:262:A:VAL:HA	1:265:A:LEU:HB3	9	0.18
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG11	1:265:A:LEU:HD21	9	0.18
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG11	1:265:A:LEU:HD22	9	0.18
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG11	1:265:A:LEU:HD23	9	0.18
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG12	1:265:A:LEU:HD21	9	0.18
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG12	1:265:A:LEU:HD22	9	0.18
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG12	1:265:A:LEU:HD23	9	0.18
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG13	1:265:A:LEU:HD21	9	0.18
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG13	1:265:A:LEU:HD22	9	0.18
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG13	1:265:A:LEU:HD23	9	0.18
(1,1116)	1:261:A:LEU:HD21	1:262:A:VAL:HG11	6	0.18
(1,1116)	1:261:A:LEU:HD21	1:262:A:VAL:HG12	6	0.18
(1,1116)	1:261:A:LEU:HD21	1:262:A:VAL:HG13	6	0.18
(1,1116)	1:261:A:LEU:HD22	1:262:A:VAL:HG11	6	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1116)	1:261:A:LEU:HD22	1:262:A:VAL:HG12	6	0.18
(1,1116)	1:261:A:LEU:HD22	1:262:A:VAL:HG13	6	0.18
(1,1116)	1:261:A:LEU:HD23	1:262:A:VAL:HG11	6	0.18
(1,1116)	1:261:A:LEU:HD23	1:262:A:VAL:HG12	6	0.18
(1,1116)	1:261:A:LEU:HD23	1:262:A:VAL:HG13	6	0.18
(1,1116)	1:261:A:LEU:HD21	1:262:A:VAL:HG11	24	0.18
(1,1116)	1:261:A:LEU:HD21	1:262:A:VAL:HG12	24	0.18
(1,1116)	1:261:A:LEU:HD21	1:262:A:VAL:HG13	24	0.18
(1,1116)	1:261:A:LEU:HD22	1:262:A:VAL:HG11	24	0.18
(1,1116)	1:261:A:LEU:HD22	1:262:A:VAL:HG12	24	0.18
(1,1116)	1:261:A:LEU:HD22	1:262:A:VAL:HG13	24	0.18
(1,1116)	1:261:A:LEU:HD23	1:262:A:VAL:HG11	24	0.18
(1,1116)	1:261:A:LEU:HD23	1:262:A:VAL:HG12	24	0.18
(1,1116)	1:261:A:LEU:HD23	1:262:A:VAL:HG13	24	0.18
(1,1101)	1:261:A:LEU:HD21	1:238:A:LEU:HB2	10	0.18
(1,1101)	1:261:A:LEU:HD22	1:238:A:LEU:HB2	10	0.18
(1,1101)	1:261:A:LEU:HD23	1:238:A:LEU:HB2	10	0.18
(1,1101)	1:261:A:LEU:HD21	1:238:A:LEU:HB2	15	0.18
(1,1101)	1:261:A:LEU:HD22	1:238:A:LEU:HB2	15	0.18
(1,1101)	1:261:A:LEU:HD23	1:238:A:LEU:HB2	15	0.18
(1,1088)	1:261:A:LEU:HD11	1:258:A:PHE:HZ	22	0.18
(1,1088)	1:261:A:LEU:HD12	1:258:A:PHE:HZ	22	0.18
(1,1088)	1:261:A:LEU:HD13	1:258:A:PHE:HZ	22	0.18
(1,1001)	1:258:A:PHE:HZ	1:259:A:LEU:HD11	11	0.18
(1,1001)	1:258:A:PHE:HZ	1:259:A:LEU:HD12	11	0.18
(1,1001)	1:258:A:PHE:HZ	1:259:A:LEU:HD13	11	0.18
(1,1001)	1:258:A:PHE:HZ	1:259:A:LEU:HD11	22	0.18
(1,1001)	1:258:A:PHE:HZ	1:259:A:LEU:HD12	22	0.18
(1,1001)	1:258:A:PHE:HZ	1:259:A:LEU:HD13	22	0.18
(1,839)	1:241:A:GLU:H	1:252:A:ARG:HD3	29	0.18
(1,735)	1:235:A:MET:HB2	1:235:A:MET:H	19	0.18
(1,719)	1:234:A:HIS:H	1:265:A:LEU:HD11	3	0.18
(1,719)	1:234:A:HIS:H	1:265:A:LEU:HD12	3	0.18
(1,719)	1:234:A:HIS:H	1:265:A:LEU:HD13	3	0.18
(1,719)	1:234:A:HIS:H	1:265:A:LEU:HD11	7	0.18
(1,719)	1:234:A:HIS:H	1:265:A:LEU:HD12	7	0.18
(1,719)	1:234:A:HIS:H	1:265:A:LEU:HD13	7	0.18
(1,673)	1:231:A:MET:H	1:221:A:GLU:H	29	0.18
(1,640)	1:230:A:LEU:HD11	1:228:A:TRP:HE3	9	0.18
(1,640)	1:230:A:LEU:HD12	1:228:A:TRP:HE3	9	0.18
(1,640)	1:230:A:LEU:HD13	1:228:A:TRP:HE3	9	0.18
(1,621)	1:229:A:VAL:H	1:228:A:TRP:HB2	24	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,621)	1:229:A:VAL:H	1:228:A:TRP:HB2	29	0.18
(1,574)	1:228:A:TRP:HE3	1:221:A:GLU:HG3	4	0.18
(1,574)	1:228:A:TRP:HE3	1:221:A:GLU:HG3	21	0.18
(1,574)	1:228:A:TRP:HE3	1:221:A:GLU:HG3	22	0.18
(1,557)	1:227:A:THR:HB	1:228:A:TRP:H	11	0.18
(1,557)	1:227:A:THR:HB	1:228:A:TRP:H	19	0.18
(1,557)	1:227:A:THR:HB	1:228:A:TRP:H	26	0.18
(1,553)	1:227:A:THR:H	1:228:A:TRP:H	1	0.18
(1,553)	1:227:A:THR:H	1:228:A:TRP:H	5	0.18
(1,553)	1:227:A:THR:H	1:228:A:TRP:H	12	0.18
(1,553)	1:227:A:THR:H	1:228:A:TRP:H	17	0.18
(1,553)	1:227:A:THR:H	1:228:A:TRP:H	25	0.18
(1,528)	1:225:A:ASN:HD22	1:225:A:ASN:HB3	14	0.18
(1,501)	1:224:A:ASP:HB3	1:229:A:VAL:HB	6	0.18
(1,501)	1:224:A:ASP:HB3	1:229:A:VAL:HB	16	0.18
(1,501)	1:224:A:ASP:HB3	1:229:A:VAL:HB	18	0.18
(1,473)	1:223:A:LEU:H	1:222:A:ARG:HB2	23	0.18
(1,309)	1:216:A:LEU:HD11	1:258:A:PHE:HE1	26	0.18
(1,309)	1:216:A:LEU:HD11	1:258:A:PHE:HE2	26	0.18
(1,309)	1:216:A:LEU:HD12	1:258:A:PHE:HE1	26	0.18
(1,309)	1:216:A:LEU:HD12	1:258:A:PHE:HE2	26	0.18
(1,309)	1:216:A:LEU:HD13	1:258:A:PHE:HE1	26	0.18
(1,309)	1:216:A:LEU:HD13	1:258:A:PHE:HE2	26	0.18
(1,306)	1:216:A:LEU:HD11	1:254:A:ALA:H	2	0.18
(1,306)	1:216:A:LEU:HD12	1:254:A:ALA:H	2	0.18
(1,306)	1:216:A:LEU:HD13	1:254:A:ALA:H	2	0.18
(1,306)	1:216:A:LEU:HD11	1:254:A:ALA:H	13	0.18
(1,306)	1:216:A:LEU:HD12	1:254:A:ALA:H	13	0.18
(1,306)	1:216:A:LEU:HD13	1:254:A:ALA:H	13	0.18
(1,306)	1:216:A:LEU:HD11	1:254:A:ALA:H	15	0.18
(1,306)	1:216:A:LEU:HD12	1:254:A:ALA:H	15	0.18
(1,306)	1:216:A:LEU:HD13	1:254:A:ALA:H	15	0.18
(1,278)	1:216:A:LEU:HD11	1:258:A:PHE:HB3	9	0.18
(1,278)	1:216:A:LEU:HD12	1:258:A:PHE:HB3	9	0.18
(1,278)	1:216:A:LEU:HD13	1:258:A:PHE:HB3	9	0.18
(1,254)	1:215:A:TYR:H	1:216:A:LEU:HD21	25	0.18
(1,254)	1:215:A:TYR:H	1:216:A:LEU:HD22	25	0.18
(1,254)	1:215:A:TYR:H	1:216:A:LEU:HD23	25	0.18
(1,143)	1:194:A:ASP:HB2	1:193:A:MET:HA	9	0.18
(1,106)	1:192:A:LEU:HD21	1:191:A:TYR:HB3	8	0.18
(1,106)	1:192:A:LEU:HD22	1:191:A:TYR:HB3	8	0.18
(1,106)	1:192:A:LEU:HD23	1:191:A:TYR:HB3	8	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,104)	1:192:A:LEU:HD21	1:190:A:ARG:HA	19	0.18
(1,104)	1:192:A:LEU:HD22	1:190:A:ARG:HA	19	0.18
(1,104)	1:192:A:LEU:HD23	1:190:A:ARG:HA	19	0.18
(1,79)	1:191:A:TYR:H	1:190:A:ARG:HB2	27	0.18
(1,63)	1:190:A:ARG:H	1:191:A:TYR:H	21	0.18
(1,16)	1:188:A:ILE:HB	1:188:A:ILE:H	17	0.18
(3,59)	1:332:A:GLN:H	1:305:A:LEU:O	2	0.17
(3,59)	1:332:A:GLN:H	1:305:A:LEU:O	4	0.17
(3,59)	1:332:A:GLN:H	1:305:A:LEU:O	6	0.17
(3,59)	1:332:A:GLN:H	1:305:A:LEU:O	10	0.17
(3,59)	1:332:A:GLN:H	1:305:A:LEU:O	20	0.17
(3,37)	1:280:A:SER:H	1:215:A:TYR:O	14	0.17
(3,37)	1:280:A:SER:H	1:215:A:TYR:O	22	0.17
(3,37)	1:280:A:SER:H	1:215:A:TYR:O	28	0.17
(3,37)	1:280:A:SER:H	1:215:A:TYR:O	29	0.17
(3,33)	1:276:A:THR:H	1:219:A:GLU:O	5	0.17
(3,33)	1:276:A:THR:H	1:219:A:GLU:O	17	0.17
(3,25)	1:260:A:ASP:H	1:256:A:LEU:O	5	0.17
(3,24)	1:259:A:LEU:H	1:255:A:GLU:O	7	0.17
(1,3039)	1:379:A:ASN:HD22	1:379:A:ASN:HA	21	0.17
(1,2799)	1:362:A:LEU:HD11	1:359:A:TRP:H	27	0.17
(1,2799)	1:362:A:LEU:HD12	1:359:A:TRP:H	27	0.17
(1,2799)	1:362:A:LEU:HD13	1:359:A:TRP:H	27	0.17
(1,2758)	1:359:A:TRP:HE3	1:360:A:ASP:H	10	0.17
(1,2713)	1:356:A:PHE:HB2	1:357:A:GLN:H	2	0.17
(1,2713)	1:356:A:PHE:HB2	1:357:A:GLN:H	4	0.17
(1,2713)	1:356:A:PHE:HB2	1:357:A:GLN:H	11	0.17
(1,2713)	1:356:A:PHE:HB2	1:357:A:GLN:H	13	0.17
(1,2713)	1:356:A:PHE:HB2	1:357:A:GLN:H	15	0.17
(1,2713)	1:356:A:PHE:HB2	1:357:A:GLN:H	18	0.17
(1,2713)	1:356:A:PHE:HB2	1:357:A:GLN:H	30	0.17
(1,2549)	1:345:A:TRP:HE1	1:345:A:TRP:HA	4	0.17
(1,2332)	1:333:A:VAL:HG11	1:308:A:PHE:H	20	0.17
(1,2332)	1:333:A:VAL:HG12	1:308:A:PHE:H	20	0.17
(1,2332)	1:333:A:VAL:HG13	1:308:A:PHE:H	20	0.17
(1,2332)	1:333:A:VAL:HG11	1:308:A:PHE:H	29	0.17
(1,2332)	1:333:A:VAL:HG12	1:308:A:PHE:H	29	0.17
(1,2332)	1:333:A:VAL:HG13	1:308:A:PHE:H	29	0.17
(1,2284)	1:329:A:ALA:H	1:326:A:LEU:HG	6	0.17
(1,2284)	1:329:A:ALA:H	1:326:A:LEU:HG	23	0.17
(1,2284)	1:329:A:ALA:H	1:326:A:LEU:HG	29	0.17
(1,2164)	1:320:A:LYS:HD3	1:320:A:LYS:HA	27	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2117)	1:313:A:TYR:HE1	1:281:A:TRP:HZ3	4	0.17
(1,2117)	1:313:A:TYR:HE2	1:281:A:TRP:HZ3	4	0.17
(1,2023)	1:307:A:ILE:HB	1:308:A:PHE:HA	15	0.17
(1,1970)	1:305:A:LEU:HD21	1:258:A:PHE:HZ	20	0.17
(1,1970)	1:305:A:LEU:HD22	1:258:A:PHE:HZ	20	0.17
(1,1970)	1:305:A:LEU:HD23	1:258:A:PHE:HZ	20	0.17
(1,1946)	1:305:A:LEU:HD11	1:306:A:ARG:HA	20	0.17
(1,1946)	1:305:A:LEU:HD12	1:306:A:ARG:HA	20	0.17
(1,1946)	1:305:A:LEU:HD13	1:306:A:ARG:HA	20	0.17
(1,1937)	1:304:A:ARG:H	1:303:A:VAL:HB	21	0.17
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD21	2	0.17
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD22	2	0.17
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD23	2	0.17
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD21	2	0.17
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD22	2	0.17
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD23	2	0.17
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD21	2	0.17
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD22	2	0.17
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD23	2	0.17
(1,1834)	1:299:A:GLU:HG2	1:296:A:PHE:HD1	9	0.17
(1,1834)	1:299:A:GLU:HG2	1:296:A:PHE:HD2	9	0.17
(1,1829)	1:299:A:GLU:HG3	1:300:A:ASN:H	7	0.17
(1,1829)	1:299:A:GLU:HG3	1:300:A:ASN:H	13	0.17
(1,1797)	1:298:A:GLN:HE21	1:299:A:GLU:HB3	25	0.17
(1,1768)	1:296:A:PHE:HE1	1:259:A:LEU:HD21	26	0.17
(1,1768)	1:296:A:PHE:HE1	1:259:A:LEU:HD22	26	0.17
(1,1768)	1:296:A:PHE:HE1	1:259:A:LEU:HD23	26	0.17
(1,1768)	1:296:A:PHE:HE2	1:259:A:LEU:HD21	26	0.17
(1,1768)	1:296:A:PHE:HE2	1:259:A:LEU:HD22	26	0.17
(1,1768)	1:296:A:PHE:HE2	1:259:A:LEU:HD23	26	0.17
(1,1738)	1:296:A:PHE:HE1	1:263:A:PRO:HD2	4	0.17
(1,1738)	1:296:A:PHE:HE1	1:263:A:PRO:HD3	4	0.17
(1,1738)	1:296:A:PHE:HE2	1:263:A:PRO:HD2	4	0.17
(1,1738)	1:296:A:PHE:HE2	1:263:A:PRO:HD3	4	0.17
(1,1738)	1:296:A:PHE:HE1	1:263:A:PRO:HD2	11	0.17
(1,1738)	1:296:A:PHE:HE1	1:263:A:PRO:HD3	11	0.17
(1,1738)	1:296:A:PHE:HE2	1:263:A:PRO:HD2	11	0.17
(1,1738)	1:296:A:PHE:HE2	1:263:A:PRO:HD3	11	0.17
(1,1646)	1:286:A:SER:H	1:289:A:CYS:HA	8	0.17
(1,1646)	1:286:A:SER:H	1:289:A:CYS:HA	15	0.17
(1,1646)	1:286:A:SER:H	1:289:A:CYS:HA	22	0.17
(1,1641)	1:285:A:PHE:HE1	1:286:A:SER:HA	28	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1641)	1:285:A:PHE:HE2	1:286:A:SER:HA	28	0.17
(1,1609)	1:281:A:TRP:HE3	1:314:A:ASP:H	15	0.17
(1,1609)	1:281:A:TRP:HE3	1:314:A:ASP:H	17	0.17
(1,1609)	1:281:A:TRP:HE3	1:314:A:ASP:H	26	0.17
(1,1562)	1:279:A:ILE:HG13	1:309:A:ALA:HA	10	0.17
(1,1562)	1:279:A:ILE:HG13	1:309:A:ALA:HA	27	0.17
(1,1560)	1:279:A:ILE:HG12	1:309:A:ALA:HA	3	0.17
(1,1560)	1:279:A:ILE:HG12	1:309:A:ALA:HA	23	0.17
(1,1560)	1:279:A:ILE:HG12	1:309:A:ALA:HA	26	0.17
(1,1557)	1:279:A:ILE:H	1:308:A:PHE:H	30	0.17
(1,1524)	1:277:A:TRP:HH2	1:258:A:PHE:HA	11	0.17
(1,1524)	1:277:A:TRP:HH2	1:258:A:PHE:HA	17	0.17
(1,1491)	1:277:A:TRP:HE1	1:305:A:LEU:HG	9	0.17
(1,1491)	1:277:A:TRP:HE1	1:305:A:LEU:HG	10	0.17
(1,1491)	1:277:A:TRP:HE1	1:305:A:LEU:HG	13	0.17
(1,1491)	1:277:A:TRP:HE1	1:305:A:LEU:HG	25	0.17
(1,1380)	1:273:A:TYR:HA	1:223:A:LEU:HD21	25	0.17
(1,1380)	1:273:A:TYR:HA	1:223:A:LEU:HD22	25	0.17
(1,1380)	1:273:A:TYR:HA	1:223:A:LEU:HD23	25	0.17
(1,1333)	1:271:A:GLN:HG3	1:271:A:GLN:HA	10	0.17
(1,1260)	1:267:A:LEU:H	1:266:A:GLN:HB3	9	0.17
(1,1260)	1:267:A:LEU:H	1:266:A:GLN:HB3	10	0.17
(1,1260)	1:267:A:LEU:H	1:266:A:GLN:HB3	16	0.17
(1,1260)	1:267:A:LEU:H	1:266:A:GLN:HB3	24	0.17
(1,1229)	1:266:A:GLN:HB3	1:266:A:GLN:H	3	0.17
(1,1229)	1:266:A:GLN:HB3	1:266:A:GLN:H	7	0.17
(1,1229)	1:266:A:GLN:HB3	1:266:A:GLN:H	11	0.17
(1,1229)	1:266:A:GLN:HB3	1:266:A:GLN:H	13	0.17
(1,1229)	1:266:A:GLN:HB3	1:266:A:GLN:H	17	0.17
(1,1228)	1:266:A:GLN:H	1:265:A:LEU:HA	22	0.17
(1,1207)	1:265:A:LEU:HD21	1:263:A:PRO:HD3	10	0.17
(1,1207)	1:265:A:LEU:HD22	1:263:A:PRO:HD3	10	0.17
(1,1207)	1:265:A:LEU:HD23	1:263:A:PRO:HD3	10	0.17
(1,1206)	1:265:A:LEU:HD21	1:262:A:VAL:HB	7	0.17
(1,1206)	1:265:A:LEU:HD22	1:262:A:VAL:HB	7	0.17
(1,1206)	1:265:A:LEU:HD23	1:262:A:VAL:HB	7	0.17
(1,1206)	1:265:A:LEU:HD21	1:262:A:VAL:HB	11	0.17
(1,1206)	1:265:A:LEU:HD22	1:262:A:VAL:HB	11	0.17
(1,1206)	1:265:A:LEU:HD23	1:262:A:VAL:HB	11	0.17
(1,1185)	1:264:A:SER:H	1:261:A:LEU:HA	20	0.17
(1,1185)	1:264:A:SER:H	1:261:A:LEU:HA	24	0.17
(1,1173)	1:262:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HG	12	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1173)	1:262:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HG	12	0.17
(1,1173)	1:262:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HG	12	0.17
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD21	2	0.17
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD22	2	0.17
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD23	2	0.17
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD21	2	0.17
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD22	2	0.17
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD23	2	0.17
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD21	2	0.17
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD22	2	0.17
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD23	2	0.17
(1,1155)	1:262:A:VAL:HA	1:265:A:LEU:HB3	10	0.17
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG11	1:260:A:ASP:H	15	0.17
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG12	1:260:A:ASP:H	15	0.17
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG13	1:260:A:ASP:H	15	0.17
(1,1141)	1:262:A:VAL:HG11	1:265:A:LEU:HG	6	0.17
(1,1141)	1:262:A:VAL:HG12	1:265:A:LEU:HG	6	0.17
(1,1141)	1:262:A:VAL:HG13	1:265:A:LEU:HG	6	0.17
(1,1141)	1:262:A:VAL:HG11	1:265:A:LEU:HG	30	0.17
(1,1141)	1:262:A:VAL:HG12	1:265:A:LEU:HG	30	0.17
(1,1141)	1:262:A:VAL:HG13	1:265:A:LEU:HG	30	0.17
(1,1101)	1:261:A:LEU:HD21	1:238:A:LEU:HB2	16	0.17
(1,1101)	1:261:A:LEU:HD22	1:238:A:LEU:HB2	16	0.17
(1,1101)	1:261:A:LEU:HD23	1:238:A:LEU:HB2	16	0.17
(1,1100)	1:261:A:LEU:HD11	1:238:A:LEU:HB3	9	0.17
(1,1100)	1:261:A:LEU:HD12	1:238:A:LEU:HB3	9	0.17
(1,1100)	1:261:A:LEU:HD13	1:238:A:LEU:HB3	9	0.17
(1,1088)	1:261:A:LEU:HD11	1:258:A:PHE:HZ	17	0.17
(1,1088)	1:261:A:LEU:HD12	1:258:A:PHE:HZ	17	0.17
(1,1088)	1:261:A:LEU:HD13	1:258:A:PHE:HZ	17	0.17
(1,1088)	1:261:A:LEU:HD11	1:258:A:PHE:HZ	20	0.17
(1,1088)	1:261:A:LEU:HD12	1:258:A:PHE:HZ	20	0.17
(1,1088)	1:261:A:LEU:HD13	1:258:A:PHE:HZ	20	0.17
(1,1001)	1:258:A:PHE:HZ	1:259:A:LEU:HD11	4	0.17
(1,1001)	1:258:A:PHE:HZ	1:259:A:LEU:HD12	4	0.17
(1,1001)	1:258:A:PHE:HZ	1:259:A:LEU:HD13	4	0.17
(1,743)	1:235:A:MET:HE1	1:230:A:LEU:HD21	17	0.17
(1,743)	1:235:A:MET:HE1	1:230:A:LEU:HD22	17	0.17
(1,743)	1:235:A:MET:HE1	1:230:A:LEU:HD23	17	0.17
(1,743)	1:235:A:MET:HE2	1:230:A:LEU:HD21	17	0.17
(1,743)	1:235:A:MET:HE2	1:230:A:LEU:HD22	17	0.17
(1,743)	1:235:A:MET:HE2	1:230:A:LEU:HD23	17	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,743)	1:235:A:MET:HE3	1:230:A:LEU:HD21	17	0.17
(1,743)	1:235:A:MET:HE3	1:230:A:LEU:HD22	17	0.17
(1,743)	1:235:A:MET:HE3	1:230:A:LEU:HD23	17	0.17
(1,673)	1:231:A:MET:H	1:221:A:GLU:H	25	0.17
(1,666)	1:230:A:LEU:HD11	1:228:A:TRP:HB2	28	0.17
(1,666)	1:230:A:LEU:HD12	1:228:A:TRP:HB2	28	0.17
(1,666)	1:230:A:LEU:HD13	1:228:A:TRP:HB2	28	0.17
(1,666)	1:230:A:LEU:HD21	1:228:A:TRP:HB2	28	0.17
(1,666)	1:230:A:LEU:HD22	1:228:A:TRP:HB2	28	0.17
(1,666)	1:230:A:LEU:HD23	1:228:A:TRP:HB2	28	0.17
(1,658)	1:230:A:LEU:HD21	1:230:A:LEU:H	25	0.17
(1,658)	1:230:A:LEU:HD22	1:230:A:LEU:H	25	0.17
(1,658)	1:230:A:LEU:HD23	1:230:A:LEU:H	25	0.17
(1,658)	1:230:A:LEU:HD21	1:230:A:LEU:H	28	0.17
(1,658)	1:230:A:LEU:HD22	1:230:A:LEU:H	28	0.17
(1,658)	1:230:A:LEU:HD23	1:230:A:LEU:H	28	0.17
(1,640)	1:230:A:LEU:HD11	1:228:A:TRP:HE3	7	0.17
(1,640)	1:230:A:LEU:HD12	1:228:A:TRP:HE3	7	0.17
(1,640)	1:230:A:LEU:HD13	1:228:A:TRP:HE3	7	0.17
(1,600)	1:229:A:VAL:HB	1:222:A:ARG:H	3	0.17
(1,600)	1:229:A:VAL:HB	1:222:A:ARG:H	6	0.17
(1,600)	1:229:A:VAL:HB	1:222:A:ARG:H	8	0.17
(1,574)	1:228:A:TRP:HE3	1:221:A:GLU:HG3	1	0.17
(1,574)	1:228:A:TRP:HE3	1:221:A:GLU:HG3	20	0.17
(1,557)	1:227:A:THR:HB	1:228:A:TRP:H	5	0.17
(1,557)	1:227:A:THR:HB	1:228:A:TRP:H	14	0.17
(1,557)	1:227:A:THR:HB	1:228:A:TRP:H	25	0.17
(1,553)	1:227:A:THR:H	1:228:A:TRP:H	6	0.17
(1,553)	1:227:A:THR:H	1:228:A:TRP:H	11	0.17
(1,553)	1:227:A:THR:H	1:228:A:TRP:H	13	0.17
(1,553)	1:227:A:THR:H	1:228:A:TRP:H	16	0.17
(1,553)	1:227:A:THR:H	1:228:A:TRP:H	22	0.17
(1,553)	1:227:A:THR:H	1:228:A:TRP:H	26	0.17
(1,553)	1:227:A:THR:H	1:228:A:TRP:H	28	0.17
(1,553)	1:227:A:THR:H	1:228:A:TRP:H	29	0.17
(1,553)	1:227:A:THR:H	1:228:A:TRP:H	30	0.17
(1,501)	1:224:A:ASP:HB3	1:229:A:VAL:HB	25	0.17
(1,337)	1:217:A:CYS:HB2	1:237:A:PHE:HA	4	0.17
(1,337)	1:217:A:CYS:HB2	1:237:A:PHE:HA	5	0.17
(1,337)	1:217:A:CYS:HB2	1:237:A:PHE:HA	16	0.17
(1,278)	1:216:A:LEU:HD11	1:258:A:PHE:HB3	4	0.17
(1,278)	1:216:A:LEU:HD12	1:258:A:PHE:HB3	4	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,278)	1:216:A:LEU:HD13	1:258:A:PHE:HB3	4	0.17
(1,254)	1:215:A:TYR:H	1:216:A:LEU:HD21	7	0.17
(1,254)	1:215:A:TYR:H	1:216:A:LEU:HD22	7	0.17
(1,254)	1:215:A:TYR:H	1:216:A:LEU:HD23	7	0.17
(1,254)	1:215:A:TYR:H	1:216:A:LEU:HD21	12	0.17
(1,254)	1:215:A:TYR:H	1:216:A:LEU:HD22	12	0.17
(1,254)	1:215:A:TYR:H	1:216:A:LEU:HD23	12	0.17
(1,169)	1:196:A:ASP:H	1:195:A:PRO:HB3	5	0.17
(1,143)	1:194:A:ASP:HB2	1:193:A:MET:HA	22	0.17
(1,104)	1:192:A:LEU:HD21	1:190:A:ARG:HA	21	0.17
(1,104)	1:192:A:LEU:HD22	1:190:A:ARG:HA	21	0.17
(1,104)	1:192:A:LEU:HD23	1:190:A:ARG:HA	21	0.17
(1,79)	1:191:A:TYR:H	1:190:A:ARG:HB2	10	0.17
(1,68)	1:191:A:TYR:H	1:192:A:LEU:H	5	0.17
(1,63)	1:190:A:ARG:H	1:191:A:TYR:H	14	0.17
(3,122)	1:294:A:ARG:N	1:290:A:ALA:O	30	0.16
(3,104)	1:235:A:MET:N	1:232:A:ASP:O	7	0.16
(3,59)	1:332:A:GLN:H	1:305:A:LEU:O	21	0.16
(3,59)	1:332:A:GLN:H	1:305:A:LEU:O	23	0.16
(3,50)	1:309:A:ALA:H	1:334:A:SER:O	26	0.16
(3,37)	1:280:A:SER:H	1:215:A:TYR:O	21	0.16
(3,33)	1:276:A:THR:H	1:219:A:GLU:O	1	0.16
(3,33)	1:276:A:THR:H	1:219:A:GLU:O	8	0.16
(3,33)	1:276:A:THR:H	1:219:A:GLU:O	10	0.16
(3,28)	1:265:A:LEU:H	1:262:A:VAL:O	12	0.16
(3,25)	1:260:A:ASP:H	1:256:A:LEU:O	8	0.16
(1,3070)	1:255:A:GLU:H	1:255:A:GLU:OE1	24	0.16
(1,2862)	1:367:A:GLN:HG2	1:364:A:GLU:HA	17	0.16
(1,2824)	1:363:A:GLU:HB3	1:362:A:LEU:HD11	27	0.16
(1,2824)	1:363:A:GLU:HB3	1:362:A:LEU:HD12	27	0.16
(1,2824)	1:363:A:GLU:HB3	1:362:A:LEU:HD13	27	0.16
(1,2791)	1:362:A:LEU:H	1:359:A:TRP:H	19	0.16
(1,2759)	1:359:A:TRP:HD1	1:362:A:LEU:HA	4	0.16
(1,2750)	1:359:A:TRP:HE3	1:362:A:LEU:HD21	14	0.16
(1,2750)	1:359:A:TRP:HE3	1:362:A:LEU:HD22	14	0.16
(1,2750)	1:359:A:TRP:HE3	1:362:A:LEU:HD23	14	0.16
(1,2713)	1:356:A:PHE:HB2	1:357:A:GLN:H	6	0.16
(1,2713)	1:356:A:PHE:HB2	1:357:A:GLN:H	8	0.16
(1,2713)	1:356:A:PHE:HB2	1:357:A:GLN:H	9	0.16
(1,2713)	1:356:A:PHE:HB2	1:357:A:GLN:H	10	0.16
(1,2713)	1:356:A:PHE:HB2	1:357:A:GLN:H	23	0.16
(1,2690)	1:354:A:CYS:HB3	1:345:A:TRP:HZ2	21	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2466)	1:340:A:GLU:H	1:340:A:GLU:HB3	8	0.16
(1,2466)	1:340:A:GLU:H	1:340:A:GLU:HB3	19	0.16
(1,2466)	1:340:A:GLU:H	1:340:A:GLU:HB3	28	0.16
(1,2332)	1:333:A:VAL:HG11	1:308:A:PHE:H	24	0.16
(1,2332)	1:333:A:VAL:HG12	1:308:A:PHE:H	24	0.16
(1,2332)	1:333:A:VAL:HG13	1:308:A:PHE:H	24	0.16
(1,2164)	1:320:A:LYS:HD3	1:320:A:LYS:HA	22	0.16
(1,2023)	1:307:A:ILE:HB	1:308:A:PHE:HA	1	0.16
(1,2023)	1:307:A:ILE:HB	1:308:A:PHE:HA	8	0.16
(1,2023)	1:307:A:ILE:HB	1:308:A:PHE:HA	18	0.16
(1,1982)	1:305:A:LEU:HD11	1:307:A:ILE:HD11	11	0.16
(1,1982)	1:305:A:LEU:HD11	1:307:A:ILE:HD12	11	0.16
(1,1982)	1:305:A:LEU:HD11	1:307:A:ILE:HD13	11	0.16
(1,1982)	1:305:A:LEU:HD12	1:307:A:ILE:HD11	11	0.16
(1,1982)	1:305:A:LEU:HD12	1:307:A:ILE:HD12	11	0.16
(1,1982)	1:305:A:LEU:HD12	1:307:A:ILE:HD13	11	0.16
(1,1982)	1:305:A:LEU:HD13	1:307:A:ILE:HD11	11	0.16
(1,1982)	1:305:A:LEU:HD13	1:307:A:ILE:HD12	11	0.16
(1,1982)	1:305:A:LEU:HD13	1:307:A:ILE:HD13	11	0.16
(1,1981)	1:305:A:LEU:HD11	1:275:A:VAL:HB	1	0.16
(1,1981)	1:305:A:LEU:HD12	1:275:A:VAL:HB	1	0.16
(1,1981)	1:305:A:LEU:HD13	1:275:A:VAL:HB	1	0.16
(1,1981)	1:305:A:LEU:HD11	1:275:A:VAL:HB	5	0.16
(1,1981)	1:305:A:LEU:HD12	1:275:A:VAL:HB	5	0.16
(1,1981)	1:305:A:LEU:HD13	1:275:A:VAL:HB	5	0.16
(1,1970)	1:305:A:LEU:HD21	1:258:A:PHE:HZ	22	0.16
(1,1970)	1:305:A:LEU:HD22	1:258:A:PHE:HZ	22	0.16
(1,1970)	1:305:A:LEU:HD23	1:258:A:PHE:HZ	22	0.16
(1,1946)	1:305:A:LEU:HD11	1:306:A:ARG:HA	12	0.16
(1,1946)	1:305:A:LEU:HD12	1:306:A:ARG:HA	12	0.16
(1,1946)	1:305:A:LEU:HD13	1:306:A:ARG:HA	12	0.16
(1,1946)	1:305:A:LEU:HD11	1:306:A:ARG:HA	25	0.16
(1,1946)	1:305:A:LEU:HD12	1:306:A:ARG:HA	25	0.16
(1,1946)	1:305:A:LEU:HD13	1:306:A:ARG:HA	25	0.16
(1,1946)	1:305:A:LEU:HD11	1:306:A:ARG:HA	29	0.16
(1,1946)	1:305:A:LEU:HD12	1:306:A:ARG:HA	29	0.16
(1,1946)	1:305:A:LEU:HD13	1:306:A:ARG:HA	29	0.16
(1,1937)	1:304:A:ARG:H	1:303:A:VAL:HB	1	0.16
(1,1937)	1:304:A:ARG:H	1:303:A:VAL:HB	4	0.16
(1,1937)	1:304:A:ARG:H	1:303:A:VAL:HB	7	0.16
(1,1937)	1:304:A:ARG:H	1:303:A:VAL:HB	13	0.16
(1,1937)	1:304:A:ARG:H	1:303:A:VAL:HB	15	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1937)	1:304:A:ARG:H	1:303:A:VAL:HB	18	0.16
(1,1937)	1:304:A:ARG:H	1:303:A:VAL:HB	22	0.16
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD21	29	0.16
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD22	29	0.16
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD23	29	0.16
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD21	29	0.16
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD22	29	0.16
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD23	29	0.16
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD21	29	0.16
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD22	29	0.16
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD23	29	0.16
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG21	1:262:A:VAL:HG11	15	0.16
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG21	1:262:A:VAL:HG12	15	0.16
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG21	1:262:A:VAL:HG13	15	0.16
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG22	1:262:A:VAL:HG11	15	0.16
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG22	1:262:A:VAL:HG12	15	0.16
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG22	1:262:A:VAL:HG13	15	0.16
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG23	1:262:A:VAL:HG11	15	0.16
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG23	1:262:A:VAL:HG12	15	0.16
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG23	1:262:A:VAL:HG13	15	0.16
(1,1876)	1:302:A:HIS:HD2	1:303:A:VAL:HB	10	0.16
(1,1840)	1:299:A:GLU:HG2	1:300:A:ASN:H	9	0.16
(1,1834)	1:299:A:GLU:HG2	1:296:A:PHE:HD1	25	0.16
(1,1834)	1:299:A:GLU:HG2	1:296:A:PHE:HD2	25	0.16
(1,1829)	1:299:A:GLU:HG3	1:300:A:ASN:H	11	0.16
(1,1829)	1:299:A:GLU:HG3	1:300:A:ASN:H	26	0.16
(1,1822)	1:299:A:GLU:HB3	1:296:A:PHE:HD1	30	0.16
(1,1822)	1:299:A:GLU:HB3	1:296:A:PHE:HD2	30	0.16
(1,1797)	1:298:A:GLN:HE21	1:299:A:GLU:HB3	8	0.16
(1,1797)	1:298:A:GLN:HE21	1:299:A:GLU:HB3	23	0.16
(1,1738)	1:296:A:PHE:HE1	1:263:A:PRO:HD2	17	0.16
(1,1738)	1:296:A:PHE:HE1	1:263:A:PRO:HD3	17	0.16
(1,1738)	1:296:A:PHE:HE2	1:263:A:PRO:HD2	17	0.16
(1,1738)	1:296:A:PHE:HE2	1:263:A:PRO:HD3	17	0.16
(1,1738)	1:296:A:PHE:HE1	1:263:A:PRO:HD2	20	0.16
(1,1738)	1:296:A:PHE:HE1	1:263:A:PRO:HD3	20	0.16
(1,1738)	1:296:A:PHE:HE2	1:263:A:PRO:HD2	20	0.16
(1,1738)	1:296:A:PHE:HE2	1:263:A:PRO:HD3	20	0.16
(1,1738)	1:296:A:PHE:HE1	1:263:A:PRO:HD2	22	0.16
(1,1738)	1:296:A:PHE:HE1	1:263:A:PRO:HD3	22	0.16
(1,1738)	1:296:A:PHE:HE2	1:263:A:PRO:HD2	22	0.16
(1,1738)	1:296:A:PHE:HE2	1:263:A:PRO:HD3	22	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1646)	1:286:A:SER:H	1:289:A:CYS:HA	11	0.16
(1,1641)	1:285:A:PHE:HE1	1:286:A:SER:HA	2	0.16
(1,1641)	1:285:A:PHE:HE2	1:286:A:SER:HA	2	0.16
(1,1641)	1:285:A:PHE:HE1	1:286:A:SER:HA	5	0.16
(1,1641)	1:285:A:PHE:HE2	1:286:A:SER:HA	5	0.16
(1,1641)	1:285:A:PHE:HE1	1:286:A:SER:HA	6	0.16
(1,1641)	1:285:A:PHE:HE2	1:286:A:SER:HA	6	0.16
(1,1641)	1:285:A:PHE:HE1	1:286:A:SER:HA	7	0.16
(1,1641)	1:285:A:PHE:HE2	1:286:A:SER:HA	7	0.16
(1,1560)	1:279:A:ILE:HG12	1:309:A:ALA:HA	4	0.16
(1,1557)	1:279:A:ILE:H	1:308:A:PHE:H	16	0.16
(1,1523)	1:277:A:TRP:HZ2	1:238:A:LEU:HD21	16	0.16
(1,1523)	1:277:A:TRP:HZ2	1:238:A:LEU:HD22	16	0.16
(1,1523)	1:277:A:TRP:HZ2	1:238:A:LEU:HD23	16	0.16
(1,1491)	1:277:A:TRP:HE1	1:305:A:LEU:HG	3	0.16
(1,1491)	1:277:A:TRP:HE1	1:305:A:LEU:HG	5	0.16
(1,1491)	1:277:A:TRP:HE1	1:305:A:LEU:HG	19	0.16
(1,1491)	1:277:A:TRP:HE1	1:305:A:LEU:HG	22	0.16
(1,1491)	1:277:A:TRP:HE1	1:305:A:LEU:HG	28	0.16
(1,1464)	1:275:A:VAL:HB	1:305:A:LEU:HA	26	0.16
(1,1380)	1:273:A:TYR:HA	1:223:A:LEU:HD21	13	0.16
(1,1380)	1:273:A:TYR:HA	1:223:A:LEU:HD22	13	0.16
(1,1380)	1:273:A:TYR:HA	1:223:A:LEU:HD23	13	0.16
(1,1380)	1:273:A:TYR:HA	1:223:A:LEU:HD21	14	0.16
(1,1380)	1:273:A:TYR:HA	1:223:A:LEU:HD22	14	0.16
(1,1380)	1:273:A:TYR:HA	1:223:A:LEU:HD23	14	0.16
(1,1373)	1:273:A:TYR:HA	1:221:A:GLU:HB2	4	0.16
(1,1373)	1:273:A:TYR:HA	1:221:A:GLU:HB2	14	0.16
(1,1373)	1:273:A:TYR:HA	1:221:A:GLU:HB2	28	0.16
(1,1260)	1:267:A:LEU:H	1:266:A:GLN:HB3	7	0.16
(1,1260)	1:267:A:LEU:H	1:266:A:GLN:HB3	18	0.16
(1,1260)	1:267:A:LEU:H	1:266:A:GLN:HB3	20	0.16
(1,1229)	1:266:A:GLN:HB3	1:266:A:GLN:H	1	0.16
(1,1229)	1:266:A:GLN:HB3	1:266:A:GLN:H	16	0.16
(1,1229)	1:266:A:GLN:HB3	1:266:A:GLN:H	18	0.16
(1,1229)	1:266:A:GLN:HB3	1:266:A:GLN:H	21	0.16
(1,1229)	1:266:A:GLN:HB3	1:266:A:GLN:H	23	0.16
(1,1228)	1:266:A:GLN:H	1:265:A:LEU:HA	23	0.16
(1,1226)	1:266:A:GLN:H	1:265:A:LEU:HD21	24	0.16
(1,1226)	1:266:A:GLN:H	1:265:A:LEU:HD22	24	0.16
(1,1226)	1:266:A:GLN:H	1:265:A:LEU:HD23	24	0.16
(1,1185)	1:264:A:SER:H	1:261:A:LEU:HA	6	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1185)	1:264:A:SER:H	1:261:A:LEU:HA	17	0.16
(1,1185)	1:264:A:SER:H	1:261:A:LEU:HA	19	0.16
(1,1185)	1:264:A:SER:H	1:261:A:LEU:HA	28	0.16
(1,1173)	1:262:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HG	6	0.16
(1,1173)	1:262:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HG	6	0.16
(1,1173)	1:262:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HG	6	0.16
(1,1170)	1:262:A:VAL:H	1:261:A:LEU:HB2	26	0.16
(1,1169)	1:262:A:VAL:HG21	1:259:A:LEU:HB2	30	0.16
(1,1169)	1:262:A:VAL:HG22	1:259:A:LEU:HB2	30	0.16
(1,1169)	1:262:A:VAL:HG23	1:259:A:LEU:HB2	30	0.16
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG11	1:260:A:ASP:H	7	0.16
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG12	1:260:A:ASP:H	7	0.16
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG13	1:260:A:ASP:H	7	0.16
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG11	1:260:A:ASP:H	10	0.16
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG12	1:260:A:ASP:H	10	0.16
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG13	1:260:A:ASP:H	10	0.16
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG11	1:260:A:ASP:H	13	0.16
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG12	1:260:A:ASP:H	13	0.16
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG13	1:260:A:ASP:H	13	0.16
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG11	1:265:A:LEU:HD21	15	0.16
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG11	1:265:A:LEU:HD22	15	0.16
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG11	1:265:A:LEU:HD23	15	0.16
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG12	1:265:A:LEU:HD21	15	0.16
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG12	1:265:A:LEU:HD22	15	0.16
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG12	1:265:A:LEU:HD23	15	0.16
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG13	1:265:A:LEU:HD21	15	0.16
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG13	1:265:A:LEU:HD22	15	0.16
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG13	1:265:A:LEU:HD23	15	0.16
(1,1140)	1:262:A:VAL:HG21	1:262:A:VAL:H	20	0.16
(1,1140)	1:262:A:VAL:HG22	1:262:A:VAL:H	20	0.16
(1,1140)	1:262:A:VAL:HG23	1:262:A:VAL:H	20	0.16
(1,1100)	1:261:A:LEU:HD11	1:238:A:LEU:HB3	21	0.16
(1,1100)	1:261:A:LEU:HD12	1:238:A:LEU:HB3	21	0.16
(1,1100)	1:261:A:LEU:HD13	1:238:A:LEU:HB3	21	0.16
(1,1100)	1:261:A:LEU:HD11	1:238:A:LEU:HB3	25	0.16
(1,1100)	1:261:A:LEU:HD12	1:238:A:LEU:HB3	25	0.16
(1,1100)	1:261:A:LEU:HD13	1:238:A:LEU:HB3	25	0.16
(1,1088)	1:261:A:LEU:HD11	1:258:A:PHE:HZ	4	0.16
(1,1088)	1:261:A:LEU:HD12	1:258:A:PHE:HZ	4	0.16
(1,1088)	1:261:A:LEU:HD13	1:258:A:PHE:HZ	4	0.16
(1,1088)	1:261:A:LEU:HD11	1:258:A:PHE:HZ	11	0.16
(1,1088)	1:261:A:LEU:HD12	1:258:A:PHE:HZ	11	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1088)	1:261:A:LEU:HD13	1:258:A:PHE:HZ	11	0.16
(1,1082)	1:260:A:ASP:HA	1:262:A:VAL:H	17	0.16
(1,823)	1:238:A:LEU:HD11	1:254:A:ALA:HA	4	0.16
(1,823)	1:238:A:LEU:HD12	1:254:A:ALA:HA	4	0.16
(1,823)	1:238:A:LEU:HD13	1:254:A:ALA:HA	4	0.16
(1,816)	1:238:A:LEU:HD11	1:216:A:LEU:HA	2	0.16
(1,816)	1:238:A:LEU:HD12	1:216:A:LEU:HA	2	0.16
(1,816)	1:238:A:LEU:HD13	1:216:A:LEU:HA	2	0.16
(1,816)	1:238:A:LEU:HD21	1:216:A:LEU:HA	2	0.16
(1,816)	1:238:A:LEU:HD22	1:216:A:LEU:HA	2	0.16
(1,816)	1:238:A:LEU:HD23	1:216:A:LEU:HA	2	0.16
(1,816)	1:238:A:LEU:HD11	1:216:A:LEU:HA	15	0.16
(1,816)	1:238:A:LEU:HD12	1:216:A:LEU:HA	15	0.16
(1,816)	1:238:A:LEU:HD13	1:216:A:LEU:HA	15	0.16
(1,816)	1:238:A:LEU:HD21	1:216:A:LEU:HA	15	0.16
(1,816)	1:238:A:LEU:HD22	1:216:A:LEU:HA	15	0.16
(1,816)	1:238:A:LEU:HD23	1:216:A:LEU:HA	15	0.16
(1,816)	1:238:A:LEU:HD11	1:216:A:LEU:HA	19	0.16
(1,816)	1:238:A:LEU:HD12	1:216:A:LEU:HA	19	0.16
(1,816)	1:238:A:LEU:HD13	1:216:A:LEU:HA	19	0.16
(1,816)	1:238:A:LEU:HD21	1:216:A:LEU:HA	19	0.16
(1,816)	1:238:A:LEU:HD22	1:216:A:LEU:HA	19	0.16
(1,816)	1:238:A:LEU:HD23	1:216:A:LEU:HA	19	0.16
(1,816)	1:238:A:LEU:HD11	1:216:A:LEU:HA	27	0.16
(1,816)	1:238:A:LEU:HD12	1:216:A:LEU:HA	27	0.16
(1,816)	1:238:A:LEU:HD13	1:216:A:LEU:HA	27	0.16
(1,816)	1:238:A:LEU:HD21	1:216:A:LEU:HA	27	0.16
(1,816)	1:238:A:LEU:HD22	1:216:A:LEU:HA	27	0.16
(1,816)	1:238:A:LEU:HD23	1:216:A:LEU:HA	27	0.16
(1,816)	1:238:A:LEU:HD11	1:216:A:LEU:HA	30	0.16
(1,816)	1:238:A:LEU:HD12	1:216:A:LEU:HA	30	0.16
(1,816)	1:238:A:LEU:HD13	1:216:A:LEU:HA	30	0.16
(1,816)	1:238:A:LEU:HD21	1:216:A:LEU:HA	30	0.16
(1,816)	1:238:A:LEU:HD22	1:216:A:LEU:HA	30	0.16
(1,816)	1:238:A:LEU:HD23	1:216:A:LEU:HA	30	0.16
(1,719)	1:234:A:HIS:H	1:265:A:LEU:HD11	22	0.16
(1,719)	1:234:A:HIS:H	1:265:A:LEU:HD12	22	0.16
(1,719)	1:234:A:HIS:H	1:265:A:LEU:HD13	22	0.16
(1,673)	1:231:A:MET:H	1:221:A:GLU:H	28	0.16
(1,640)	1:230:A:LEU:HD11	1:228:A:TRP:HE3	6	0.16
(1,640)	1:230:A:LEU:HD12	1:228:A:TRP:HE3	6	0.16
(1,640)	1:230:A:LEU:HD13	1:228:A:TRP:HE3	6	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,640)	1:230:A:LEU:HD11	1:228:A:TRP:HE3	15	0.16
(1,640)	1:230:A:LEU:HD12	1:228:A:TRP:HE3	15	0.16
(1,640)	1:230:A:LEU:HD13	1:228:A:TRP:HE3	15	0.16
(1,621)	1:229:A:VAL:H	1:228:A:TRP:HB2	1	0.16
(1,621)	1:229:A:VAL:H	1:228:A:TRP:HB2	4	0.16
(1,621)	1:229:A:VAL:H	1:228:A:TRP:HB2	11	0.16
(1,621)	1:229:A:VAL:H	1:228:A:TRP:HB2	13	0.16
(1,621)	1:229:A:VAL:H	1:228:A:TRP:HB2	23	0.16
(1,600)	1:229:A:VAL:HB	1:222:A:ARG:H	9	0.16
(1,600)	1:229:A:VAL:HB	1:222:A:ARG:H	26	0.16
(1,595)	1:228:A:TRP:HH2	1:222:A:ARG:HA	1	0.16
(1,595)	1:228:A:TRP:HH2	1:222:A:ARG:HA	5	0.16
(1,595)	1:228:A:TRP:HH2	1:222:A:ARG:HA	26	0.16
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD21	7	0.16
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD22	7	0.16
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD23	7	0.16
(1,574)	1:228:A:TRP:HE3	1:221:A:GLU:HG3	6	0.16
(1,574)	1:228:A:TRP:HE3	1:221:A:GLU:HG3	9	0.16
(1,574)	1:228:A:TRP:HE3	1:221:A:GLU:HG3	11	0.16
(1,557)	1:227:A:THR:HB	1:228:A:TRP:H	1	0.16
(1,553)	1:227:A:THR:H	1:228:A:TRP:H	20	0.16
(1,473)	1:223:A:LEU:H	1:222:A:ARG:HB2	2	0.16
(1,392)	1:220:A:VAL:HB	1:234:A:HIS:HA	18	0.16
(1,335)	1:217:A:CYS:H	1:216:A:LEU:HB3	10	0.16
(1,335)	1:217:A:CYS:H	1:216:A:LEU:HB3	11	0.16
(1,335)	1:217:A:CYS:H	1:216:A:LEU:HB3	15	0.16
(1,306)	1:216:A:LEU:HD11	1:254:A:ALA:H	7	0.16
(1,306)	1:216:A:LEU:HD12	1:254:A:ALA:H	7	0.16
(1,306)	1:216:A:LEU:HD13	1:254:A:ALA:H	7	0.16
(1,306)	1:216:A:LEU:HD11	1:254:A:ALA:H	11	0.16
(1,306)	1:216:A:LEU:HD12	1:254:A:ALA:H	11	0.16
(1,306)	1:216:A:LEU:HD13	1:254:A:ALA:H	11	0.16
(1,306)	1:216:A:LEU:HD11	1:254:A:ALA:H	27	0.16
(1,306)	1:216:A:LEU:HD12	1:254:A:ALA:H	27	0.16
(1,306)	1:216:A:LEU:HD13	1:254:A:ALA:H	27	0.16
(1,254)	1:215:A:TYR:H	1:216:A:LEU:HD21	4	0.16
(1,254)	1:215:A:TYR:H	1:216:A:LEU:HD22	4	0.16
(1,254)	1:215:A:TYR:H	1:216:A:LEU:HD23	4	0.16
(1,169)	1:196:A:ASP:H	1:195:A:PRO:HB3	22	0.16
(1,106)	1:192:A:LEU:HD21	1:191:A:TYR:HB3	18	0.16
(1,106)	1:192:A:LEU:HD22	1:191:A:TYR:HB3	18	0.16
(1,106)	1:192:A:LEU:HD23	1:191:A:TYR:HB3	18	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,70)	1:191:A:TYR:HB2	1:237:A:PHE:HZ	15	0.16
(1,70)	1:191:A:TYR:HB3	1:237:A:PHE:HZ	15	0.16
(1,69)	1:191:A:TYR:H	1:237:A:PHE:HZ	1	0.16
(1,68)	1:191:A:TYR:H	1:192:A:LEU:H	25	0.16
(3,59)	1:332:A:GLN:H	1:305:A:LEU:O	11	0.15
(3,59)	1:332:A:GLN:H	1:305:A:LEU:O	30	0.15
(3,56)	1:326:A:LEU:H	1:322:A:ALA:O	6	0.15
(3,56)	1:326:A:LEU:H	1:322:A:ALA:O	7	0.15
(3,37)	1:280:A:SER:H	1:215:A:TYR:O	2	0.15
(3,37)	1:280:A:SER:H	1:215:A:TYR:O	3	0.15
(3,37)	1:280:A:SER:H	1:215:A:TYR:O	6	0.15
(3,37)	1:280:A:SER:H	1:215:A:TYR:O	16	0.15
(3,37)	1:280:A:SER:H	1:215:A:TYR:O	26	0.15
(3,33)	1:276:A:THR:H	1:219:A:GLU:O	20	0.15
(3,28)	1:265:A:LEU:H	1:262:A:VAL:O	27	0.15
(3,26)	1:261:A:LEU:H	1:257:A:ARG:O	19	0.15
(3,24)	1:259:A:LEU:H	1:255:A:GLU:O	5	0.15
(3,22)	1:257:A:ARG:H	1:253:A:HIS:O	26	0.15
(3,17)	1:231:A:MET:H	1:220:A:VAL:O	13	0.15
(1,3070)	1:255:A:GLU:H	1:255:A:GLU:OE1	9	0.15
(1,3070)	1:255:A:GLU:H	1:255:A:GLU:OE1	26	0.15
(1,3040)	1:379:A:ASN:HD22	1:379:A:ASN:HB2	20	0.15
(1,2975)	1:375:A:ALA:H	1:374:A:ARG:HD3	25	0.15
(1,2888)	1:368:A:ALA:H	1:367:A:GLN:HB2	17	0.15
(1,2858)	1:367:A:GLN:HE22	1:366:A:SER:H	12	0.15
(1,2788)	1:361:A:GLY:H	1:360:A:ASP:HA	14	0.15
(1,2788)	1:361:A:GLY:H	1:360:A:ASP:HA	22	0.15
(1,2788)	1:361:A:GLY:H	1:360:A:ASP:HA	24	0.15
(1,2788)	1:361:A:GLY:H	1:360:A:ASP:HA	29	0.15
(1,2759)	1:359:A:TRP:HD1	1:362:A:LEU:HA	10	0.15
(1,2759)	1:359:A:TRP:HD1	1:362:A:LEU:HA	13	0.15
(1,2758)	1:359:A:TRP:HE3	1:360:A:ASP:H	8	0.15
(1,2758)	1:359:A:TRP:HE3	1:360:A:ASP:H	26	0.15
(1,2713)	1:356:A:PHE:HB2	1:357:A:GLN:H	7	0.15
(1,2713)	1:356:A:PHE:HB2	1:357:A:GLN:H	16	0.15
(1,2466)	1:340:A:GLU:H	1:340:A:GLU:HB3	23	0.15
(1,2466)	1:340:A:GLU:H	1:340:A:GLU:HB3	26	0.15
(1,2364)	1:333:A:VAL:HB	1:308:A:PHE:HA	16	0.15
(1,2364)	1:333:A:VAL:HB	1:308:A:PHE:HA	21	0.15
(1,2364)	1:333:A:VAL:HB	1:308:A:PHE:HA	30	0.15
(1,2334)	1:333:A:VAL:H	1:327:A:ARG:HG2	4	0.15
(1,2332)	1:333:A:VAL:HG11	1:308:A:PHE:H	12	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2332)	1:333:A:VAL:HG12	1:308:A:PHE:H	12	0.15
(1,2332)	1:333:A:VAL:HG13	1:308:A:PHE:H	12	0.15
(1,2332)	1:333:A:VAL:HG11	1:308:A:PHE:H	15	0.15
(1,2332)	1:333:A:VAL:HG12	1:308:A:PHE:H	15	0.15
(1,2332)	1:333:A:VAL:HG13	1:308:A:PHE:H	15	0.15
(1,2332)	1:333:A:VAL:HG11	1:308:A:PHE:H	17	0.15
(1,2332)	1:333:A:VAL:HG12	1:308:A:PHE:H	17	0.15
(1,2332)	1:333:A:VAL:HG13	1:308:A:PHE:H	17	0.15
(1,2332)	1:333:A:VAL:HG11	1:308:A:PHE:H	21	0.15
(1,2332)	1:333:A:VAL:HG12	1:308:A:PHE:H	21	0.15
(1,2332)	1:333:A:VAL:HG13	1:308:A:PHE:H	21	0.15
(1,2284)	1:329:A:ALA:H	1:326:A:LEU:HG	1	0.15
(1,2284)	1:329:A:ALA:H	1:326:A:LEU:HG	5	0.15
(1,2284)	1:329:A:ALA:H	1:326:A:LEU:HG	9	0.15
(1,2284)	1:329:A:ALA:H	1:326:A:LEU:HG	20	0.15
(1,2159)	1:320:A:LYS:HD2	1:320:A:LYS:HA	7	0.15
(1,2115)	1:313:A:TYR:HE1	1:315:A:TYR:H	21	0.15
(1,2115)	1:313:A:TYR:HE2	1:315:A:TYR:H	21	0.15
(1,2023)	1:307:A:ILE:HB	1:308:A:PHE:HA	29	0.15
(1,1981)	1:305:A:LEU:HD11	1:275:A:VAL:HB	7	0.15
(1,1981)	1:305:A:LEU:HD12	1:275:A:VAL:HB	7	0.15
(1,1981)	1:305:A:LEU:HD13	1:275:A:VAL:HB	7	0.15
(1,1970)	1:305:A:LEU:HD21	1:258:A:PHE:HZ	19	0.15
(1,1970)	1:305:A:LEU:HD22	1:258:A:PHE:HZ	19	0.15
(1,1970)	1:305:A:LEU:HD23	1:258:A:PHE:HZ	19	0.15
(1,1946)	1:305:A:LEU:HD11	1:306:A:ARG:HA	17	0.15
(1,1946)	1:305:A:LEU:HD12	1:306:A:ARG:HA	17	0.15
(1,1946)	1:305:A:LEU:HD13	1:306:A:ARG:HA	17	0.15
(1,1937)	1:304:A:ARG:H	1:303:A:VAL:HB	5	0.15
(1,1937)	1:304:A:ARG:H	1:303:A:VAL:HB	25	0.15
(1,1937)	1:304:A:ARG:H	1:303:A:VAL:HB	29	0.15
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD21	5	0.15
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD22	5	0.15
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD23	5	0.15
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD21	5	0.15
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD22	5	0.15
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD23	5	0.15
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD21	5	0.15
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD22	5	0.15
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD23	5	0.15
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD21	18	0.15
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD22	18	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD23	18	0.15
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD21	18	0.15
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD22	18	0.15
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD23	18	0.15
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD21	18	0.15
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD22	18	0.15
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD23	18	0.15
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG21	1:262:A:VAL:HG11	28	0.15
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG21	1:262:A:VAL:HG12	28	0.15
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG21	1:262:A:VAL:HG13	28	0.15
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG22	1:262:A:VAL:HG11	28	0.15
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG22	1:262:A:VAL:HG12	28	0.15
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG22	1:262:A:VAL:HG13	28	0.15
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG23	1:262:A:VAL:HG11	28	0.15
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG23	1:262:A:VAL:HG12	28	0.15
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG23	1:262:A:VAL:HG13	28	0.15
(1,1895)	1:303:A:VAL:HB	1:296:A:PHE:HE1	3	0.15
(1,1895)	1:303:A:VAL:HB	1:296:A:PHE:HE2	3	0.15
(1,1895)	1:303:A:VAL:HB	1:296:A:PHE:HE1	5	0.15
(1,1895)	1:303:A:VAL:HB	1:296:A:PHE:HE2	5	0.15
(1,1895)	1:303:A:VAL:HB	1:296:A:PHE:HE1	8	0.15
(1,1895)	1:303:A:VAL:HB	1:296:A:PHE:HE2	8	0.15
(1,1876)	1:302:A:HIS:HD2	1:303:A:VAL:HB	18	0.15
(1,1876)	1:302:A:HIS:HD2	1:303:A:VAL:HB	29	0.15
(1,1829)	1:299:A:GLU:HG3	1:300:A:ASN:H	1	0.15
(1,1829)	1:299:A:GLU:HG3	1:300:A:ASN:H	18	0.15
(1,1797)	1:298:A:GLN:HE21	1:299:A:GLU:HB3	1	0.15
(1,1797)	1:298:A:GLN:HE21	1:299:A:GLU:HB3	13	0.15
(1,1797)	1:298:A:GLN:HE21	1:299:A:GLU:HB3	22	0.15
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE1	1:275:A:VAL:HG21	30	0.15
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE1	1:275:A:VAL:HG22	30	0.15
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE1	1:275:A:VAL:HG23	30	0.15
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE2	1:275:A:VAL:HG21	30	0.15
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE2	1:275:A:VAL:HG22	30	0.15
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE2	1:275:A:VAL:HG23	30	0.15
(1,1677)	1:290:A:ALA:H	1:293:A:VAL:H	11	0.15
(1,1646)	1:286:A:SER:H	1:289:A:CYS:HA	17	0.15
(1,1646)	1:286:A:SER:H	1:289:A:CYS:HA	21	0.15
(1,1646)	1:286:A:SER:H	1:289:A:CYS:HA	27	0.15
(1,1641)	1:285:A:PHE:HE1	1:286:A:SER:HA	18	0.15
(1,1641)	1:285:A:PHE:HE2	1:286:A:SER:HA	18	0.15
(1,1617)	1:282:A:SER:H	1:309:A:ALA:HA	25	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1578)	1:279:A:ILE:HB	1:309:A:ALA:HA	5	0.15
(1,1562)	1:279:A:ILE:HG13	1:309:A:ALA:HA	4	0.15
(1,1562)	1:279:A:ILE:HG13	1:309:A:ALA:HA	9	0.15
(1,1560)	1:279:A:ILE:HG12	1:309:A:ALA:HA	8	0.15
(1,1560)	1:279:A:ILE:HG12	1:309:A:ALA:HA	17	0.15
(1,1545)	1:278:A:PHE:H	1:216:A:LEU:HD21	9	0.15
(1,1545)	1:278:A:PHE:H	1:216:A:LEU:HD22	9	0.15
(1,1545)	1:278:A:PHE:H	1:216:A:LEU:HD23	9	0.15
(1,1523)	1:277:A:TRP:HZ2	1:238:A:LEU:HD21	22	0.15
(1,1523)	1:277:A:TRP:HZ2	1:238:A:LEU:HD22	22	0.15
(1,1523)	1:277:A:TRP:HZ2	1:238:A:LEU:HD23	22	0.15
(1,1523)	1:277:A:TRP:HZ2	1:238:A:LEU:HD21	26	0.15
(1,1523)	1:277:A:TRP:HZ2	1:238:A:LEU:HD22	26	0.15
(1,1523)	1:277:A:TRP:HZ2	1:238:A:LEU:HD23	26	0.15
(1,1486)	1:276:A:THR:HG21	1:308:A:PHE:H	15	0.15
(1,1486)	1:276:A:THR:HG22	1:308:A:PHE:H	15	0.15
(1,1486)	1:276:A:THR:HG23	1:308:A:PHE:H	15	0.15
(1,1486)	1:276:A:THR:HG21	1:308:A:PHE:H	29	0.15
(1,1486)	1:276:A:THR:HG22	1:308:A:PHE:H	29	0.15
(1,1486)	1:276:A:THR:HG23	1:308:A:PHE:H	29	0.15
(1,1394)	1:273:A:TYR:HB2	1:220:A:VAL:HG21	26	0.15
(1,1394)	1:273:A:TYR:HB2	1:220:A:VAL:HG22	26	0.15
(1,1394)	1:273:A:TYR:HB2	1:220:A:VAL:HG23	26	0.15
(1,1380)	1:273:A:TYR:HA	1:223:A:LEU:HD21	1	0.15
(1,1380)	1:273:A:TYR:HA	1:223:A:LEU:HD22	1	0.15
(1,1380)	1:273:A:TYR:HA	1:223:A:LEU:HD23	1	0.15
(1,1380)	1:273:A:TYR:HA	1:223:A:LEU:HD21	5	0.15
(1,1380)	1:273:A:TYR:HA	1:223:A:LEU:HD22	5	0.15
(1,1380)	1:273:A:TYR:HA	1:223:A:LEU:HD23	5	0.15
(1,1380)	1:273:A:TYR:HA	1:223:A:LEU:HD21	11	0.15
(1,1380)	1:273:A:TYR:HA	1:223:A:LEU:HD22	11	0.15
(1,1380)	1:273:A:TYR:HA	1:223:A:LEU:HD23	11	0.15
(1,1332)	1:271:A:GLN:HA	1:271:A:GLN:HG2	28	0.15
(1,1260)	1:267:A:LEU:H	1:266:A:GLN:HB3	1	0.15
(1,1260)	1:267:A:LEU:H	1:266:A:GLN:HB3	21	0.15
(1,1229)	1:266:A:GLN:HB3	1:266:A:GLN:H	10	0.15
(1,1229)	1:266:A:GLN:HB3	1:266:A:GLN:H	20	0.15
(1,1229)	1:266:A:GLN:HB3	1:266:A:GLN:H	24	0.15
(1,1226)	1:266:A:GLN:H	1:265:A:LEU:HD21	6	0.15
(1,1226)	1:266:A:GLN:H	1:265:A:LEU:HD22	6	0.15
(1,1226)	1:266:A:GLN:H	1:265:A:LEU:HD23	6	0.15
(1,1173)	1:262:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HG	24	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1173)	1:262:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HG	24	0.15
(1,1173)	1:262:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HG	24	0.15
(1,1170)	1:262:A:VAL:H	1:261:A:LEU:HB2	3	0.15
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD21	3	0.15
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD22	3	0.15
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD23	3	0.15
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD21	3	0.15
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD22	3	0.15
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD23	3	0.15
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD21	3	0.15
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD22	3	0.15
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD23	3	0.15
(1,1155)	1:262:A:VAL:HA	1:265:A:LEU:HB3	8	0.15
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG11	1:265:A:LEU:HD21	7	0.15
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG11	1:265:A:LEU:HD22	7	0.15
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG11	1:265:A:LEU:HD23	7	0.15
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG12	1:265:A:LEU:HD21	7	0.15
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG12	1:265:A:LEU:HD22	7	0.15
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG12	1:265:A:LEU:HD23	7	0.15
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG13	1:265:A:LEU:HD21	7	0.15
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG13	1:265:A:LEU:HD22	7	0.15
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG13	1:265:A:LEU:HD23	7	0.15
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG11	1:265:A:LEU:HD21	10	0.15
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG11	1:265:A:LEU:HD22	10	0.15
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG11	1:265:A:LEU:HD23	10	0.15
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG12	1:265:A:LEU:HD21	10	0.15
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG12	1:265:A:LEU:HD22	10	0.15
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG12	1:265:A:LEU:HD23	10	0.15
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG13	1:265:A:LEU:HD21	10	0.15
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG13	1:265:A:LEU:HD22	10	0.15
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG13	1:265:A:LEU:HD23	10	0.15
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG11	1:265:A:LEU:HD21	14	0.15
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG11	1:265:A:LEU:HD22	14	0.15
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG11	1:265:A:LEU:HD23	14	0.15
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG12	1:265:A:LEU:HD21	14	0.15
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG12	1:265:A:LEU:HD22	14	0.15
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG12	1:265:A:LEU:HD23	14	0.15
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG13	1:265:A:LEU:HD21	14	0.15
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG13	1:265:A:LEU:HD22	14	0.15
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG13	1:265:A:LEU:HD23	14	0.15
(1,1141)	1:262:A:VAL:HG11	1:265:A:LEU:HG	24	0.15
(1,1141)	1:262:A:VAL:HG12	1:265:A:LEU:HG	24	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1141)	1:262:A:VAL:HG13	1:265:A:LEU:HG	24	0.15
(1,1140)	1:262:A:VAL:HG21	1:262:A:VAL:H	4	0.15
(1,1140)	1:262:A:VAL:HG22	1:262:A:VAL:H	4	0.15
(1,1140)	1:262:A:VAL:HG23	1:262:A:VAL:H	4	0.15
(1,1140)	1:262:A:VAL:HG21	1:262:A:VAL:H	22	0.15
(1,1140)	1:262:A:VAL:HG22	1:262:A:VAL:H	22	0.15
(1,1140)	1:262:A:VAL:HG23	1:262:A:VAL:H	22	0.15
(1,1117)	1:261:A:LEU:HD11	1:262:A:VAL:H	4	0.15
(1,1117)	1:261:A:LEU:HD12	1:262:A:VAL:H	4	0.15
(1,1117)	1:261:A:LEU:HD13	1:262:A:VAL:H	4	0.15
(1,1101)	1:261:A:LEU:HD21	1:238:A:LEU:HB2	9	0.15
(1,1101)	1:261:A:LEU:HD22	1:238:A:LEU:HB2	9	0.15
(1,1101)	1:261:A:LEU:HD23	1:238:A:LEU:HB2	9	0.15
(1,1101)	1:261:A:LEU:HD21	1:238:A:LEU:HB2	28	0.15
(1,1101)	1:261:A:LEU:HD22	1:238:A:LEU:HB2	28	0.15
(1,1101)	1:261:A:LEU:HD23	1:238:A:LEU:HB2	28	0.15
(1,1088)	1:261:A:LEU:HD11	1:258:A:PHE:HZ	19	0.15
(1,1088)	1:261:A:LEU:HD12	1:258:A:PHE:HZ	19	0.15
(1,1088)	1:261:A:LEU:HD13	1:258:A:PHE:HZ	19	0.15
(1,1082)	1:260:A:ASP:HA	1:262:A:VAL:H	11	0.15
(1,1052)	1:259:A:LEU:HD21	1:259:A:LEU:H	5	0.15
(1,1052)	1:259:A:LEU:HD22	1:259:A:LEU:H	5	0.15
(1,1052)	1:259:A:LEU:HD23	1:259:A:LEU:H	5	0.15
(1,1001)	1:258:A:PHE:HZ	1:259:A:LEU:HD11	20	0.15
(1,1001)	1:258:A:PHE:HZ	1:259:A:LEU:HD12	20	0.15
(1,1001)	1:258:A:PHE:HZ	1:259:A:LEU:HD13	20	0.15
(1,954)	1:256:A:LEU:HD11	1:259:A:LEU:H	28	0.15
(1,954)	1:256:A:LEU:HD12	1:259:A:LEU:H	28	0.15
(1,954)	1:256:A:LEU:HD13	1:259:A:LEU:H	28	0.15
(1,869)	1:245:A:LEU:HD11	1:246:A:LEU:HA	14	0.15
(1,869)	1:245:A:LEU:HD12	1:246:A:LEU:HA	14	0.15
(1,869)	1:245:A:LEU:HD13	1:246:A:LEU:HA	14	0.15
(1,837)	1:241:A:GLU:H	1:252:A:ARG:HB2	2	0.15
(1,835)	1:241:A:GLU:H	1:240:A:ASN:HB2	18	0.15
(1,816)	1:238:A:LEU:HD11	1:216:A:LEU:HA	20	0.15
(1,816)	1:238:A:LEU:HD12	1:216:A:LEU:HA	20	0.15
(1,816)	1:238:A:LEU:HD13	1:216:A:LEU:HA	20	0.15
(1,816)	1:238:A:LEU:HD21	1:216:A:LEU:HA	20	0.15
(1,816)	1:238:A:LEU:HD22	1:216:A:LEU:HA	20	0.15
(1,816)	1:238:A:LEU:HD23	1:216:A:LEU:HA	20	0.15
(1,621)	1:229:A:VAL:H	1:228:A:TRP:HB2	5	0.15
(1,621)	1:229:A:VAL:H	1:228:A:TRP:HB2	6	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,621)	1:229:A:VAL:H	1:228:A:TRP:HB2	9	0.15
(1,621)	1:229:A:VAL:H	1:228:A:TRP:HB2	10	0.15
(1,621)	1:229:A:VAL:H	1:228:A:TRP:HB2	14	0.15
(1,621)	1:229:A:VAL:H	1:228:A:TRP:HB2	17	0.15
(1,621)	1:229:A:VAL:H	1:228:A:TRP:HB2	19	0.15
(1,621)	1:229:A:VAL:H	1:228:A:TRP:HB2	20	0.15
(1,621)	1:229:A:VAL:H	1:228:A:TRP:HB2	21	0.15
(1,621)	1:229:A:VAL:H	1:228:A:TRP:HB2	26	0.15
(1,600)	1:229:A:VAL:HB	1:222:A:ARG:H	1	0.15
(1,600)	1:229:A:VAL:HB	1:222:A:ARG:H	10	0.15
(1,600)	1:229:A:VAL:HB	1:222:A:ARG:H	14	0.15
(1,600)	1:229:A:VAL:HB	1:222:A:ARG:H	15	0.15
(1,600)	1:229:A:VAL:HB	1:222:A:ARG:H	19	0.15
(1,595)	1:228:A:TRP:HH2	1:222:A:ARG:HA	4	0.15
(1,595)	1:228:A:TRP:HH2	1:222:A:ARG:HA	8	0.15
(1,595)	1:228:A:TRP:HH2	1:222:A:ARG:HA	11	0.15
(1,595)	1:228:A:TRP:HH2	1:222:A:ARG:HA	16	0.15
(1,595)	1:228:A:TRP:HH2	1:222:A:ARG:HA	20	0.15
(1,595)	1:228:A:TRP:HH2	1:222:A:ARG:HA	21	0.15
(1,595)	1:228:A:TRP:HH2	1:222:A:ARG:HA	23	0.15
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD21	24	0.15
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD22	24	0.15
(1,580)	1:228:A:TRP:HA	1:223:A:LEU:HD23	24	0.15
(1,574)	1:228:A:TRP:HE3	1:221:A:GLU:HG3	16	0.15
(1,574)	1:228:A:TRP:HE3	1:221:A:GLU:HG3	27	0.15
(1,557)	1:227:A:THR:HB	1:228:A:TRP:H	2	0.15
(1,557)	1:227:A:THR:HB	1:228:A:TRP:H	3	0.15
(1,557)	1:227:A:THR:HB	1:228:A:TRP:H	4	0.15
(1,557)	1:227:A:THR:HB	1:228:A:TRP:H	21	0.15
(1,557)	1:227:A:THR:HB	1:228:A:TRP:H	23	0.15
(1,557)	1:227:A:THR:HB	1:228:A:TRP:H	27	0.15
(1,392)	1:220:A:VAL:HB	1:234:A:HIS:HA	24	0.15
(1,381)	1:219:A:GLU:H	1:275:A:VAL:HG11	7	0.15
(1,381)	1:219:A:GLU:H	1:275:A:VAL:HG12	7	0.15
(1,381)	1:219:A:GLU:H	1:275:A:VAL:HG13	7	0.15
(1,337)	1:217:A:CYS:HB2	1:237:A:PHE:HA	14	0.15
(1,335)	1:217:A:CYS:H	1:216:A:LEU:HB3	2	0.15
(1,306)	1:216:A:LEU:HD11	1:254:A:ALA:H	21	0.15
(1,306)	1:216:A:LEU:HD12	1:254:A:ALA:H	21	0.15
(1,306)	1:216:A:LEU:HD13	1:254:A:ALA:H	21	0.15
(1,288)	1:216:A:LEU:HD21	1:277:A:TRP:HB2	24	0.15
(1,288)	1:216:A:LEU:HD22	1:277:A:TRP:HB2	24	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,288)	1:216:A:LEU:HD23	1:277:A:TRP:HB2	24	0.15
(1,283)	1:216:A:LEU:HD11	1:258:A:PHE:HA	4	0.15
(1,283)	1:216:A:LEU:HD12	1:258:A:PHE:HA	4	0.15
(1,283)	1:216:A:LEU:HD13	1:258:A:PHE:HA	4	0.15
(1,278)	1:216:A:LEU:HD11	1:258:A:PHE:HB3	6	0.15
(1,278)	1:216:A:LEU:HD12	1:258:A:PHE:HB3	6	0.15
(1,278)	1:216:A:LEU:HD13	1:258:A:PHE:HB3	6	0.15
(1,278)	1:216:A:LEU:HD11	1:258:A:PHE:HB3	12	0.15
(1,278)	1:216:A:LEU:HD12	1:258:A:PHE:HB3	12	0.15
(1,278)	1:216:A:LEU:HD13	1:258:A:PHE:HB3	12	0.15
(1,278)	1:216:A:LEU:HD11	1:258:A:PHE:HB3	14	0.15
(1,278)	1:216:A:LEU:HD12	1:258:A:PHE:HB3	14	0.15
(1,278)	1:216:A:LEU:HD13	1:258:A:PHE:HB3	14	0.15
(1,145)	1:194:A:ASP:HB3	1:193:A:MET:HA	9	0.15
(1,143)	1:194:A:ASP:HB2	1:193:A:MET:HA	23	0.15
(1,78)	1:191:A:TYR:H	1:190:A:ARG:HG2	10	0.15
(3,120)	1:280:A:SER:N	1:215:A:TYR:O	19	0.14
(3,111)	1:265:A:LEU:N	1:262:A:VAL:O	30	0.14
(3,73)	1:367:A:GLN:H	1:363:A:GLU:O	19	0.14
(3,60)	1:334:A:SER:H	1:307:A:ILE:O	11	0.14
(3,59)	1:332:A:GLN:H	1:305:A:LEU:O	1	0.14
(3,59)	1:332:A:GLN:H	1:305:A:LEU:O	5	0.14
(3,59)	1:332:A:GLN:H	1:305:A:LEU:O	8	0.14
(3,59)	1:332:A:GLN:H	1:305:A:LEU:O	12	0.14
(3,59)	1:332:A:GLN:H	1:305:A:LEU:O	27	0.14
(3,50)	1:309:A:ALA:H	1:334:A:SER:O	19	0.14
(3,37)	1:280:A:SER:H	1:215:A:TYR:O	18	0.14
(3,37)	1:280:A:SER:H	1:215:A:TYR:O	20	0.14
(3,37)	1:280:A:SER:H	1:215:A:TYR:O	23	0.14
(3,33)	1:276:A:THR:H	1:219:A:GLU:O	11	0.14
(3,33)	1:276:A:THR:H	1:219:A:GLU:O	22	0.14
(3,28)	1:265:A:LEU:H	1:262:A:VAL:O	16	0.14
(3,26)	1:261:A:LEU:H	1:257:A:ARG:O	4	0.14
(3,24)	1:259:A:LEU:H	1:255:A:GLU:O	23	0.14
(3,22)	1:257:A:ARG:H	1:253:A:HIS:O	21	0.14
(3,16)	1:229:A:VAL:H	1:222:A:ARG:O	18	0.14
(3,12)	1:222:A:ARG:H	1:229:A:VAL:O	13	0.14
(3,10)	1:219:A:GLU:H	1:276:A:THR:O	6	0.14
(1,3029)	1:378:A:GLN:H	1:377:A:LEU:HA	29	0.14
(1,2824)	1:363:A:GLU:HB3	1:362:A:LEU:HD11	26	0.14
(1,2824)	1:363:A:GLU:HB3	1:362:A:LEU:HD12	26	0.14
(1,2824)	1:363:A:GLU:HB3	1:362:A:LEU:HD13	26	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2759)	1:359:A:TRP:HD1	1:362:A:LEU:HA	20	0.14
(1,2758)	1:359:A:TRP:HE3	1:360:A:ASP:H	4	0.14
(1,2758)	1:359:A:TRP:HE3	1:360:A:ASP:H	13	0.14
(1,2684)	1:354:A:CYS:H	1:352:A:GLN:HA	7	0.14
(1,2496)	1:342:A:GLU:HB2	1:343:A:TYR:H	30	0.14
(1,2466)	1:340:A:GLU:H	1:340:A:GLU:HB3	29	0.14
(1,2388)	1:335:A:ILE:H	1:335:A:ILE:HD11	3	0.14
(1,2388)	1:335:A:ILE:H	1:335:A:ILE:HD12	3	0.14
(1,2388)	1:335:A:ILE:H	1:335:A:ILE:HD13	3	0.14
(1,2370)	1:333:A:VAL:H	1:332:A:GLN:HB3	3	0.14
(1,2332)	1:333:A:VAL:HG11	1:308:A:PHE:H	1	0.14
(1,2332)	1:333:A:VAL:HG12	1:308:A:PHE:H	1	0.14
(1,2332)	1:333:A:VAL:HG13	1:308:A:PHE:H	1	0.14
(1,2332)	1:333:A:VAL:HG11	1:308:A:PHE:H	8	0.14
(1,2332)	1:333:A:VAL:HG12	1:308:A:PHE:H	8	0.14
(1,2332)	1:333:A:VAL:HG13	1:308:A:PHE:H	8	0.14
(1,2332)	1:333:A:VAL:HG11	1:308:A:PHE:H	11	0.14
(1,2332)	1:333:A:VAL:HG12	1:308:A:PHE:H	11	0.14
(1,2332)	1:333:A:VAL:HG13	1:308:A:PHE:H	11	0.14
(1,2332)	1:333:A:VAL:HG11	1:308:A:PHE:H	16	0.14
(1,2332)	1:333:A:VAL:HG12	1:308:A:PHE:H	16	0.14
(1,2332)	1:333:A:VAL:HG13	1:308:A:PHE:H	16	0.14
(1,2284)	1:329:A:ALA:H	1:326:A:LEU:HG	4	0.14
(1,2284)	1:329:A:ALA:H	1:326:A:LEU:HG	30	0.14
(1,2164)	1:320:A:LYS:HD3	1:320:A:LYS:HA	30	0.14
(1,2023)	1:307:A:ILE:HB	1:308:A:PHE:HA	12	0.14
(1,2023)	1:307:A:ILE:HB	1:308:A:PHE:HA	20	0.14
(1,2023)	1:307:A:ILE:HB	1:308:A:PHE:HA	22	0.14
(1,1981)	1:305:A:LEU:HD11	1:275:A:VAL:HB	4	0.14
(1,1981)	1:305:A:LEU:HD12	1:275:A:VAL:HB	4	0.14
(1,1981)	1:305:A:LEU:HD13	1:275:A:VAL:HB	4	0.14
(1,1981)	1:305:A:LEU:HD11	1:275:A:VAL:HB	18	0.14
(1,1981)	1:305:A:LEU:HD12	1:275:A:VAL:HB	18	0.14
(1,1981)	1:305:A:LEU:HD13	1:275:A:VAL:HB	18	0.14
(1,1946)	1:305:A:LEU:HD11	1:306:A:ARG:HA	1	0.14
(1,1946)	1:305:A:LEU:HD12	1:306:A:ARG:HA	1	0.14
(1,1946)	1:305:A:LEU:HD13	1:306:A:ARG:HA	1	0.14
(1,1946)	1:305:A:LEU:HD11	1:306:A:ARG:HA	8	0.14
(1,1946)	1:305:A:LEU:HD12	1:306:A:ARG:HA	8	0.14
(1,1946)	1:305:A:LEU:HD13	1:306:A:ARG:HA	8	0.14
(1,1937)	1:304:A:ARG:H	1:303:A:VAL:HB	3	0.14
(1,1937)	1:304:A:ARG:H	1:303:A:VAL:HB	17	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1937)	1:304:A:ARG:H	1:303:A:VAL:HB	20	0.14
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD21	3	0.14
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD22	3	0.14
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD23	3	0.14
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD21	3	0.14
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD22	3	0.14
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD23	3	0.14
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD21	3	0.14
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD22	3	0.14
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD23	3	0.14
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD21	17	0.14
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD22	17	0.14
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD23	17	0.14
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD21	17	0.14
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD22	17	0.14
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD23	17	0.14
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD21	17	0.14
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD22	17	0.14
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD23	17	0.14
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD21	22	0.14
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD22	22	0.14
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD23	22	0.14
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD21	22	0.14
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD22	22	0.14
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD23	22	0.14
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD21	22	0.14
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD22	22	0.14
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD23	22	0.14
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG21	1:262:A:VAL:HG11	25	0.14
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG21	1:262:A:VAL:HG12	25	0.14
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG21	1:262:A:VAL:HG13	25	0.14
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG22	1:262:A:VAL:HG11	25	0.14
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG22	1:262:A:VAL:HG12	25	0.14
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG22	1:262:A:VAL:HG13	25	0.14
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG23	1:262:A:VAL:HG11	25	0.14
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG23	1:262:A:VAL:HG12	25	0.14
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG23	1:262:A:VAL:HG13	25	0.14
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG21	1:262:A:VAL:HG11	29	0.14
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG21	1:262:A:VAL:HG12	29	0.14
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG21	1:262:A:VAL:HG13	29	0.14
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG22	1:262:A:VAL:HG11	29	0.14
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG22	1:262:A:VAL:HG12	29	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG22	1:262:A:VAL:HG13	29	0.14
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG23	1:262:A:VAL:HG11	29	0.14
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG23	1:262:A:VAL:HG12	29	0.14
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG23	1:262:A:VAL:HG13	29	0.14
(1,1895)	1:303:A:VAL:HB	1:296:A:PHE:HE1	11	0.14
(1,1895)	1:303:A:VAL:HB	1:296:A:PHE:HE2	11	0.14
(1,1895)	1:303:A:VAL:HB	1:296:A:PHE:HE1	19	0.14
(1,1895)	1:303:A:VAL:HB	1:296:A:PHE:HE2	19	0.14
(1,1876)	1:302:A:HIS:HD2	1:303:A:VAL:HB	7	0.14
(1,1876)	1:302:A:HIS:HD2	1:303:A:VAL:HB	9	0.14
(1,1876)	1:302:A:HIS:HD2	1:303:A:VAL:HB	21	0.14
(1,1867)	1:302:A:HIS:HD2	1:300:A:ASN:HA	9	0.14
(1,1834)	1:299:A:GLU:HG2	1:296:A:PHE:HD1	3	0.14
(1,1834)	1:299:A:GLU:HG2	1:296:A:PHE:HD2	3	0.14
(1,1834)	1:299:A:GLU:HG2	1:296:A:PHE:HD1	7	0.14
(1,1834)	1:299:A:GLU:HG2	1:296:A:PHE:HD2	7	0.14
(1,1829)	1:299:A:GLU:HG3	1:300:A:ASN:H	6	0.14
(1,1829)	1:299:A:GLU:HG3	1:300:A:ASN:H	12	0.14
(1,1829)	1:299:A:GLU:HG3	1:300:A:ASN:H	16	0.14
(1,1829)	1:299:A:GLU:HG3	1:300:A:ASN:H	22	0.14
(1,1797)	1:298:A:GLN:HE21	1:299:A:GLU:HB3	24	0.14
(1,1768)	1:296:A:PHE:HE1	1:259:A:LEU:HD21	2	0.14
(1,1768)	1:296:A:PHE:HE1	1:259:A:LEU:HD22	2	0.14
(1,1768)	1:296:A:PHE:HE1	1:259:A:LEU:HD23	2	0.14
(1,1768)	1:296:A:PHE:HE2	1:259:A:LEU:HD21	2	0.14
(1,1768)	1:296:A:PHE:HE2	1:259:A:LEU:HD22	2	0.14
(1,1768)	1:296:A:PHE:HE2	1:259:A:LEU:HD23	2	0.14
(1,1768)	1:296:A:PHE:HE1	1:259:A:LEU:HD21	21	0.14
(1,1768)	1:296:A:PHE:HE1	1:259:A:LEU:HD22	21	0.14
(1,1768)	1:296:A:PHE:HE1	1:259:A:LEU:HD23	21	0.14
(1,1768)	1:296:A:PHE:HE2	1:259:A:LEU:HD21	21	0.14
(1,1768)	1:296:A:PHE:HE2	1:259:A:LEU:HD22	21	0.14
(1,1768)	1:296:A:PHE:HE2	1:259:A:LEU:HD23	21	0.14
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE1	1:275:A:VAL:HG21	11	0.14
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE1	1:275:A:VAL:HG22	11	0.14
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE1	1:275:A:VAL:HG23	11	0.14
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE2	1:275:A:VAL:HG21	11	0.14
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE2	1:275:A:VAL:HG22	11	0.14
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE2	1:275:A:VAL:HG23	11	0.14
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE1	1:275:A:VAL:HG21	28	0.14
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE1	1:275:A:VAL:HG22	28	0.14
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE1	1:275:A:VAL:HG23	28	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE2	1:275:A:VAL:HG21	28	0.14
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE2	1:275:A:VAL:HG22	28	0.14
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE2	1:275:A:VAL:HG23	28	0.14
(1,1738)	1:296:A:PHE:HE1	1:263:A:PRO:HD2	26	0.14
(1,1738)	1:296:A:PHE:HE1	1:263:A:PRO:HD3	26	0.14
(1,1738)	1:296:A:PHE:HE2	1:263:A:PRO:HD2	26	0.14
(1,1738)	1:296:A:PHE:HE2	1:263:A:PRO:HD3	26	0.14
(1,1646)	1:286:A:SER:H	1:289:A:CYS:HA	2	0.14
(1,1641)	1:285:A:PHE:HE1	1:286:A:SER:HA	1	0.14
(1,1641)	1:285:A:PHE:HE2	1:286:A:SER:HA	1	0.14
(1,1641)	1:285:A:PHE:HE1	1:286:A:SER:HA	15	0.14
(1,1641)	1:285:A:PHE:HE2	1:286:A:SER:HA	15	0.14
(1,1617)	1:282:A:SER:H	1:309:A:ALA:HA	24	0.14
(1,1609)	1:281:A:TRP:HE3	1:314:A:ASP:H	21	0.14
(1,1603)	1:281:A:TRP:HE3	1:281:A:TRP:HB2	2	0.14
(1,1603)	1:281:A:TRP:HE3	1:281:A:TRP:HB2	5	0.14
(1,1603)	1:281:A:TRP:HE3	1:281:A:TRP:HB2	12	0.14
(1,1603)	1:281:A:TRP:HE3	1:281:A:TRP:HB2	16	0.14
(1,1603)	1:281:A:TRP:HE3	1:281:A:TRP:HB2	18	0.14
(1,1603)	1:281:A:TRP:HE3	1:281:A:TRP:HB2	19	0.14
(1,1603)	1:281:A:TRP:HE3	1:281:A:TRP:HB2	21	0.14
(1,1603)	1:281:A:TRP:HE3	1:281:A:TRP:HB2	25	0.14
(1,1603)	1:281:A:TRP:HE3	1:281:A:TRP:HB2	28	0.14
(1,1578)	1:279:A:ILE:HB	1:309:A:ALA:HA	16	0.14
(1,1578)	1:279:A:ILE:HB	1:309:A:ALA:HA	18	0.14
(1,1578)	1:279:A:ILE:HB	1:309:A:ALA:HA	25	0.14
(1,1562)	1:279:A:ILE:HG13	1:309:A:ALA:HA	13	0.14
(1,1560)	1:279:A:ILE:HG12	1:309:A:ALA:HA	9	0.14
(1,1560)	1:279:A:ILE:HG12	1:309:A:ALA:HA	13	0.14
(1,1560)	1:279:A:ILE:HG12	1:309:A:ALA:HA	22	0.14
(1,1560)	1:279:A:ILE:HG12	1:309:A:ALA:HA	29	0.14
(1,1523)	1:277:A:TRP:HZ2	1:238:A:LEU:HD21	18	0.14
(1,1523)	1:277:A:TRP:HZ2	1:238:A:LEU:HD22	18	0.14
(1,1523)	1:277:A:TRP:HZ2	1:238:A:LEU:HD23	18	0.14
(1,1500)	1:277:A:TRP:HZ2	1:275:A:VAL:HG21	14	0.14
(1,1500)	1:277:A:TRP:HZ2	1:275:A:VAL:HG22	14	0.14
(1,1500)	1:277:A:TRP:HZ2	1:275:A:VAL:HG23	14	0.14
(1,1491)	1:277:A:TRP:HE1	1:305:A:LEU:HG	7	0.14
(1,1464)	1:275:A:VAL:HB	1:305:A:LEU:HA	4	0.14
(1,1394)	1:273:A:TYR:HB2	1:220:A:VAL:HG21	11	0.14
(1,1394)	1:273:A:TYR:HB2	1:220:A:VAL:HG22	11	0.14
(1,1394)	1:273:A:TYR:HB2	1:220:A:VAL:HG23	11	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1380)	1:273:A:TYR:HA	1:223:A:LEU:HD21	7	0.14
(1,1380)	1:273:A:TYR:HA	1:223:A:LEU:HD22	7	0.14
(1,1380)	1:273:A:TYR:HA	1:223:A:LEU:HD23	7	0.14
(1,1380)	1:273:A:TYR:HA	1:223:A:LEU:HD21	26	0.14
(1,1380)	1:273:A:TYR:HA	1:223:A:LEU:HD22	26	0.14
(1,1380)	1:273:A:TYR:HA	1:223:A:LEU:HD23	26	0.14
(1,1380)	1:273:A:TYR:HA	1:223:A:LEU:HD21	29	0.14
(1,1380)	1:273:A:TYR:HA	1:223:A:LEU:HD22	29	0.14
(1,1380)	1:273:A:TYR:HA	1:223:A:LEU:HD23	29	0.14
(1,1373)	1:273:A:TYR:HA	1:221:A:GLU:HB2	26	0.14
(1,1356)	1:272:A:ILE:HA	1:228:A:TRP:HZ3	18	0.14
(1,1333)	1:271:A:GLN:HG3	1:271:A:GLN:HA	27	0.14
(1,1260)	1:267:A:LEU:H	1:266:A:GLN:HB3	3	0.14
(1,1260)	1:267:A:LEU:H	1:266:A:GLN:HB3	11	0.14
(1,1260)	1:267:A:LEU:H	1:266:A:GLN:HB3	13	0.14
(1,1260)	1:267:A:LEU:H	1:266:A:GLN:HB3	17	0.14
(1,1260)	1:267:A:LEU:H	1:266:A:GLN:HB3	23	0.14
(1,1229)	1:266:A:GLN:HB3	1:266:A:GLN:H	4	0.14
(1,1229)	1:266:A:GLN:HB3	1:266:A:GLN:H	12	0.14
(1,1228)	1:266:A:GLN:H	1:265:A:LEU:HA	4	0.14
(1,1228)	1:266:A:GLN:H	1:265:A:LEU:HA	28	0.14
(1,1206)	1:265:A:LEU:HD21	1:262:A:VAL:HB	20	0.14
(1,1206)	1:265:A:LEU:HD22	1:262:A:VAL:HB	20	0.14
(1,1206)	1:265:A:LEU:HD23	1:262:A:VAL:HB	20	0.14
(1,1185)	1:264:A:SER:H	1:261:A:LEU:HA	29	0.14
(1,1170)	1:262:A:VAL:H	1:261:A:LEU:HB2	5	0.14
(1,1169)	1:262:A:VAL:HG21	1:259:A:LEU:HB2	7	0.14
(1,1169)	1:262:A:VAL:HG22	1:259:A:LEU:HB2	7	0.14
(1,1169)	1:262:A:VAL:HG23	1:259:A:LEU:HB2	7	0.14
(1,1164)	1:262:A:VAL:HB	1:265:A:LEU:H	12	0.14
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG11	1:265:A:LEU:HD21	21	0.14
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG11	1:265:A:LEU:HD22	21	0.14
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG11	1:265:A:LEU:HD23	21	0.14
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG12	1:265:A:LEU:HD21	21	0.14
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG12	1:265:A:LEU:HD22	21	0.14
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG12	1:265:A:LEU:HD23	21	0.14
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG13	1:265:A:LEU:HD21	21	0.14
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG13	1:265:A:LEU:HD22	21	0.14
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG13	1:265:A:LEU:HD23	21	0.14
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG11	1:265:A:LEU:HD21	23	0.14
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG11	1:265:A:LEU:HD22	23	0.14
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG11	1:265:A:LEU:HD23	23	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG12	1:265:A:LEU:HD21	23	0.14
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG12	1:265:A:LEU:HD22	23	0.14
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG12	1:265:A:LEU:HD23	23	0.14
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG13	1:265:A:LEU:HD21	23	0.14
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG13	1:265:A:LEU:HD22	23	0.14
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG13	1:265:A:LEU:HD23	23	0.14
(1,1140)	1:262:A:VAL:HG21	1:262:A:VAL:H	11	0.14
(1,1140)	1:262:A:VAL:HG22	1:262:A:VAL:H	11	0.14
(1,1140)	1:262:A:VAL:HG23	1:262:A:VAL:H	11	0.14
(1,1140)	1:262:A:VAL:HG21	1:262:A:VAL:H	17	0.14
(1,1140)	1:262:A:VAL:HG22	1:262:A:VAL:H	17	0.14
(1,1140)	1:262:A:VAL:HG23	1:262:A:VAL:H	17	0.14
(1,1140)	1:262:A:VAL:HG21	1:262:A:VAL:H	19	0.14
(1,1140)	1:262:A:VAL:HG22	1:262:A:VAL:H	19	0.14
(1,1140)	1:262:A:VAL:HG23	1:262:A:VAL:H	19	0.14
(1,1107)	1:261:A:LEU:HD21	1:264:A:SER:HB2	25	0.14
(1,1107)	1:261:A:LEU:HD22	1:264:A:SER:HB2	25	0.14
(1,1107)	1:261:A:LEU:HD23	1:264:A:SER:HB2	25	0.14
(1,1082)	1:260:A:ASP:HA	1:262:A:VAL:H	22	0.14
(1,1052)	1:259:A:LEU:HD21	1:259:A:LEU:H	7	0.14
(1,1052)	1:259:A:LEU:HD22	1:259:A:LEU:H	7	0.14
(1,1052)	1:259:A:LEU:HD23	1:259:A:LEU:H	7	0.14
(1,1052)	1:259:A:LEU:HD21	1:259:A:LEU:H	11	0.14
(1,1052)	1:259:A:LEU:HD22	1:259:A:LEU:H	11	0.14
(1,1052)	1:259:A:LEU:HD23	1:259:A:LEU:H	11	0.14
(1,1052)	1:259:A:LEU:HD21	1:259:A:LEU:H	22	0.14
(1,1052)	1:259:A:LEU:HD22	1:259:A:LEU:H	22	0.14
(1,1052)	1:259:A:LEU:HD23	1:259:A:LEU:H	22	0.14
(1,1006)	1:258:A:PHE:HE1	1:261:A:LEU:H	24	0.14
(1,1006)	1:258:A:PHE:HE2	1:261:A:LEU:H	24	0.14
(1,956)	1:256:A:LEU:H	1:254:A:ALA:H	18	0.14
(1,816)	1:238:A:LEU:HD11	1:216:A:LEU:HA	11	0.14
(1,816)	1:238:A:LEU:HD12	1:216:A:LEU:HA	11	0.14
(1,816)	1:238:A:LEU:HD13	1:216:A:LEU:HA	11	0.14
(1,816)	1:238:A:LEU:HD21	1:216:A:LEU:HA	11	0.14
(1,816)	1:238:A:LEU:HD22	1:216:A:LEU:HA	11	0.14
(1,816)	1:238:A:LEU:HD23	1:216:A:LEU:HA	11	0.14
(1,800)	1:237:A:PHE:HZ	1:192:A:LEU:HD11	9	0.14
(1,800)	1:237:A:PHE:HZ	1:192:A:LEU:HD12	9	0.14
(1,800)	1:237:A:PHE:HZ	1:192:A:LEU:HD13	9	0.14
(1,719)	1:234:A:HIS:H	1:265:A:LEU:HD11	20	0.14
(1,719)	1:234:A:HIS:H	1:265:A:LEU:HD12	20	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,719)	1:234:A:HIS:H	1:265:A:LEU:HD13	20	0.14
(1,714)	1:233:A:GLN:HE22	1:233:A:GLN:HA	13	0.14
(1,688)	1:231:A:MET:HE1	1:221:A:GLU:HA	18	0.14
(1,688)	1:231:A:MET:HE2	1:221:A:GLU:HA	18	0.14
(1,688)	1:231:A:MET:HE3	1:221:A:GLU:HA	18	0.14
(1,666)	1:230:A:LEU:HD11	1:228:A:TRP:HB2	29	0.14
(1,666)	1:230:A:LEU:HD12	1:228:A:TRP:HB2	29	0.14
(1,666)	1:230:A:LEU:HD13	1:228:A:TRP:HB2	29	0.14
(1,666)	1:230:A:LEU:HD21	1:228:A:TRP:HB2	29	0.14
(1,666)	1:230:A:LEU:HD22	1:228:A:TRP:HB2	29	0.14
(1,666)	1:230:A:LEU:HD23	1:228:A:TRP:HB2	29	0.14
(1,660)	1:230:A:LEU:HD21	1:219:A:GLU:HB3	1	0.14
(1,660)	1:230:A:LEU:HD22	1:219:A:GLU:HB3	1	0.14
(1,660)	1:230:A:LEU:HD23	1:219:A:GLU:HB3	1	0.14
(1,660)	1:230:A:LEU:HD21	1:219:A:GLU:HB3	15	0.14
(1,660)	1:230:A:LEU:HD22	1:219:A:GLU:HB3	15	0.14
(1,660)	1:230:A:LEU:HD23	1:219:A:GLU:HB3	15	0.14
(1,660)	1:230:A:LEU:HD21	1:219:A:GLU:HB3	24	0.14
(1,660)	1:230:A:LEU:HD22	1:219:A:GLU:HB3	24	0.14
(1,660)	1:230:A:LEU:HD23	1:219:A:GLU:HB3	24	0.14
(1,640)	1:230:A:LEU:HD11	1:228:A:TRP:HE3	23	0.14
(1,640)	1:230:A:LEU:HD12	1:228:A:TRP:HE3	23	0.14
(1,640)	1:230:A:LEU:HD13	1:228:A:TRP:HE3	23	0.14
(1,640)	1:230:A:LEU:HD11	1:228:A:TRP:HE3	24	0.14
(1,640)	1:230:A:LEU:HD12	1:228:A:TRP:HE3	24	0.14
(1,640)	1:230:A:LEU:HD13	1:228:A:TRP:HE3	24	0.14
(1,621)	1:229:A:VAL:H	1:228:A:TRP:HB2	3	0.14
(1,621)	1:229:A:VAL:H	1:228:A:TRP:HB2	8	0.14
(1,621)	1:229:A:VAL:H	1:228:A:TRP:HB2	15	0.14
(1,621)	1:229:A:VAL:H	1:228:A:TRP:HB2	16	0.14
(1,621)	1:229:A:VAL:H	1:228:A:TRP:HB2	22	0.14
(1,600)	1:229:A:VAL:HB	1:222:A:ARG:H	4	0.14
(1,600)	1:229:A:VAL:HB	1:222:A:ARG:H	5	0.14
(1,600)	1:229:A:VAL:HB	1:222:A:ARG:H	11	0.14
(1,600)	1:229:A:VAL:HB	1:222:A:ARG:H	12	0.14
(1,600)	1:229:A:VAL:HB	1:222:A:ARG:H	16	0.14
(1,600)	1:229:A:VAL:HB	1:222:A:ARG:H	20	0.14
(1,600)	1:229:A:VAL:HB	1:222:A:ARG:H	21	0.14
(1,595)	1:228:A:TRP:HH2	1:222:A:ARG:HA	3	0.14
(1,595)	1:228:A:TRP:HH2	1:222:A:ARG:HA	6	0.14
(1,595)	1:228:A:TRP:HH2	1:222:A:ARG:HA	14	0.14
(1,595)	1:228:A:TRP:HH2	1:222:A:ARG:HA	17	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,595)	1:228:A:TRP:HH2	1:222:A:ARG:HA	19	0.14
(1,595)	1:228:A:TRP:HH2	1:222:A:ARG:HA	22	0.14
(1,595)	1:228:A:TRP:HH2	1:222:A:ARG:HA	30	0.14
(1,574)	1:228:A:TRP:HE3	1:221:A:GLU:HG3	3	0.14
(1,557)	1:227:A:THR:HB	1:228:A:TRP:H	8	0.14
(1,557)	1:227:A:THR:HB	1:228:A:TRP:H	9	0.14
(1,557)	1:227:A:THR:HB	1:228:A:TRP:H	10	0.14
(1,501)	1:224:A:ASP:HB3	1:229:A:VAL:HB	13	0.14
(1,337)	1:217:A:CYS:HB2	1:237:A:PHE:HA	1	0.14
(1,337)	1:217:A:CYS:HB2	1:237:A:PHE:HA	18	0.14
(1,335)	1:217:A:CYS:H	1:216:A:LEU:HB3	5	0.14
(1,335)	1:217:A:CYS:H	1:216:A:LEU:HB3	27	0.14
(1,335)	1:217:A:CYS:H	1:216:A:LEU:HB3	28	0.14
(1,283)	1:216:A:LEU:HD11	1:258:A:PHE:HA	6	0.14
(1,283)	1:216:A:LEU:HD12	1:258:A:PHE:HA	6	0.14
(1,283)	1:216:A:LEU:HD13	1:258:A:PHE:HA	6	0.14
(1,283)	1:216:A:LEU:HD11	1:258:A:PHE:HA	26	0.14
(1,283)	1:216:A:LEU:HD12	1:258:A:PHE:HA	26	0.14
(1,283)	1:216:A:LEU:HD13	1:258:A:PHE:HA	26	0.14
(1,278)	1:216:A:LEU:HD11	1:258:A:PHE:HB3	29	0.14
(1,278)	1:216:A:LEU:HD12	1:258:A:PHE:HB3	29	0.14
(1,278)	1:216:A:LEU:HD13	1:258:A:PHE:HB3	29	0.14
(1,169)	1:196:A:ASP:H	1:195:A:PRO:HB3	25	0.14
(1,143)	1:194:A:ASP:HB2	1:193:A:MET:HA	26	0.14
(1,143)	1:194:A:ASP:HB2	1:193:A:MET:HA	30	0.14
(1,106)	1:192:A:LEU:HD21	1:191:A:TYR:HB3	23	0.14
(1,106)	1:192:A:LEU:HD22	1:191:A:TYR:HB3	23	0.14
(1,106)	1:192:A:LEU:HD23	1:191:A:TYR:HB3	23	0.14
(1,66)	1:190:A:ARG:H	1:190:A:ARG:HG2	21	0.14
(3,122)	1:294:A:ARG:N	1:290:A:ALA:O	28	0.13
(3,120)	1:280:A:SER:N	1:215:A:TYR:O	1	0.13
(3,70)	1:349:A:VAL:H	1:345:A:TRP:O	9	0.13
(3,70)	1:349:A:VAL:H	1:345:A:TRP:O	14	0.13
(3,60)	1:334:A:SER:H	1:307:A:ILE:O	26	0.13
(3,59)	1:332:A:GLN:H	1:305:A:LEU:O	16	0.13
(3,59)	1:332:A:GLN:H	1:305:A:LEU:O	17	0.13
(3,50)	1:309:A:ALA:H	1:334:A:SER:O	16	0.13
(3,43)	1:298:A:GLN:H	1:294:A:ARG:O	7	0.13
(3,43)	1:298:A:GLN:H	1:294:A:ARG:O	25	0.13
(3,37)	1:280:A:SER:H	1:215:A:TYR:O	5	0.13
(3,37)	1:280:A:SER:H	1:215:A:TYR:O	24	0.13
(3,37)	1:280:A:SER:H	1:215:A:TYR:O	25	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,33)	1:276:A:THR:H	1:219:A:GLU:O	3	0.13
(3,33)	1:276:A:THR:H	1:219:A:GLU:O	4	0.13
(3,33)	1:276:A:THR:H	1:219:A:GLU:O	9	0.13
(3,33)	1:276:A:THR:H	1:219:A:GLU:O	18	0.13
(3,33)	1:276:A:THR:H	1:219:A:GLU:O	23	0.13
(3,33)	1:276:A:THR:H	1:219:A:GLU:O	30	0.13
(3,24)	1:259:A:LEU:H	1:255:A:GLU:O	27	0.13
(3,22)	1:257:A:ARG:H	1:253:A:HIS:O	16	0.13
(3,22)	1:257:A:ARG:H	1:253:A:HIS:O	28	0.13
(3,16)	1:229:A:VAL:H	1:222:A:ARG:O	7	0.13
(3,12)	1:222:A:ARG:H	1:229:A:VAL:O	25	0.13
(3,10)	1:219:A:GLU:H	1:276:A:THR:O	7	0.13
(3,10)	1:219:A:GLU:H	1:276:A:THR:O	30	0.13
(3,7)	1:216:A:LEU:H	1:238:A:LEU:O	4	0.13
(3,7)	1:216:A:LEU:H	1:238:A:LEU:O	25	0.13
(1,3071)	1:255:A:GLU:N	1:255:A:GLU:OE1	8	0.13
(1,3039)	1:379:A:ASN:HD22	1:379:A:ASN:HA	6	0.13
(1,2824)	1:363:A:GLU:HB3	1:362:A:LEU:HD11	24	0.13
(1,2824)	1:363:A:GLU:HB3	1:362:A:LEU:HD12	24	0.13
(1,2824)	1:363:A:GLU:HB3	1:362:A:LEU:HD13	24	0.13
(1,2758)	1:359:A:TRP:HE3	1:360:A:ASP:H	20	0.13
(1,2750)	1:359:A:TRP:HE3	1:362:A:LEU:HD21	19	0.13
(1,2750)	1:359:A:TRP:HE3	1:362:A:LEU:HD22	19	0.13
(1,2750)	1:359:A:TRP:HE3	1:362:A:LEU:HD23	19	0.13
(1,2718)	1:356:A:PHE:HD1	1:362:A:LEU:HB2	20	0.13
(1,2718)	1:356:A:PHE:HD1	1:362:A:LEU:HB3	20	0.13
(1,2718)	1:356:A:PHE:HD2	1:362:A:LEU:HB2	20	0.13
(1,2718)	1:356:A:PHE:HD2	1:362:A:LEU:HB3	20	0.13
(1,2714)	1:356:A:PHE:HZ	1:359:A:TRP:HZ3	28	0.13
(1,2713)	1:356:A:PHE:HB2	1:357:A:GLN:H	3	0.13
(1,2713)	1:356:A:PHE:HB2	1:357:A:GLN:H	27	0.13
(1,2672)	1:351:A:ARG:HD3	1:345:A:TRP:HA	9	0.13
(1,2625)	1:349:A:VAL:HG21	1:351:A:ARG:HD3	17	0.13
(1,2625)	1:349:A:VAL:HG22	1:351:A:ARG:HD3	17	0.13
(1,2625)	1:349:A:VAL:HG23	1:351:A:ARG:HD3	17	0.13
(1,2582)	1:346:A:ASP:H	1:344:A:CYS:H	9	0.13
(1,2555)	1:345:A:TRP:HE1	1:354:A:CYS:HA	23	0.13
(1,2549)	1:345:A:TRP:HE1	1:345:A:TRP:HA	24	0.13
(1,2549)	1:345:A:TRP:HE1	1:345:A:TRP:HA	30	0.13
(1,2466)	1:340:A:GLU:H	1:340:A:GLU:HB3	3	0.13
(1,2388)	1:335:A:ILE:H	1:335:A:ILE:HD11	26	0.13
(1,2388)	1:335:A:ILE:H	1:335:A:ILE:HD12	26	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2388)	1:335:A:ILE:H	1:335:A:ILE:HD13	26	0.13
(1,2366)	1:333:A:VAL:H	1:327:A:ARG:HB3	3	0.13
(1,2364)	1:333:A:VAL:HB	1:308:A:PHE:HA	24	0.13
(1,2359)	1:333:A:VAL:H	1:332:A:GLN:HG3	6	0.13
(1,2332)	1:333:A:VAL:HG11	1:308:A:PHE:H	22	0.13
(1,2332)	1:333:A:VAL:HG12	1:308:A:PHE:H	22	0.13
(1,2332)	1:333:A:VAL:HG13	1:308:A:PHE:H	22	0.13
(1,2298)	1:331:A:ALA:HB1	1:326:A:LEU:HB2	29	0.13
(1,2298)	1:331:A:ALA:HB2	1:326:A:LEU:HB2	29	0.13
(1,2298)	1:331:A:ALA:HB3	1:326:A:LEU:HB2	29	0.13
(1,2284)	1:329:A:ALA:H	1:326:A:LEU:HG	7	0.13
(1,2284)	1:329:A:ALA:H	1:326:A:LEU:HG	10	0.13
(1,2284)	1:329:A:ALA:H	1:326:A:LEU:HG	11	0.13
(1,2284)	1:329:A:ALA:H	1:326:A:LEU:HG	13	0.13
(1,2071)	1:310:A:ALA:H	1:279:A:ILE:HG21	30	0.13
(1,2071)	1:310:A:ALA:H	1:279:A:ILE:HG22	30	0.13
(1,2071)	1:310:A:ALA:H	1:279:A:ILE:HG23	30	0.13
(1,2023)	1:307:A:ILE:HB	1:308:A:PHE:HA	16	0.13
(1,2023)	1:307:A:ILE:HB	1:308:A:PHE:HA	21	0.13
(1,2023)	1:307:A:ILE:HB	1:308:A:PHE:HA	25	0.13
(1,1981)	1:305:A:LEU:HD11	1:275:A:VAL:HB	13	0.13
(1,1981)	1:305:A:LEU:HD12	1:275:A:VAL:HB	13	0.13
(1,1981)	1:305:A:LEU:HD13	1:275:A:VAL:HB	13	0.13
(1,1970)	1:305:A:LEU:HD21	1:258:A:PHE:HZ	2	0.13
(1,1970)	1:305:A:LEU:HD22	1:258:A:PHE:HZ	2	0.13
(1,1970)	1:305:A:LEU:HD23	1:258:A:PHE:HZ	2	0.13
(1,1970)	1:305:A:LEU:HD21	1:258:A:PHE:HZ	30	0.13
(1,1970)	1:305:A:LEU:HD22	1:258:A:PHE:HZ	30	0.13
(1,1970)	1:305:A:LEU:HD23	1:258:A:PHE:HZ	30	0.13
(1,1958)	1:305:A:LEU:HD11	1:276:A:THR:HA	26	0.13
(1,1958)	1:305:A:LEU:HD12	1:276:A:THR:HA	26	0.13
(1,1958)	1:305:A:LEU:HD13	1:276:A:THR:HA	26	0.13
(1,1949)	1:305:A:LEU:HG	1:277:A:TRP:HD1	8	0.13
(1,1946)	1:305:A:LEU:HD11	1:306:A:ARG:HA	16	0.13
(1,1946)	1:305:A:LEU:HD12	1:306:A:ARG:HA	16	0.13
(1,1946)	1:305:A:LEU:HD13	1:306:A:ARG:HA	16	0.13
(1,1946)	1:305:A:LEU:HD11	1:306:A:ARG:HA	22	0.13
(1,1946)	1:305:A:LEU:HD12	1:306:A:ARG:HA	22	0.13
(1,1946)	1:305:A:LEU:HD13	1:306:A:ARG:HA	22	0.13
(1,1937)	1:304:A:ARG:H	1:303:A:VAL:HB	2	0.13
(1,1937)	1:304:A:ARG:H	1:303:A:VAL:HB	8	0.13
(1,1937)	1:304:A:ARG:H	1:303:A:VAL:HB	26	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1937)	1:304:A:ARG:H	1:303:A:VAL:HB	28	0.13
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG11	1:273:A:TYR:HA	16	0.13
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG12	1:273:A:TYR:HA	16	0.13
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG13	1:273:A:TYR:HA	16	0.13
(1,1876)	1:302:A:HIS:HD2	1:303:A:VAL:HB	13	0.13
(1,1834)	1:299:A:GLU:HG2	1:296:A:PHE:HD1	19	0.13
(1,1834)	1:299:A:GLU:HG2	1:296:A:PHE:HD2	19	0.13
(1,1829)	1:299:A:GLU:HG3	1:300:A:ASN:H	4	0.13
(1,1829)	1:299:A:GLU:HG3	1:300:A:ASN:H	5	0.13
(1,1829)	1:299:A:GLU:HG3	1:300:A:ASN:H	23	0.13
(1,1818)	1:298:A:GLN:HE21	1:296:A:PHE:H	23	0.13
(1,1797)	1:298:A:GLN:HE21	1:299:A:GLU:HB3	7	0.13
(1,1768)	1:296:A:PHE:HE1	1:259:A:LEU:HD21	1	0.13
(1,1768)	1:296:A:PHE:HE1	1:259:A:LEU:HD22	1	0.13
(1,1768)	1:296:A:PHE:HE1	1:259:A:LEU:HD23	1	0.13
(1,1768)	1:296:A:PHE:HE2	1:259:A:LEU:HD21	1	0.13
(1,1768)	1:296:A:PHE:HE2	1:259:A:LEU:HD22	1	0.13
(1,1768)	1:296:A:PHE:HE2	1:259:A:LEU:HD23	1	0.13
(1,1768)	1:296:A:PHE:HE1	1:259:A:LEU:HD21	16	0.13
(1,1768)	1:296:A:PHE:HE1	1:259:A:LEU:HD22	16	0.13
(1,1768)	1:296:A:PHE:HE1	1:259:A:LEU:HD23	16	0.13
(1,1768)	1:296:A:PHE:HE2	1:259:A:LEU:HD21	16	0.13
(1,1768)	1:296:A:PHE:HE2	1:259:A:LEU:HD22	16	0.13
(1,1768)	1:296:A:PHE:HE2	1:259:A:LEU:HD23	16	0.13
(1,1768)	1:296:A:PHE:HE1	1:259:A:LEU:HD21	19	0.13
(1,1768)	1:296:A:PHE:HE1	1:259:A:LEU:HD22	19	0.13
(1,1768)	1:296:A:PHE:HE1	1:259:A:LEU:HD23	19	0.13
(1,1768)	1:296:A:PHE:HE2	1:259:A:LEU:HD21	19	0.13
(1,1768)	1:296:A:PHE:HE2	1:259:A:LEU:HD22	19	0.13
(1,1768)	1:296:A:PHE:HE2	1:259:A:LEU:HD23	19	0.13
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE1	1:275:A:VAL:HG21	13	0.13
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE1	1:275:A:VAL:HG22	13	0.13
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE1	1:275:A:VAL:HG23	13	0.13
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE2	1:275:A:VAL:HG21	13	0.13
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE2	1:275:A:VAL:HG22	13	0.13
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE2	1:275:A:VAL:HG23	13	0.13
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE1	1:275:A:VAL:HG21	22	0.13
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE1	1:275:A:VAL:HG22	22	0.13
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE1	1:275:A:VAL:HG23	22	0.13
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE2	1:275:A:VAL:HG21	22	0.13
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE2	1:275:A:VAL:HG22	22	0.13
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE2	1:275:A:VAL:HG23	22	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1738)	1:296:A:PHE:HE1	1:263:A:PRO:HD2	5	0.13
(1,1738)	1:296:A:PHE:HE1	1:263:A:PRO:HD3	5	0.13
(1,1738)	1:296:A:PHE:HE2	1:263:A:PRO:HD2	5	0.13
(1,1738)	1:296:A:PHE:HE2	1:263:A:PRO:HD3	5	0.13
(1,1677)	1:290:A:ALA:H	1:293:A:VAL:H	16	0.13
(1,1677)	1:290:A:ALA:H	1:293:A:VAL:H	17	0.13
(1,1646)	1:286:A:SER:H	1:289:A:CYS:HA	4	0.13
(1,1646)	1:286:A:SER:H	1:289:A:CYS:HA	28	0.13
(1,1641)	1:285:A:PHE:HE1	1:286:A:SER:HA	4	0.13
(1,1641)	1:285:A:PHE:HE2	1:286:A:SER:HA	4	0.13
(1,1641)	1:285:A:PHE:HE1	1:286:A:SER:HA	13	0.13
(1,1641)	1:285:A:PHE:HE2	1:286:A:SER:HA	13	0.13
(1,1641)	1:285:A:PHE:HE1	1:286:A:SER:HA	20	0.13
(1,1641)	1:285:A:PHE:HE2	1:286:A:SER:HA	20	0.13
(1,1617)	1:282:A:SER:H	1:309:A:ALA:HA	16	0.13
(1,1609)	1:281:A:TRP:HE3	1:314:A:ASP:H	9	0.13
(1,1603)	1:281:A:TRP:HE3	1:281:A:TRP:HB2	6	0.13
(1,1603)	1:281:A:TRP:HE3	1:281:A:TRP:HB2	7	0.13
(1,1603)	1:281:A:TRP:HE3	1:281:A:TRP:HB2	11	0.13
(1,1603)	1:281:A:TRP:HE3	1:281:A:TRP:HB2	24	0.13
(1,1603)	1:281:A:TRP:HE3	1:281:A:TRP:HB2	30	0.13
(1,1578)	1:279:A:ILE:HB	1:309:A:ALA:HA	3	0.13
(1,1578)	1:279:A:ILE:HB	1:309:A:ALA:HA	11	0.13
(1,1578)	1:279:A:ILE:HB	1:309:A:ALA:HA	13	0.13
(1,1578)	1:279:A:ILE:HB	1:309:A:ALA:HA	24	0.13
(1,1577)	1:279:A:ILE:HD11	1:281:A:TRP:HB2	30	0.13
(1,1577)	1:279:A:ILE:HD11	1:281:A:TRP:HB3	30	0.13
(1,1577)	1:279:A:ILE:HD12	1:281:A:TRP:HB2	30	0.13
(1,1577)	1:279:A:ILE:HD12	1:281:A:TRP:HB3	30	0.13
(1,1577)	1:279:A:ILE:HD13	1:281:A:TRP:HB2	30	0.13
(1,1577)	1:279:A:ILE:HD13	1:281:A:TRP:HB3	30	0.13
(1,1562)	1:279:A:ILE:HG13	1:309:A:ALA:HA	8	0.13
(1,1562)	1:279:A:ILE:HG13	1:309:A:ALA:HA	15	0.13
(1,1560)	1:279:A:ILE:HG12	1:309:A:ALA:HA	7	0.13
(1,1560)	1:279:A:ILE:HG12	1:309:A:ALA:HA	14	0.13
(1,1557)	1:279:A:ILE:H	1:308:A:PHE:H	8	0.13
(1,1557)	1:279:A:ILE:H	1:308:A:PHE:H	12	0.13
(1,1557)	1:279:A:ILE:H	1:308:A:PHE:H	29	0.13
(1,1524)	1:277:A:TRP:HH2	1:258:A:PHE:HA	4	0.13
(1,1523)	1:277:A:TRP:HZ2	1:238:A:LEU:HD21	9	0.13
(1,1523)	1:277:A:TRP:HZ2	1:238:A:LEU:HD22	9	0.13
(1,1523)	1:277:A:TRP:HZ2	1:238:A:LEU:HD23	9	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1523)	1:277:A:TRP:HZ2	1:238:A:LEU:HD21	13	0.13
(1,1523)	1:277:A:TRP:HZ2	1:238:A:LEU:HD22	13	0.13
(1,1523)	1:277:A:TRP:HZ2	1:238:A:LEU:HD23	13	0.13
(1,1523)	1:277:A:TRP:HZ2	1:238:A:LEU:HD21	29	0.13
(1,1523)	1:277:A:TRP:HZ2	1:238:A:LEU:HD22	29	0.13
(1,1523)	1:277:A:TRP:HZ2	1:238:A:LEU:HD23	29	0.13
(1,1491)	1:277:A:TRP:HE1	1:305:A:LEU:HG	8	0.13
(1,1491)	1:277:A:TRP:HE1	1:305:A:LEU:HG	11	0.13
(1,1491)	1:277:A:TRP:HE1	1:305:A:LEU:HG	14	0.13
(1,1486)	1:276:A:THR:HG21	1:308:A:PHE:H	16	0.13
(1,1486)	1:276:A:THR:HG22	1:308:A:PHE:H	16	0.13
(1,1486)	1:276:A:THR:HG23	1:308:A:PHE:H	16	0.13
(1,1464)	1:275:A:VAL:HB	1:305:A:LEU:HA	16	0.13
(1,1451)	1:275:A:VAL:HG11	1:220:A:VAL:HG11	26	0.13
(1,1451)	1:275:A:VAL:HG11	1:220:A:VAL:HG12	26	0.13
(1,1451)	1:275:A:VAL:HG11	1:220:A:VAL:HG13	26	0.13
(1,1451)	1:275:A:VAL:HG12	1:220:A:VAL:HG11	26	0.13
(1,1451)	1:275:A:VAL:HG12	1:220:A:VAL:HG12	26	0.13
(1,1451)	1:275:A:VAL:HG12	1:220:A:VAL:HG13	26	0.13
(1,1451)	1:275:A:VAL:HG13	1:220:A:VAL:HG11	26	0.13
(1,1451)	1:275:A:VAL:HG13	1:220:A:VAL:HG12	26	0.13
(1,1451)	1:275:A:VAL:HG13	1:220:A:VAL:HG13	26	0.13
(1,1380)	1:273:A:TYR:HA	1:223:A:LEU:HD21	4	0.13
(1,1380)	1:273:A:TYR:HA	1:223:A:LEU:HD22	4	0.13
(1,1380)	1:273:A:TYR:HA	1:223:A:LEU:HD23	4	0.13
(1,1380)	1:273:A:TYR:HA	1:223:A:LEU:HD21	8	0.13
(1,1380)	1:273:A:TYR:HA	1:223:A:LEU:HD22	8	0.13
(1,1380)	1:273:A:TYR:HA	1:223:A:LEU:HD23	8	0.13
(1,1380)	1:273:A:TYR:HA	1:223:A:LEU:HD21	9	0.13
(1,1380)	1:273:A:TYR:HA	1:223:A:LEU:HD22	9	0.13
(1,1380)	1:273:A:TYR:HA	1:223:A:LEU:HD23	9	0.13
(1,1380)	1:273:A:TYR:HA	1:223:A:LEU:HD21	23	0.13
(1,1380)	1:273:A:TYR:HA	1:223:A:LEU:HD22	23	0.13
(1,1380)	1:273:A:TYR:HA	1:223:A:LEU:HD23	23	0.13
(1,1373)	1:273:A:TYR:HA	1:221:A:GLU:HB2	5	0.13
(1,1229)	1:266:A:GLN:HB3	1:266:A:GLN:H	5	0.13
(1,1228)	1:266:A:GLN:H	1:265:A:LEU:HA	15	0.13
(1,1228)	1:266:A:GLN:H	1:265:A:LEU:HA	20	0.13
(1,1205)	1:265:A:LEU:HG	1:267:A:LEU:HD21	23	0.13
(1,1205)	1:265:A:LEU:HG	1:267:A:LEU:HD22	23	0.13
(1,1205)	1:265:A:LEU:HG	1:267:A:LEU:HD23	23	0.13
(1,1170)	1:262:A:VAL:H	1:261:A:LEU:HB2	2	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD21	8	0.13
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD22	8	0.13
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD23	8	0.13
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD21	8	0.13
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD22	8	0.13
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD23	8	0.13
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD21	8	0.13
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD22	8	0.13
(1,1166)	1:262:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD23	8	0.13
(1,1164)	1:262:A:VAL:HB	1:265:A:LEU:H	16	0.13
(1,1164)	1:262:A:VAL:HB	1:265:A:LEU:H	27	0.13
(1,1155)	1:262:A:VAL:HA	1:265:A:LEU:HB3	15	0.13
(1,1155)	1:262:A:VAL:HA	1:265:A:LEU:HB3	21	0.13
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG11	1:260:A:ASP:H	9	0.13
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG12	1:260:A:ASP:H	9	0.13
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG13	1:260:A:ASP:H	9	0.13
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG11	1:260:A:ASP:H	14	0.13
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG12	1:260:A:ASP:H	14	0.13
(1,1154)	1:262:A:VAL:HG13	1:260:A:ASP:H	14	0.13
(1,1107)	1:261:A:LEU:HD21	1:264:A:SER:HB2	24	0.13
(1,1107)	1:261:A:LEU:HD22	1:264:A:SER:HB2	24	0.13
(1,1107)	1:261:A:LEU:HD23	1:264:A:SER:HB2	24	0.13
(1,1101)	1:261:A:LEU:HD21	1:238:A:LEU:HB2	13	0.13
(1,1101)	1:261:A:LEU:HD22	1:238:A:LEU:HB2	13	0.13
(1,1101)	1:261:A:LEU:HD23	1:238:A:LEU:HB2	13	0.13
(1,1101)	1:261:A:LEU:HD21	1:238:A:LEU:HB2	29	0.13
(1,1101)	1:261:A:LEU:HD22	1:238:A:LEU:HB2	29	0.13
(1,1101)	1:261:A:LEU:HD23	1:238:A:LEU:HB2	29	0.13
(1,1100)	1:261:A:LEU:HD11	1:238:A:LEU:HB3	12	0.13
(1,1100)	1:261:A:LEU:HD12	1:238:A:LEU:HB3	12	0.13
(1,1100)	1:261:A:LEU:HD13	1:238:A:LEU:HB3	12	0.13
(1,1100)	1:261:A:LEU:HD11	1:238:A:LEU:HB3	13	0.13
(1,1100)	1:261:A:LEU:HD12	1:238:A:LEU:HB3	13	0.13
(1,1100)	1:261:A:LEU:HD13	1:238:A:LEU:HB3	13	0.13
(1,1100)	1:261:A:LEU:HD11	1:238:A:LEU:HB3	23	0.13
(1,1100)	1:261:A:LEU:HD12	1:238:A:LEU:HB3	23	0.13
(1,1100)	1:261:A:LEU:HD13	1:238:A:LEU:HB3	23	0.13
(1,1052)	1:259:A:LEU:HD21	1:259:A:LEU:H	4	0.13
(1,1052)	1:259:A:LEU:HD22	1:259:A:LEU:H	4	0.13
(1,1052)	1:259:A:LEU:HD23	1:259:A:LEU:H	4	0.13
(1,1006)	1:258:A:PHE:HE1	1:261:A:LEU:H	6	0.13
(1,1006)	1:258:A:PHE:HE2	1:261:A:LEU:H	6	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,880)	1:245:A:LEU:HD11	1:245:A:LEU:HA	14	0.13
(1,880)	1:245:A:LEU:HD12	1:245:A:LEU:HA	14	0.13
(1,880)	1:245:A:LEU:HD13	1:245:A:LEU:HA	14	0.13
(1,816)	1:238:A:LEU:HD11	1:216:A:LEU:HA	10	0.13
(1,816)	1:238:A:LEU:HD12	1:216:A:LEU:HA	10	0.13
(1,816)	1:238:A:LEU:HD13	1:216:A:LEU:HA	10	0.13
(1,816)	1:238:A:LEU:HD21	1:216:A:LEU:HA	10	0.13
(1,816)	1:238:A:LEU:HD22	1:216:A:LEU:HA	10	0.13
(1,816)	1:238:A:LEU:HD23	1:216:A:LEU:HA	10	0.13
(1,816)	1:238:A:LEU:HD11	1:216:A:LEU:HA	17	0.13
(1,816)	1:238:A:LEU:HD12	1:216:A:LEU:HA	17	0.13
(1,816)	1:238:A:LEU:HD13	1:216:A:LEU:HA	17	0.13
(1,816)	1:238:A:LEU:HD21	1:216:A:LEU:HA	17	0.13
(1,816)	1:238:A:LEU:HD22	1:216:A:LEU:HA	17	0.13
(1,816)	1:238:A:LEU:HD23	1:216:A:LEU:HA	17	0.13
(1,816)	1:238:A:LEU:HD11	1:216:A:LEU:HA	18	0.13
(1,816)	1:238:A:LEU:HD12	1:216:A:LEU:HA	18	0.13
(1,816)	1:238:A:LEU:HD13	1:216:A:LEU:HA	18	0.13
(1,816)	1:238:A:LEU:HD21	1:216:A:LEU:HA	18	0.13
(1,816)	1:238:A:LEU:HD22	1:216:A:LEU:HA	18	0.13
(1,816)	1:238:A:LEU:HD23	1:216:A:LEU:HA	18	0.13
(1,719)	1:234:A:HIS:H	1:265:A:LEU:HD11	9	0.13
(1,719)	1:234:A:HIS:H	1:265:A:LEU:HD12	9	0.13
(1,719)	1:234:A:HIS:H	1:265:A:LEU:HD13	9	0.13
(1,719)	1:234:A:HIS:H	1:265:A:LEU:HD11	25	0.13
(1,719)	1:234:A:HIS:H	1:265:A:LEU:HD12	25	0.13
(1,719)	1:234:A:HIS:H	1:265:A:LEU:HD13	25	0.13
(1,719)	1:234:A:HIS:H	1:265:A:LEU:HD11	26	0.13
(1,719)	1:234:A:HIS:H	1:265:A:LEU:HD12	26	0.13
(1,719)	1:234:A:HIS:H	1:265:A:LEU:HD13	26	0.13
(1,666)	1:230:A:LEU:HD11	1:228:A:TRP:HB2	25	0.13
(1,666)	1:230:A:LEU:HD12	1:228:A:TRP:HB2	25	0.13
(1,666)	1:230:A:LEU:HD13	1:228:A:TRP:HB2	25	0.13
(1,666)	1:230:A:LEU:HD21	1:228:A:TRP:HB2	25	0.13
(1,666)	1:230:A:LEU:HD22	1:228:A:TRP:HB2	25	0.13
(1,666)	1:230:A:LEU:HD23	1:228:A:TRP:HB2	25	0.13
(1,660)	1:230:A:LEU:HD21	1:219:A:GLU:HB3	3	0.13
(1,660)	1:230:A:LEU:HD22	1:219:A:GLU:HB3	3	0.13
(1,660)	1:230:A:LEU:HD23	1:219:A:GLU:HB3	3	0.13
(1,660)	1:230:A:LEU:HD21	1:219:A:GLU:HB3	18	0.13
(1,660)	1:230:A:LEU:HD22	1:219:A:GLU:HB3	18	0.13
(1,660)	1:230:A:LEU:HD23	1:219:A:GLU:HB3	18	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,650)	1:230:A:LEU:HD21	1:221:A:GLU:HG3	13	0.13
(1,650)	1:230:A:LEU:HD22	1:221:A:GLU:HG3	13	0.13
(1,650)	1:230:A:LEU:HD23	1:221:A:GLU:HG3	13	0.13
(1,621)	1:229:A:VAL:H	1:228:A:TRP:HB2	2	0.13
(1,621)	1:229:A:VAL:H	1:228:A:TRP:HB2	12	0.13
(1,621)	1:229:A:VAL:H	1:228:A:TRP:HB2	18	0.13
(1,621)	1:229:A:VAL:H	1:228:A:TRP:HB2	27	0.13
(1,621)	1:229:A:VAL:H	1:228:A:TRP:HB2	30	0.13
(1,600)	1:229:A:VAL:HB	1:222:A:ARG:H	27	0.13
(1,595)	1:228:A:TRP:HH2	1:222:A:ARG:HA	2	0.13
(1,595)	1:228:A:TRP:HH2	1:222:A:ARG:HA	10	0.13
(1,595)	1:228:A:TRP:HH2	1:222:A:ARG:HA	12	0.13
(1,595)	1:228:A:TRP:HH2	1:222:A:ARG:HA	15	0.13
(1,595)	1:228:A:TRP:HH2	1:222:A:ARG:HA	27	0.13
(1,574)	1:228:A:TRP:HE3	1:221:A:GLU:HG3	15	0.13
(1,574)	1:228:A:TRP:HE3	1:221:A:GLU:HG3	19	0.13
(1,574)	1:228:A:TRP:HE3	1:221:A:GLU:HG3	26	0.13
(1,510)	1:224:A:ASP:H	1:227:A:THR:HG21	6	0.13
(1,510)	1:224:A:ASP:H	1:227:A:THR:HG22	6	0.13
(1,510)	1:224:A:ASP:H	1:227:A:THR:HG23	6	0.13
(1,510)	1:224:A:ASP:H	1:227:A:THR:HG21	13	0.13
(1,510)	1:224:A:ASP:H	1:227:A:THR:HG22	13	0.13
(1,510)	1:224:A:ASP:H	1:227:A:THR:HG23	13	0.13
(1,510)	1:224:A:ASP:H	1:227:A:THR:HG21	25	0.13
(1,510)	1:224:A:ASP:H	1:227:A:THR:HG22	25	0.13
(1,510)	1:224:A:ASP:H	1:227:A:THR:HG23	25	0.13
(1,510)	1:224:A:ASP:H	1:227:A:THR:HG21	28	0.13
(1,510)	1:224:A:ASP:H	1:227:A:THR:HG22	28	0.13
(1,510)	1:224:A:ASP:H	1:227:A:THR:HG23	28	0.13
(1,510)	1:224:A:ASP:H	1:227:A:THR:HG21	29	0.13
(1,510)	1:224:A:ASP:H	1:227:A:THR:HG22	29	0.13
(1,510)	1:224:A:ASP:H	1:227:A:THR:HG23	29	0.13
(1,501)	1:224:A:ASP:HB3	1:229:A:VAL:HB	28	0.13
(1,501)	1:224:A:ASP:HB3	1:229:A:VAL:HB	29	0.13
(1,381)	1:219:A:GLU:H	1:275:A:VAL:HG11	24	0.13
(1,381)	1:219:A:GLU:H	1:275:A:VAL:HG12	24	0.13
(1,381)	1:219:A:GLU:H	1:275:A:VAL:HG13	24	0.13
(1,366)	1:219:A:GLU:HG2	1:235:A:MET:HA	7	0.13
(1,366)	1:219:A:GLU:HG3	1:235:A:MET:HA	7	0.13
(1,337)	1:217:A:CYS:HB2	1:237:A:PHE:HA	2	0.13
(1,337)	1:217:A:CYS:HB2	1:237:A:PHE:HA	19	0.13
(1,335)	1:217:A:CYS:H	1:216:A:LEU:HB3	1	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,335)	1:217:A:CYS:H	1:216:A:LEU:HB3	17	0.13
(1,313)	1:216:A:LEU:HD21	1:218:A:TYR:HB2	25	0.13
(1,313)	1:216:A:LEU:HD22	1:218:A:TYR:HB2	25	0.13
(1,313)	1:216:A:LEU:HD23	1:218:A:TYR:HB2	25	0.13
(1,313)	1:216:A:LEU:HD21	1:218:A:TYR:HB2	27	0.13
(1,313)	1:216:A:LEU:HD22	1:218:A:TYR:HB2	27	0.13
(1,313)	1:216:A:LEU:HD23	1:218:A:TYR:HB2	27	0.13
(1,306)	1:216:A:LEU:HD11	1:254:A:ALA:H	24	0.13
(1,306)	1:216:A:LEU:HD12	1:254:A:ALA:H	24	0.13
(1,306)	1:216:A:LEU:HD13	1:254:A:ALA:H	24	0.13
(1,306)	1:216:A:LEU:HD11	1:254:A:ALA:H	28	0.13
(1,306)	1:216:A:LEU:HD12	1:254:A:ALA:H	28	0.13
(1,306)	1:216:A:LEU:HD13	1:254:A:ALA:H	28	0.13
(1,278)	1:216:A:LEU:HD11	1:258:A:PHE:HB3	2	0.13
(1,278)	1:216:A:LEU:HD12	1:258:A:PHE:HB3	2	0.13
(1,278)	1:216:A:LEU:HD13	1:258:A:PHE:HB3	2	0.13
(1,278)	1:216:A:LEU:HD11	1:258:A:PHE:HB3	3	0.13
(1,278)	1:216:A:LEU:HD12	1:258:A:PHE:HB3	3	0.13
(1,278)	1:216:A:LEU:HD13	1:258:A:PHE:HB3	3	0.13
(1,278)	1:216:A:LEU:HD11	1:258:A:PHE:HB3	13	0.13
(1,278)	1:216:A:LEU:HD12	1:258:A:PHE:HB3	13	0.13
(1,278)	1:216:A:LEU:HD13	1:258:A:PHE:HB3	13	0.13
(1,169)	1:196:A:ASP:H	1:195:A:PRO:HB3	11	0.13
(1,169)	1:196:A:ASP:H	1:195:A:PRO:HB3	19	0.13
(1,143)	1:194:A:ASP:HB2	1:193:A:MET:HA	1	0.13
(1,143)	1:194:A:ASP:HB2	1:193:A:MET:HA	19	0.13
(1,143)	1:194:A:ASP:HB2	1:193:A:MET:HA	25	0.13
(1,103)	1:192:A:LEU:HD21	1:191:A:TYR:HB2	11	0.13
(1,103)	1:192:A:LEU:HD22	1:191:A:TYR:HB2	11	0.13
(1,103)	1:192:A:LEU:HD23	1:191:A:TYR:HB2	11	0.13
(1,97)	1:192:A:LEU:H	1:192:A:LEU:HD11	19	0.13
(1,97)	1:192:A:LEU:H	1:192:A:LEU:HD12	19	0.13
(1,97)	1:192:A:LEU:H	1:192:A:LEU:HD13	19	0.13
(1,85)	1:192:A:LEU:HD21	1:348:A:PHE:H	10	0.13
(1,85)	1:192:A:LEU:HD22	1:348:A:PHE:H	10	0.13
(1,85)	1:192:A:LEU:HD23	1:348:A:PHE:H	10	0.13
(1,79)	1:191:A:TYR:H	1:190:A:ARG:HB2	19	0.13
(1,63)	1:190:A:ARG:H	1:191:A:TYR:H	16	0.13
(1,63)	1:190:A:ARG:H	1:191:A:TYR:H	27	0.13
(3,142)	1:332:A:GLN:N	1:305:A:LEU:O	26	0.12
(3,111)	1:265:A:LEU:N	1:262:A:VAL:O	6	0.12
(3,107)	1:259:A:LEU:N	1:255:A:GLU:O	22	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,59)	1:332:A:GLN:H	1:305:A:LEU:O	7	0.12
(3,59)	1:332:A:GLN:H	1:305:A:LEU:O	28	0.12
(3,49)	1:308:A:PHE:H	1:277:A:TRP:O	7	0.12
(3,48)	1:307:A:ILE:H	1:332:A:GLN:O	25	0.12
(3,37)	1:280:A:SER:H	1:215:A:TYR:O	7	0.12
(3,37)	1:280:A:SER:H	1:215:A:TYR:O	30	0.12
(3,33)	1:276:A:THR:H	1:219:A:GLU:O	15	0.12
(3,33)	1:276:A:THR:H	1:219:A:GLU:O	25	0.12
(3,33)	1:276:A:THR:H	1:219:A:GLU:O	27	0.12
(3,26)	1:261:A:LEU:H	1:257:A:ARG:O	11	0.12
(3,25)	1:260:A:ASP:H	1:256:A:LEU:O	24	0.12
(3,24)	1:259:A:LEU:H	1:255:A:GLU:O	11	0.12
(3,24)	1:259:A:LEU:H	1:255:A:GLU:O	18	0.12
(3,24)	1:259:A:LEU:H	1:255:A:GLU:O	28	0.12
(3,24)	1:259:A:LEU:H	1:255:A:GLU:O	30	0.12
(3,10)	1:219:A:GLU:H	1:276:A:THR:O	12	0.12
(3,10)	1:219:A:GLU:H	1:276:A:THR:O	14	0.12
(2,1)	1:255:A:GLU:OE1	2:500:A:ZN:ZN	21	0.12
(1,3071)	1:255:A:GLU:N	1:255:A:GLU:OE1	15	0.12
(1,3071)	1:255:A:GLU:N	1:255:A:GLU:OE1	20	0.12
(1,3070)	1:255:A:GLU:H	1:255:A:GLU:OE1	11	0.12
(1,2991)	1:376:A:ILE:HD11	1:372:A:ARG:HB2	11	0.12
(1,2991)	1:376:A:ILE:HD12	1:372:A:ARG:HB2	11	0.12
(1,2991)	1:376:A:ILE:HD13	1:372:A:ARG:HB2	11	0.12
(1,2862)	1:367:A:GLN:HG2	1:364:A:GLU:HA	21	0.12
(1,2815)	1:362:A:LEU:HD21	1:359:A:TRP:H	27	0.12
(1,2815)	1:362:A:LEU:HD22	1:359:A:TRP:H	27	0.12
(1,2815)	1:362:A:LEU:HD23	1:359:A:TRP:H	27	0.12
(1,2776)	1:360:A:ASP:HB3	1:360:A:ASP:H	1	0.12
(1,2775)	1:360:A:ASP:HA	1:359:A:TRP:HD1	29	0.12
(1,2772)	1:360:A:ASP:H	1:359:A:TRP:HB2	27	0.12
(1,2766)	1:359:A:TRP:H	1:358:A:PRO:HA	21	0.12
(1,2766)	1:359:A:TRP:H	1:358:A:PRO:HA	22	0.12
(1,2765)	1:359:A:TRP:HZ2	1:356:A:PHE:HZ	24	0.12
(1,2759)	1:359:A:TRP:HD1	1:362:A:LEU:HA	25	0.12
(1,2717)	1:356:A:PHE:HZ	1:358:A:PRO:HB2	12	0.12
(1,2717)	1:356:A:PHE:HZ	1:358:A:PRO:HB3	12	0.12
(1,2717)	1:356:A:PHE:HZ	1:358:A:PRO:HB2	28	0.12
(1,2717)	1:356:A:PHE:HZ	1:358:A:PRO:HB3	28	0.12
(1,2672)	1:351:A:ARG:HD3	1:345:A:TRP:HA	1	0.12
(1,2652)	1:349:A:VAL:HG11	1:345:A:TRP:HA	28	0.12
(1,2652)	1:349:A:VAL:HG12	1:345:A:TRP:HA	28	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2652)	1:349:A:VAL:HG13	1:345:A:TRP:HA	28	0.12
(1,2596)	1:347:A:THR:H	1:345:A:TRP:H	19	0.12
(1,2582)	1:346:A:ASP:H	1:344:A:CYS:H	26	0.12
(1,2552)	1:345:A:TRP:HD1	1:351:A:ARG:HD3	25	0.12
(1,2549)	1:345:A:TRP:HE1	1:345:A:TRP:HA	1	0.12
(1,2549)	1:345:A:TRP:HE1	1:345:A:TRP:HA	28	0.12
(1,2466)	1:340:A:GLU:H	1:340:A:GLU:HB3	1	0.12
(1,2466)	1:340:A:GLU:H	1:340:A:GLU:HB3	6	0.12
(1,2466)	1:340:A:GLU:H	1:340:A:GLU:HB3	11	0.12
(1,2466)	1:340:A:GLU:H	1:340:A:GLU:HB3	12	0.12
(1,2466)	1:340:A:GLU:H	1:340:A:GLU:HB3	18	0.12
(1,2466)	1:340:A:GLU:H	1:340:A:GLU:HB3	21	0.12
(1,2466)	1:340:A:GLU:H	1:340:A:GLU:HB3	30	0.12
(1,2381)	1:334:A:SER:HB3	1:333:A:VAL:HA	18	0.12
(1,2370)	1:333:A:VAL:H	1:332:A:GLN:HB3	12	0.12
(1,2370)	1:333:A:VAL:H	1:332:A:GLN:HB3	15	0.12
(1,2364)	1:333:A:VAL:HB	1:308:A:PHE:HA	15	0.12
(1,2332)	1:333:A:VAL:HG11	1:308:A:PHE:H	2	0.12
(1,2332)	1:333:A:VAL:HG12	1:308:A:PHE:H	2	0.12
(1,2332)	1:333:A:VAL:HG13	1:308:A:PHE:H	2	0.12
(1,2332)	1:333:A:VAL:HG11	1:308:A:PHE:H	3	0.12
(1,2332)	1:333:A:VAL:HG12	1:308:A:PHE:H	3	0.12
(1,2332)	1:333:A:VAL:HG13	1:308:A:PHE:H	3	0.12
(1,2332)	1:333:A:VAL:HG11	1:308:A:PHE:H	6	0.12
(1,2332)	1:333:A:VAL:HG12	1:308:A:PHE:H	6	0.12
(1,2332)	1:333:A:VAL:HG13	1:308:A:PHE:H	6	0.12
(1,2332)	1:333:A:VAL:HG11	1:308:A:PHE:H	13	0.12
(1,2332)	1:333:A:VAL:HG12	1:308:A:PHE:H	13	0.12
(1,2332)	1:333:A:VAL:HG13	1:308:A:PHE:H	13	0.12
(1,2298)	1:331:A:ALA:HB1	1:326:A:LEU:HB2	20	0.12
(1,2298)	1:331:A:ALA:HB2	1:326:A:LEU:HB2	20	0.12
(1,2298)	1:331:A:ALA:HB3	1:326:A:LEU:HB2	20	0.12
(1,2298)	1:331:A:ALA:HB1	1:326:A:LEU:HB2	22	0.12
(1,2298)	1:331:A:ALA:HB2	1:326:A:LEU:HB2	22	0.12
(1,2298)	1:331:A:ALA:HB3	1:326:A:LEU:HB2	22	0.12
(1,2284)	1:329:A:ALA:H	1:326:A:LEU:HG	15	0.12
(1,2284)	1:329:A:ALA:H	1:326:A:LEU:HG	28	0.12
(1,2164)	1:320:A:LYS:HD3	1:320:A:LYS:HA	5	0.12
(1,2159)	1:320:A:LYS:HD2	1:320:A:LYS:HA	20	0.12
(1,2157)	1:320:A:LYS:HA	1:323:A:LEU:H	4	0.12
(1,2115)	1:313:A:TYR:HE1	1:315:A:TYR:H	4	0.12
(1,2115)	1:313:A:TYR:HE2	1:315:A:TYR:H	4	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2104)	1:313:A:TYR:HD1	1:282:A:SER:H	20	0.12
(1,2104)	1:313:A:TYR:HD2	1:282:A:SER:H	20	0.12
(1,2093)	1:312:A:ILE:HD11	1:312:A:ILE:HA	11	0.12
(1,2093)	1:312:A:ILE:HD12	1:312:A:ILE:HA	11	0.12
(1,2093)	1:312:A:ILE:HD13	1:312:A:ILE:HA	11	0.12
(1,2083)	1:312:A:ILE:HG21	1:313:A:TYR:HA	4	0.12
(1,2083)	1:312:A:ILE:HG22	1:313:A:TYR:HA	4	0.12
(1,2083)	1:312:A:ILE:HG23	1:313:A:TYR:HA	4	0.12
(1,2062)	1:309:A:ALA:HB1	1:282:A:SER:HB2	20	0.12
(1,2062)	1:309:A:ALA:HB2	1:282:A:SER:HB2	20	0.12
(1,2062)	1:309:A:ALA:HB3	1:282:A:SER:HB2	20	0.12
(1,2051)	1:309:A:ALA:HB1	1:278:A:PHE:HA	11	0.12
(1,2051)	1:309:A:ALA:HB2	1:278:A:PHE:HA	11	0.12
(1,2051)	1:309:A:ALA:HB3	1:278:A:PHE:HA	11	0.12
(1,2051)	1:309:A:ALA:HB1	1:278:A:PHE:HA	18	0.12
(1,2051)	1:309:A:ALA:HB2	1:278:A:PHE:HA	18	0.12
(1,2051)	1:309:A:ALA:HB3	1:278:A:PHE:HA	18	0.12
(1,2051)	1:309:A:ALA:HB1	1:278:A:PHE:HA	25	0.12
(1,2051)	1:309:A:ALA:HB2	1:278:A:PHE:HA	25	0.12
(1,2051)	1:309:A:ALA:HB3	1:278:A:PHE:HA	25	0.12
(1,2023)	1:307:A:ILE:HB	1:308:A:PHE:HA	17	0.12
(1,2003)	1:307:A:ILE:H	1:305:A:LEU:HD11	9	0.12
(1,2003)	1:307:A:ILE:H	1:305:A:LEU:HD12	9	0.12
(1,2003)	1:307:A:ILE:H	1:305:A:LEU:HD13	9	0.12
(1,1998)	1:307:A:ILE:HD11	1:308:A:PHE:H	26	0.12
(1,1998)	1:307:A:ILE:HD12	1:308:A:PHE:H	26	0.12
(1,1998)	1:307:A:ILE:HD13	1:308:A:PHE:H	26	0.12
(1,1981)	1:305:A:LEU:HD11	1:275:A:VAL:HB	20	0.12
(1,1981)	1:305:A:LEU:HD12	1:275:A:VAL:HB	20	0.12
(1,1981)	1:305:A:LEU:HD13	1:275:A:VAL:HB	20	0.12
(1,1970)	1:305:A:LEU:HD21	1:258:A:PHE:HZ	7	0.12
(1,1970)	1:305:A:LEU:HD22	1:258:A:PHE:HZ	7	0.12
(1,1970)	1:305:A:LEU:HD23	1:258:A:PHE:HZ	7	0.12
(1,1937)	1:304:A:ARG:H	1:303:A:VAL:HB	6	0.12
(1,1937)	1:304:A:ARG:H	1:303:A:VAL:HB	19	0.12
(1,1937)	1:304:A:ARG:H	1:303:A:VAL:HB	27	0.12
(1,1927)	1:303:A:VAL:HG21	1:305:A:LEU:H	14	0.12
(1,1927)	1:303:A:VAL:HG22	1:305:A:LEU:H	14	0.12
(1,1927)	1:303:A:VAL:HG23	1:305:A:LEU:H	14	0.12
(1,1922)	1:303:A:VAL:H	1:304:A:ARG:H	2	0.12
(1,1922)	1:303:A:VAL:H	1:304:A:ARG:H	11	0.12
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD21	20	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD22	20	0.12
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD23	20	0.12
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD21	20	0.12
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD22	20	0.12
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD23	20	0.12
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD21	20	0.12
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD22	20	0.12
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD23	20	0.12
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG21	1:262:A:VAL:HG11	10	0.12
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG21	1:262:A:VAL:HG12	10	0.12
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG21	1:262:A:VAL:HG13	10	0.12
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG22	1:262:A:VAL:HG11	10	0.12
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG22	1:262:A:VAL:HG12	10	0.12
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG22	1:262:A:VAL:HG13	10	0.12
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG23	1:262:A:VAL:HG11	10	0.12
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG23	1:262:A:VAL:HG12	10	0.12
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG23	1:262:A:VAL:HG13	10	0.12
(1,1895)	1:303:A:VAL:HB	1:296:A:PHE:HE1	2	0.12
(1,1895)	1:303:A:VAL:HB	1:296:A:PHE:HE2	2	0.12
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG11	1:273:A:TYR:HA	30	0.12
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG12	1:273:A:TYR:HA	30	0.12
(1,1892)	1:303:A:VAL:HG13	1:273:A:TYR:HA	30	0.12
(1,1876)	1:302:A:HIS:HD2	1:303:A:VAL:HB	14	0.12
(1,1876)	1:302:A:HIS:HD2	1:303:A:VAL:HB	15	0.12
(1,1876)	1:302:A:HIS:HD2	1:303:A:VAL:HB	28	0.12
(1,1867)	1:302:A:HIS:HD2	1:300:A:ASN:HA	16	0.12
(1,1867)	1:302:A:HIS:HD2	1:300:A:ASN:HA	30	0.12
(1,1845)	1:299:A:GLU:H	1:298:A:GLN:HG2	7	0.12
(1,1834)	1:299:A:GLU:HG2	1:296:A:PHE:HD1	8	0.12
(1,1834)	1:299:A:GLU:HG2	1:296:A:PHE:HD2	8	0.12
(1,1834)	1:299:A:GLU:HG2	1:296:A:PHE:HD1	23	0.12
(1,1834)	1:299:A:GLU:HG2	1:296:A:PHE:HD2	23	0.12
(1,1829)	1:299:A:GLU:HG3	1:300:A:ASN:H	8	0.12
(1,1829)	1:299:A:GLU:HG3	1:300:A:ASN:H	17	0.12
(1,1829)	1:299:A:GLU:HG3	1:300:A:ASN:H	20	0.12
(1,1829)	1:299:A:GLU:HG3	1:300:A:ASN:H	28	0.12
(1,1818)	1:298:A:GLN:HE21	1:296:A:PHE:H	3	0.12
(1,1818)	1:298:A:GLN:HE21	1:296:A:PHE:H	24	0.12
(1,1778)	1:297:A:LEU:HD11	1:297:A:LEU:HA	16	0.12
(1,1778)	1:297:A:LEU:HD12	1:297:A:LEU:HA	16	0.12
(1,1778)	1:297:A:LEU:HD13	1:297:A:LEU:HA	16	0.12
(1,1778)	1:297:A:LEU:HD11	1:297:A:LEU:HA	27	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1778)	1:297:A:LEU:HD12	1:297:A:LEU:HA	27	0.12
(1,1778)	1:297:A:LEU:HD13	1:297:A:LEU:HA	27	0.12
(1,1768)	1:296:A:PHE:HE1	1:259:A:LEU:HD21	3	0.12
(1,1768)	1:296:A:PHE:HE1	1:259:A:LEU:HD22	3	0.12
(1,1768)	1:296:A:PHE:HE1	1:259:A:LEU:HD23	3	0.12
(1,1768)	1:296:A:PHE:HE2	1:259:A:LEU:HD21	3	0.12
(1,1768)	1:296:A:PHE:HE2	1:259:A:LEU:HD22	3	0.12
(1,1768)	1:296:A:PHE:HE2	1:259:A:LEU:HD23	3	0.12
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE1	1:275:A:VAL:HG21	17	0.12
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE1	1:275:A:VAL:HG22	17	0.12
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE1	1:275:A:VAL:HG23	17	0.12
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE2	1:275:A:VAL:HG21	17	0.12
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE2	1:275:A:VAL:HG22	17	0.12
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE2	1:275:A:VAL:HG23	17	0.12
(1,1738)	1:296:A:PHE:HE1	1:263:A:PRO:HD2	25	0.12
(1,1738)	1:296:A:PHE:HE1	1:263:A:PRO:HD3	25	0.12
(1,1738)	1:296:A:PHE:HE2	1:263:A:PRO:HD2	25	0.12
(1,1738)	1:296:A:PHE:HE2	1:263:A:PRO:HD3	25	0.12
(1,1646)	1:286:A:SER:H	1:289:A:CYS:HA	9	0.12
(1,1646)	1:286:A:SER:H	1:289:A:CYS:HA	12	0.12
(1,1641)	1:285:A:PHE:HE1	1:286:A:SER:HA	26	0.12
(1,1641)	1:285:A:PHE:HE2	1:286:A:SER:HA	26	0.12
(1,1617)	1:282:A:SER:H	1:309:A:ALA:HA	6	0.12
(1,1617)	1:282:A:SER:H	1:309:A:ALA:HA	18	0.12
(1,1609)	1:281:A:TRP:HE3	1:314:A:ASP:H	13	0.12
(1,1603)	1:281:A:TRP:HE3	1:281:A:TRP:HB2	1	0.12
(1,1603)	1:281:A:TRP:HE3	1:281:A:TRP:HB2	22	0.12
(1,1578)	1:279:A:ILE:HB	1:309:A:ALA:HA	19	0.12
(1,1578)	1:279:A:ILE:HB	1:309:A:ALA:HA	23	0.12
(1,1562)	1:279:A:ILE:HG13	1:309:A:ALA:HA	3	0.12
(1,1562)	1:279:A:ILE:HG13	1:309:A:ALA:HA	29	0.12
(1,1560)	1:279:A:ILE:HG12	1:309:A:ALA:HA	20	0.12
(1,1557)	1:279:A:ILE:H	1:308:A:PHE:H	17	0.12
(1,1557)	1:279:A:ILE:H	1:308:A:PHE:H	24	0.12
(1,1534)	1:277:A:TRP:HZ2	1:258:A:PHE:HA	8	0.12
(1,1523)	1:277:A:TRP:HZ2	1:238:A:LEU:HD21	11	0.12
(1,1523)	1:277:A:TRP:HZ2	1:238:A:LEU:HD22	11	0.12
(1,1523)	1:277:A:TRP:HZ2	1:238:A:LEU:HD23	11	0.12
(1,1491)	1:277:A:TRP:HE1	1:305:A:LEU:HG	6	0.12
(1,1491)	1:277:A:TRP:HE1	1:305:A:LEU:HG	26	0.12
(1,1486)	1:276:A:THR:HG21	1:308:A:PHE:H	19	0.12
(1,1486)	1:276:A:THR:HG22	1:308:A:PHE:H	19	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1486)	1:276:A:THR:HG23	1:308:A:PHE:H	19	0.12
(1,1464)	1:275:A:VAL:HB	1:305:A:LEU:HA	2	0.12
(1,1464)	1:275:A:VAL:HB	1:305:A:LEU:HA	6	0.12
(1,1444)	1:275:A:VAL:HB	1:305:A:LEU:HD21	12	0.12
(1,1444)	1:275:A:VAL:HB	1:305:A:LEU:HD22	12	0.12
(1,1444)	1:275:A:VAL:HB	1:305:A:LEU:HD23	12	0.12
(1,1444)	1:275:A:VAL:HB	1:305:A:LEU:HD21	15	0.12
(1,1444)	1:275:A:VAL:HB	1:305:A:LEU:HD22	15	0.12
(1,1444)	1:275:A:VAL:HB	1:305:A:LEU:HD23	15	0.12
(1,1403)	1:273:A:TYR:HA	1:221:A:GLU:HA	28	0.12
(1,1394)	1:273:A:TYR:HB2	1:220:A:VAL:HG21	2	0.12
(1,1394)	1:273:A:TYR:HB2	1:220:A:VAL:HG22	2	0.12
(1,1394)	1:273:A:TYR:HB2	1:220:A:VAL:HG23	2	0.12
(1,1380)	1:273:A:TYR:HA	1:223:A:LEU:HD21	2	0.12
(1,1380)	1:273:A:TYR:HA	1:223:A:LEU:HD22	2	0.12
(1,1380)	1:273:A:TYR:HA	1:223:A:LEU:HD23	2	0.12
(1,1380)	1:273:A:TYR:HA	1:223:A:LEU:HD21	3	0.12
(1,1380)	1:273:A:TYR:HA	1:223:A:LEU:HD22	3	0.12
(1,1380)	1:273:A:TYR:HA	1:223:A:LEU:HD23	3	0.12
(1,1380)	1:273:A:TYR:HA	1:223:A:LEU:HD21	15	0.12
(1,1380)	1:273:A:TYR:HA	1:223:A:LEU:HD22	15	0.12
(1,1380)	1:273:A:TYR:HA	1:223:A:LEU:HD23	15	0.12
(1,1373)	1:273:A:TYR:HA	1:221:A:GLU:HB2	11	0.12
(1,1373)	1:273:A:TYR:HA	1:221:A:GLU:HB2	27	0.12
(1,1356)	1:272:A:ILE:HA	1:228:A:TRP:HZ3	7	0.12
(1,1356)	1:272:A:ILE:HA	1:228:A:TRP:HZ3	12	0.12
(1,1356)	1:272:A:ILE:HA	1:228:A:TRP:HZ3	24	0.12
(1,1327)	1:271:A:GLN:HG2	1:268:A:ASP:HB2	18	0.12
(1,1327)	1:271:A:GLN:HG2	1:268:A:ASP:HB2	20	0.12
(1,1229)	1:266:A:GLN:HB3	1:266:A:GLN:H	25	0.12
(1,1205)	1:265:A:LEU:HG	1:267:A:LEU:HD21	15	0.12
(1,1205)	1:265:A:LEU:HG	1:267:A:LEU:HD22	15	0.12
(1,1205)	1:265:A:LEU:HG	1:267:A:LEU:HD23	15	0.12
(1,1185)	1:264:A:SER:H	1:261:A:LEU:HA	1	0.12
(1,1185)	1:264:A:SER:H	1:261:A:LEU:HA	10	0.12
(1,1185)	1:264:A:SER:H	1:261:A:LEU:HA	21	0.12
(1,1185)	1:264:A:SER:H	1:261:A:LEU:HA	25	0.12
(1,1169)	1:262:A:VAL:HG21	1:259:A:LEU:HB2	27	0.12
(1,1169)	1:262:A:VAL:HG22	1:259:A:LEU:HB2	27	0.12
(1,1169)	1:262:A:VAL:HG23	1:259:A:LEU:HB2	27	0.12
(1,1155)	1:262:A:VAL:HA	1:265:A:LEU:HB3	1	0.12
(1,1155)	1:262:A:VAL:HA	1:265:A:LEU:HB3	14	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1155)	1:262:A:VAL:HA	1:265:A:LEU:HB3	18	0.12
(1,1155)	1:262:A:VAL:HA	1:265:A:LEU:HB3	19	0.12
(1,1155)	1:262:A:VAL:HA	1:265:A:LEU:HB3	20	0.12
(1,1155)	1:262:A:VAL:HA	1:265:A:LEU:HB3	23	0.12
(1,1155)	1:262:A:VAL:HA	1:265:A:LEU:HB3	25	0.12
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG11	1:265:A:LEU:HD21	29	0.12
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG11	1:265:A:LEU:HD22	29	0.12
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG11	1:265:A:LEU:HD23	29	0.12
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG12	1:265:A:LEU:HD21	29	0.12
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG12	1:265:A:LEU:HD22	29	0.12
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG12	1:265:A:LEU:HD23	29	0.12
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG13	1:265:A:LEU:HD21	29	0.12
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG13	1:265:A:LEU:HD22	29	0.12
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG13	1:265:A:LEU:HD23	29	0.12
(1,1117)	1:261:A:LEU:HD11	1:262:A:VAL:H	11	0.12
(1,1117)	1:261:A:LEU:HD12	1:262:A:VAL:H	11	0.12
(1,1117)	1:261:A:LEU:HD13	1:262:A:VAL:H	11	0.12
(1,1117)	1:261:A:LEU:HD11	1:262:A:VAL:H	19	0.12
(1,1117)	1:261:A:LEU:HD12	1:262:A:VAL:H	19	0.12
(1,1117)	1:261:A:LEU:HD13	1:262:A:VAL:H	19	0.12
(1,1101)	1:261:A:LEU:HD21	1:238:A:LEU:HB2	1	0.12
(1,1101)	1:261:A:LEU:HD22	1:238:A:LEU:HB2	1	0.12
(1,1101)	1:261:A:LEU:HD23	1:238:A:LEU:HB2	1	0.12
(1,1101)	1:261:A:LEU:HD21	1:238:A:LEU:HB2	12	0.12
(1,1101)	1:261:A:LEU:HD22	1:238:A:LEU:HB2	12	0.12
(1,1101)	1:261:A:LEU:HD23	1:238:A:LEU:HB2	12	0.12
(1,1101)	1:261:A:LEU:HD21	1:238:A:LEU:HB2	26	0.12
(1,1101)	1:261:A:LEU:HD22	1:238:A:LEU:HB2	26	0.12
(1,1101)	1:261:A:LEU:HD23	1:238:A:LEU:HB2	26	0.12
(1,1100)	1:261:A:LEU:HD11	1:238:A:LEU:HB3	7	0.12
(1,1100)	1:261:A:LEU:HD12	1:238:A:LEU:HB3	7	0.12
(1,1100)	1:261:A:LEU:HD13	1:238:A:LEU:HB3	7	0.12
(1,1100)	1:261:A:LEU:HD11	1:238:A:LEU:HB3	11	0.12
(1,1100)	1:261:A:LEU:HD12	1:238:A:LEU:HB3	11	0.12
(1,1100)	1:261:A:LEU:HD13	1:238:A:LEU:HB3	11	0.12
(1,1100)	1:261:A:LEU:HD11	1:238:A:LEU:HB3	15	0.12
(1,1100)	1:261:A:LEU:HD12	1:238:A:LEU:HB3	15	0.12
(1,1100)	1:261:A:LEU:HD13	1:238:A:LEU:HB3	15	0.12
(1,1079)	1:260:A:ASP:H	1:259:A:LEU:HG	7	0.12
(1,1006)	1:258:A:PHE:HE1	1:261:A:LEU:H	25	0.12
(1,1006)	1:258:A:PHE:HE2	1:261:A:LEU:H	25	0.12
(1,995)	1:258:A:PHE:HD1	1:255:A:GLU:HA	3	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,995)	1:258:A:PHE:HD2	1:255:A:GLU:HA	3	0.12
(1,995)	1:258:A:PHE:HD1	1:255:A:GLU:HA	5	0.12
(1,995)	1:258:A:PHE:HD2	1:255:A:GLU:HA	5	0.12
(1,959)	1:256:A:LEU:HD11	1:292:A:GLU:HB3	11	0.12
(1,959)	1:256:A:LEU:HD12	1:292:A:GLU:HB3	11	0.12
(1,959)	1:256:A:LEU:HD13	1:292:A:GLU:HB3	11	0.12
(1,956)	1:256:A:LEU:H	1:254:A:ALA:H	22	0.12
(1,956)	1:256:A:LEU:H	1:254:A:ALA:H	25	0.12
(1,954)	1:256:A:LEU:HD11	1:259:A:LEU:H	19	0.12
(1,954)	1:256:A:LEU:HD12	1:259:A:LEU:H	19	0.12
(1,954)	1:256:A:LEU:HD13	1:259:A:LEU:H	19	0.12
(1,835)	1:241:A:GLU:H	1:240:A:ASN:HB2	2	0.12
(1,816)	1:238:A:LEU:HD11	1:216:A:LEU:HA	1	0.12
(1,816)	1:238:A:LEU:HD12	1:216:A:LEU:HA	1	0.12
(1,816)	1:238:A:LEU:HD13	1:216:A:LEU:HA	1	0.12
(1,816)	1:238:A:LEU:HD21	1:216:A:LEU:HA	1	0.12
(1,816)	1:238:A:LEU:HD22	1:216:A:LEU:HA	1	0.12
(1,816)	1:238:A:LEU:HD23	1:216:A:LEU:HA	1	0.12
(1,816)	1:238:A:LEU:HD11	1:216:A:LEU:HA	22	0.12
(1,816)	1:238:A:LEU:HD12	1:216:A:LEU:HA	22	0.12
(1,816)	1:238:A:LEU:HD13	1:216:A:LEU:HA	22	0.12
(1,816)	1:238:A:LEU:HD21	1:216:A:LEU:HA	22	0.12
(1,816)	1:238:A:LEU:HD22	1:216:A:LEU:HA	22	0.12
(1,816)	1:238:A:LEU:HD23	1:216:A:LEU:HA	22	0.12
(1,792)	1:237:A:PHE:HD1	1:238:A:LEU:HA	23	0.12
(1,792)	1:237:A:PHE:HD2	1:238:A:LEU:HA	23	0.12
(1,751)	1:235:A:MET:H	1:235:A:MET:HG3	21	0.12
(1,727)	1:234:A:HIS:HD2	1:235:A:MET:H	3	0.12
(1,727)	1:234:A:HIS:HD2	1:235:A:MET:H	17	0.12
(1,719)	1:234:A:HIS:H	1:265:A:LEU:HD11	5	0.12
(1,719)	1:234:A:HIS:H	1:265:A:LEU:HD12	5	0.12
(1,719)	1:234:A:HIS:H	1:265:A:LEU:HD13	5	0.12
(1,660)	1:230:A:LEU:HD21	1:219:A:GLU:HB3	4	0.12
(1,660)	1:230:A:LEU:HD22	1:219:A:GLU:HB3	4	0.12
(1,660)	1:230:A:LEU:HD23	1:219:A:GLU:HB3	4	0.12
(1,660)	1:230:A:LEU:HD21	1:219:A:GLU:HB3	8	0.12
(1,660)	1:230:A:LEU:HD22	1:219:A:GLU:HB3	8	0.12
(1,660)	1:230:A:LEU:HD23	1:219:A:GLU:HB3	8	0.12
(1,660)	1:230:A:LEU:HD21	1:219:A:GLU:HB3	9	0.12
(1,660)	1:230:A:LEU:HD22	1:219:A:GLU:HB3	9	0.12
(1,660)	1:230:A:LEU:HD23	1:219:A:GLU:HB3	9	0.12
(1,660)	1:230:A:LEU:HD21	1:219:A:GLU:HB3	27	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,660)	1:230:A:LEU:HD22	1:219:A:GLU:HB3	27	0.12
(1,660)	1:230:A:LEU:HD23	1:219:A:GLU:HB3	27	0.12
(1,574)	1:228:A:TRP:HE3	1:221:A:GLU:HG3	8	0.12
(1,566)	1:228:A:TRP:HH2	1:223:A:LEU:HD21	24	0.12
(1,566)	1:228:A:TRP:HH2	1:223:A:LEU:HD22	24	0.12
(1,566)	1:228:A:TRP:HH2	1:223:A:LEU:HD23	24	0.12
(1,557)	1:227:A:THR:HB	1:228:A:TRP:H	24	0.12
(1,523)	1:225:A:ASN:HB2	1:225:A:ASN:HD22	11	0.12
(1,523)	1:225:A:ASN:HB2	1:225:A:ASN:HD22	20	0.12
(1,510)	1:224:A:ASP:H	1:227:A:THR:HG21	16	0.12
(1,510)	1:224:A:ASP:H	1:227:A:THR:HG22	16	0.12
(1,510)	1:224:A:ASP:H	1:227:A:THR:HG23	16	0.12
(1,510)	1:224:A:ASP:H	1:227:A:THR:HG21	22	0.12
(1,510)	1:224:A:ASP:H	1:227:A:THR:HG22	22	0.12
(1,510)	1:224:A:ASP:H	1:227:A:THR:HG23	22	0.12
(1,510)	1:224:A:ASP:H	1:227:A:THR:HG21	30	0.12
(1,510)	1:224:A:ASP:H	1:227:A:THR:HG22	30	0.12
(1,510)	1:224:A:ASP:H	1:227:A:THR:HG23	30	0.12
(1,335)	1:217:A:CYS:H	1:216:A:LEU:HB3	8	0.12
(1,335)	1:217:A:CYS:H	1:216:A:LEU:HB3	18	0.12
(1,335)	1:217:A:CYS:H	1:216:A:LEU:HB3	19	0.12
(1,335)	1:217:A:CYS:H	1:216:A:LEU:HB3	23	0.12
(1,313)	1:216:A:LEU:HD21	1:218:A:TYR:HB2	30	0.12
(1,313)	1:216:A:LEU:HD22	1:218:A:TYR:HB2	30	0.12
(1,313)	1:216:A:LEU:HD23	1:218:A:TYR:HB2	30	0.12
(1,311)	1:216:A:LEU:HG	1:277:A:TRP:HD1	22	0.12
(1,283)	1:216:A:LEU:HD11	1:258:A:PHE:HA	24	0.12
(1,283)	1:216:A:LEU:HD12	1:258:A:PHE:HA	24	0.12
(1,283)	1:216:A:LEU:HD13	1:258:A:PHE:HA	24	0.12
(1,278)	1:216:A:LEU:HD11	1:258:A:PHE:HB3	21	0.12
(1,278)	1:216:A:LEU:HD12	1:258:A:PHE:HB3	21	0.12
(1,278)	1:216:A:LEU:HD13	1:258:A:PHE:HB3	21	0.12
(1,254)	1:215:A:TYR:H	1:216:A:LEU:HD21	16	0.12
(1,254)	1:215:A:TYR:H	1:216:A:LEU:HD22	16	0.12
(1,254)	1:215:A:TYR:H	1:216:A:LEU:HD23	16	0.12
(1,254)	1:215:A:TYR:H	1:216:A:LEU:HD21	21	0.12
(1,254)	1:215:A:TYR:H	1:216:A:LEU:HD22	21	0.12
(1,254)	1:215:A:TYR:H	1:216:A:LEU:HD23	21	0.12
(1,143)	1:194:A:ASP:HB2	1:193:A:MET:HA	3	0.12
(1,143)	1:194:A:ASP:HB2	1:193:A:MET:HA	6	0.12
(1,106)	1:192:A:LEU:HD21	1:191:A:TYR:HB3	25	0.12
(1,106)	1:192:A:LEU:HD22	1:191:A:TYR:HB3	25	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,106)	1:192:A:LEU:HD23	1:191:A:TYR:HB3	25	0.12
(1,98)	1:192:A:LEU:H	1:192:A:LEU:HG	4	0.12
(1,97)	1:192:A:LEU:H	1:192:A:LEU:HD11	23	0.12
(1,97)	1:192:A:LEU:H	1:192:A:LEU:HD12	23	0.12
(1,97)	1:192:A:LEU:H	1:192:A:LEU:HD13	23	0.12
(1,85)	1:192:A:LEU:HD21	1:348:A:PHE:H	8	0.12
(1,85)	1:192:A:LEU:HD22	1:348:A:PHE:H	8	0.12
(1,85)	1:192:A:LEU:HD23	1:348:A:PHE:H	8	0.12
(1,85)	1:192:A:LEU:HD21	1:348:A:PHE:H	27	0.12
(1,85)	1:192:A:LEU:HD22	1:348:A:PHE:H	27	0.12
(1,85)	1:192:A:LEU:HD23	1:348:A:PHE:H	27	0.12
(1,69)	1:191:A:TYR:H	1:237:A:PHE:HZ	18	0.12
(1,69)	1:191:A:TYR:H	1:237:A:PHE:HZ	29	0.12
(1,63)	1:190:A:ARG:H	1:191:A:TYR:H	7	0.12
(1,63)	1:190:A:ARG:H	1:191:A:TYR:H	13	0.12
(1,59)	1:190:A:ARG:HB2	1:190:A:ARG:H	6	0.12
(1,59)	1:190:A:ARG:HB2	1:190:A:ARG:H	10	0.12
(3,152)	1:348:A:PHE:N	1:344:A:CYS:O	19	0.11
(3,120)	1:280:A:SER:N	1:215:A:TYR:O	22	0.11
(3,120)	1:280:A:SER:N	1:215:A:TYR:O	28	0.11
(3,110)	1:264:A:SER:N	1:261:A:LEU:O	10	0.11
(3,110)	1:264:A:SER:N	1:261:A:LEU:O	18	0.11
(3,107)	1:259:A:LEU:N	1:255:A:GLU:O	23	0.11
(3,104)	1:235:A:MET:N	1:232:A:ASP:O	24	0.11
(3,78)	1:372:A:ARG:H	1:368:A:ALA:O	26	0.11
(3,59)	1:332:A:GLN:H	1:305:A:LEU:O	24	0.11
(3,59)	1:332:A:GLN:H	1:305:A:LEU:O	25	0.11
(3,56)	1:326:A:LEU:H	1:322:A:ALA:O	9	0.11
(3,50)	1:309:A:ALA:H	1:334:A:SER:O	1	0.11
(3,50)	1:309:A:ALA:H	1:334:A:SER:O	7	0.11
(3,50)	1:309:A:ALA:H	1:334:A:SER:O	25	0.11
(3,50)	1:309:A:ALA:H	1:334:A:SER:O	27	0.11
(3,49)	1:308:A:PHE:H	1:277:A:TRP:O	14	0.11
(3,43)	1:298:A:GLN:H	1:294:A:ARG:O	9	0.11
(3,37)	1:280:A:SER:H	1:215:A:TYR:O	11	0.11
(3,37)	1:280:A:SER:H	1:215:A:TYR:O	12	0.11
(3,33)	1:276:A:THR:H	1:219:A:GLU:O	19	0.11
(3,26)	1:261:A:LEU:H	1:257:A:ARG:O	17	0.11
(3,25)	1:260:A:ASP:H	1:256:A:LEU:O	25	0.11
(3,25)	1:260:A:ASP:H	1:256:A:LEU:O	29	0.11
(3,24)	1:259:A:LEU:H	1:255:A:GLU:O	4	0.11
(3,24)	1:259:A:LEU:H	1:255:A:GLU:O	12	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,24)	1:259:A:LEU:H	1:255:A:GLU:O	19	0.11
(3,24)	1:259:A:LEU:H	1:255:A:GLU:O	20	0.11
(3,16)	1:229:A:VAL:H	1:222:A:ARG:O	17	0.11
(3,16)	1:229:A:VAL:H	1:222:A:ARG:O	22	0.11
(3,16)	1:229:A:VAL:H	1:222:A:ARG:O	30	0.11
(3,13)	1:223:A:LEU:H	1:272:A:ILE:O	25	0.11
(3,10)	1:219:A:GLU:H	1:276:A:THR:O	10	0.11
(3,10)	1:219:A:GLU:H	1:276:A:THR:O	23	0.11
(1,3070)	1:255:A:GLU:H	1:255:A:GLU:OE1	23	0.11
(1,3039)	1:379:A:ASN:HD22	1:379:A:ASN:HA	15	0.11
(1,3038)	1:379:A:ASN:HD22	1:379:A:ASN:HD21	30	0.11
(1,2867)	1:367:A:GLN:HG3	1:364:A:GLU:HA	19	0.11
(1,2798)	1:362:A:LEU:HD11	1:356:A:PHE:HZ	1	0.11
(1,2798)	1:362:A:LEU:HD12	1:356:A:PHE:HZ	1	0.11
(1,2798)	1:362:A:LEU:HD13	1:356:A:PHE:HZ	1	0.11
(1,2788)	1:361:A:GLY:H	1:360:A:ASP:HA	21	0.11
(1,2776)	1:360:A:ASP:HB3	1:360:A:ASP:H	29	0.11
(1,2775)	1:360:A:ASP:HA	1:359:A:TRP:HD1	14	0.11
(1,2766)	1:359:A:TRP:H	1:358:A:PRO:HA	1	0.11
(1,2766)	1:359:A:TRP:H	1:358:A:PRO:HA	14	0.11
(1,2766)	1:359:A:TRP:H	1:358:A:PRO:HA	24	0.11
(1,2765)	1:359:A:TRP:HZ2	1:356:A:PHE:HZ	14	0.11
(1,2759)	1:359:A:TRP:HD1	1:362:A:LEU:HA	8	0.11
(1,2759)	1:359:A:TRP:HD1	1:362:A:LEU:HA	19	0.11
(1,2737)	1:357:A:GLN:HE22	1:357:A:GLN:HG2	6	0.11
(1,2737)	1:357:A:GLN:HE22	1:357:A:GLN:HG2	22	0.11
(1,2690)	1:354:A:CYS:HB3	1:345:A:TRP:HZ2	26	0.11
(1,2672)	1:351:A:ARG:HD3	1:345:A:TRP:HA	22	0.11
(1,2582)	1:346:A:ASP:H	1:344:A:CYS:H	25	0.11
(1,2552)	1:345:A:TRP:HD1	1:351:A:ARG:HD3	29	0.11
(1,2549)	1:345:A:TRP:HE1	1:345:A:TRP:HA	13	0.11
(1,2466)	1:340:A:GLU:H	1:340:A:GLU:HB3	5	0.11
(1,2466)	1:340:A:GLU:H	1:340:A:GLU:HB3	10	0.11
(1,2431)	1:337:A:THR:H	1:340:A:GLU:HA	9	0.11
(1,2366)	1:333:A:VAL:H	1:327:A:ARG:HB3	15	0.11
(1,2364)	1:333:A:VAL:HB	1:308:A:PHE:HA	8	0.11
(1,2359)	1:333:A:VAL:H	1:332:A:GLN:HG3	11	0.11
(1,2346)	1:333:A:VAL:HG21	1:307:A:ILE:HD11	2	0.11
(1,2346)	1:333:A:VAL:HG21	1:307:A:ILE:HD12	2	0.11
(1,2346)	1:333:A:VAL:HG21	1:307:A:ILE:HD13	2	0.11
(1,2346)	1:333:A:VAL:HG22	1:307:A:ILE:HD11	2	0.11
(1,2346)	1:333:A:VAL:HG22	1:307:A:ILE:HD12	2	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2346)	1:333:A:VAL:HG22	1:307:A:ILE:HD13	2	0.11
(1,2346)	1:333:A:VAL:HG23	1:307:A:ILE:HD11	2	0.11
(1,2346)	1:333:A:VAL:HG23	1:307:A:ILE:HD12	2	0.11
(1,2346)	1:333:A:VAL:HG23	1:307:A:ILE:HD13	2	0.11
(1,2332)	1:333:A:VAL:HG11	1:308:A:PHE:H	28	0.11
(1,2332)	1:333:A:VAL:HG12	1:308:A:PHE:H	28	0.11
(1,2332)	1:333:A:VAL:HG13	1:308:A:PHE:H	28	0.11
(1,2298)	1:331:A:ALA:HB1	1:326:A:LEU:HB2	1	0.11
(1,2298)	1:331:A:ALA:HB2	1:326:A:LEU:HB2	1	0.11
(1,2298)	1:331:A:ALA:HB3	1:326:A:LEU:HB2	1	0.11
(1,2292)	1:330:A:GLY:H	1:327:A:ARG:HA	3	0.11
(1,2275)	1:328:A:ASP:H	1:330:A:GLY:H	26	0.11
(1,2159)	1:320:A:LYS:HD2	1:320:A:LYS:HA	22	0.11
(1,2051)	1:309:A:ALA:HB1	1:278:A:PHE:HA	24	0.11
(1,2051)	1:309:A:ALA:HB2	1:278:A:PHE:HA	24	0.11
(1,2051)	1:309:A:ALA:HB3	1:278:A:PHE:HA	24	0.11
(1,2023)	1:307:A:ILE:HB	1:308:A:PHE:HA	19	0.11
(1,2003)	1:307:A:ILE:H	1:305:A:LEU:HD11	30	0.11
(1,2003)	1:307:A:ILE:H	1:305:A:LEU:HD12	30	0.11
(1,2003)	1:307:A:ILE:H	1:305:A:LEU:HD13	30	0.11
(1,1998)	1:307:A:ILE:HD11	1:308:A:PHE:H	1	0.11
(1,1998)	1:307:A:ILE:HD12	1:308:A:PHE:H	1	0.11
(1,1998)	1:307:A:ILE:HD13	1:308:A:PHE:H	1	0.11
(1,1981)	1:305:A:LEU:HD11	1:275:A:VAL:HB	23	0.11
(1,1981)	1:305:A:LEU:HD12	1:275:A:VAL:HB	23	0.11
(1,1981)	1:305:A:LEU:HD13	1:275:A:VAL:HB	23	0.11
(1,1970)	1:305:A:LEU:HD21	1:258:A:PHE:HZ	1	0.11
(1,1970)	1:305:A:LEU:HD22	1:258:A:PHE:HZ	1	0.11
(1,1970)	1:305:A:LEU:HD23	1:258:A:PHE:HZ	1	0.11
(1,1970)	1:305:A:LEU:HD21	1:258:A:PHE:HZ	3	0.11
(1,1970)	1:305:A:LEU:HD22	1:258:A:PHE:HZ	3	0.11
(1,1970)	1:305:A:LEU:HD23	1:258:A:PHE:HZ	3	0.11
(1,1970)	1:305:A:LEU:HD21	1:258:A:PHE:HZ	5	0.11
(1,1970)	1:305:A:LEU:HD22	1:258:A:PHE:HZ	5	0.11
(1,1970)	1:305:A:LEU:HD23	1:258:A:PHE:HZ	5	0.11
(1,1970)	1:305:A:LEU:HD21	1:258:A:PHE:HZ	17	0.11
(1,1970)	1:305:A:LEU:HD22	1:258:A:PHE:HZ	17	0.11
(1,1970)	1:305:A:LEU:HD23	1:258:A:PHE:HZ	17	0.11
(1,1970)	1:305:A:LEU:HD21	1:258:A:PHE:HZ	18	0.11
(1,1970)	1:305:A:LEU:HD22	1:258:A:PHE:HZ	18	0.11
(1,1970)	1:305:A:LEU:HD23	1:258:A:PHE:HZ	18	0.11
(1,1970)	1:305:A:LEU:HD21	1:258:A:PHE:HZ	26	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1970)	1:305:A:LEU:HD22	1:258:A:PHE:HZ	26	0.11
(1,1970)	1:305:A:LEU:HD23	1:258:A:PHE:HZ	26	0.11
(1,1962)	1:305:A:LEU:HD21	1:297:A:LEU:HG	26	0.11
(1,1962)	1:305:A:LEU:HD22	1:297:A:LEU:HG	26	0.11
(1,1962)	1:305:A:LEU:HD23	1:297:A:LEU:HG	26	0.11
(1,1946)	1:305:A:LEU:HD11	1:306:A:ARG:HA	21	0.11
(1,1946)	1:305:A:LEU:HD12	1:306:A:ARG:HA	21	0.11
(1,1946)	1:305:A:LEU:HD13	1:306:A:ARG:HA	21	0.11
(1,1946)	1:305:A:LEU:HD11	1:306:A:ARG:HA	24	0.11
(1,1946)	1:305:A:LEU:HD12	1:306:A:ARG:HA	24	0.11
(1,1946)	1:305:A:LEU:HD13	1:306:A:ARG:HA	24	0.11
(1,1937)	1:304:A:ARG:H	1:303:A:VAL:HB	12	0.11
(1,1927)	1:303:A:VAL:HG21	1:305:A:LEU:H	21	0.11
(1,1927)	1:303:A:VAL:HG22	1:305:A:LEU:H	21	0.11
(1,1927)	1:303:A:VAL:HG23	1:305:A:LEU:H	21	0.11
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG21	1:262:A:VAL:HG11	9	0.11
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG21	1:262:A:VAL:HG12	9	0.11
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG21	1:262:A:VAL:HG13	9	0.11
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG22	1:262:A:VAL:HG11	9	0.11
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG22	1:262:A:VAL:HG12	9	0.11
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG22	1:262:A:VAL:HG13	9	0.11
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG23	1:262:A:VAL:HG11	9	0.11
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG23	1:262:A:VAL:HG12	9	0.11
(1,1906)	1:303:A:VAL:HG23	1:262:A:VAL:HG13	9	0.11
(1,1895)	1:303:A:VAL:HB	1:296:A:PHE:HE1	1	0.11
(1,1895)	1:303:A:VAL:HB	1:296:A:PHE:HE2	1	0.11
(1,1895)	1:303:A:VAL:HB	1:296:A:PHE:HE1	9	0.11
(1,1895)	1:303:A:VAL:HB	1:296:A:PHE:HE2	9	0.11
(1,1895)	1:303:A:VAL:HB	1:296:A:PHE:HE1	17	0.11
(1,1895)	1:303:A:VAL:HB	1:296:A:PHE:HE2	17	0.11
(1,1895)	1:303:A:VAL:HB	1:296:A:PHE:HE1	22	0.11
(1,1895)	1:303:A:VAL:HB	1:296:A:PHE:HE2	22	0.11
(1,1881)	1:303:A:VAL:HG11	1:273:A:TYR:HB3	29	0.11
(1,1881)	1:303:A:VAL:HG12	1:273:A:TYR:HB3	29	0.11
(1,1881)	1:303:A:VAL:HG13	1:273:A:TYR:HB3	29	0.11
(1,1867)	1:302:A:HIS:HD2	1:300:A:ASN:HA	27	0.11
(1,1845)	1:299:A:GLU:H	1:298:A:GLN:HG2	25	0.11
(1,1829)	1:299:A:GLU:HG3	1:300:A:ASN:H	10	0.11
(1,1829)	1:299:A:GLU:HG3	1:300:A:ASN:H	25	0.11
(1,1829)	1:299:A:GLU:HG3	1:300:A:ASN:H	27	0.11
(1,1829)	1:299:A:GLU:HG3	1:300:A:ASN:H	29	0.11
(1,1818)	1:298:A:GLN:HE21	1:296:A:PHE:H	8	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1818)	1:298:A:GLN:HE21	1:296:A:PHE:H	26	0.11
(1,1778)	1:297:A:LEU:HD11	1:297:A:LEU:HA	6	0.11
(1,1778)	1:297:A:LEU:HD12	1:297:A:LEU:HA	6	0.11
(1,1778)	1:297:A:LEU:HD13	1:297:A:LEU:HA	6	0.11
(1,1778)	1:297:A:LEU:HD11	1:297:A:LEU:HA	15	0.11
(1,1778)	1:297:A:LEU:HD12	1:297:A:LEU:HA	15	0.11
(1,1778)	1:297:A:LEU:HD13	1:297:A:LEU:HA	15	0.11
(1,1778)	1:297:A:LEU:HD11	1:297:A:LEU:HA	17	0.11
(1,1778)	1:297:A:LEU:HD12	1:297:A:LEU:HA	17	0.11
(1,1778)	1:297:A:LEU:HD13	1:297:A:LEU:HA	17	0.11
(1,1778)	1:297:A:LEU:HD11	1:297:A:LEU:HA	20	0.11
(1,1778)	1:297:A:LEU:HD12	1:297:A:LEU:HA	20	0.11
(1,1778)	1:297:A:LEU:HD13	1:297:A:LEU:HA	20	0.11
(1,1778)	1:297:A:LEU:HD11	1:297:A:LEU:HA	24	0.11
(1,1778)	1:297:A:LEU:HD12	1:297:A:LEU:HA	24	0.11
(1,1778)	1:297:A:LEU:HD13	1:297:A:LEU:HA	24	0.11
(1,1778)	1:297:A:LEU:HD11	1:297:A:LEU:HA	29	0.11
(1,1778)	1:297:A:LEU:HD12	1:297:A:LEU:HA	29	0.11
(1,1778)	1:297:A:LEU:HD13	1:297:A:LEU:HA	29	0.11
(1,1748)	1:296:A:PHE:HE1	1:297:A:LEU:HD21	11	0.11
(1,1748)	1:296:A:PHE:HE1	1:297:A:LEU:HD22	11	0.11
(1,1748)	1:296:A:PHE:HE1	1:297:A:LEU:HD23	11	0.11
(1,1748)	1:296:A:PHE:HE2	1:297:A:LEU:HD21	11	0.11
(1,1748)	1:296:A:PHE:HE2	1:297:A:LEU:HD22	11	0.11
(1,1748)	1:296:A:PHE:HE2	1:297:A:LEU:HD23	11	0.11
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE1	1:275:A:VAL:HG21	10	0.11
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE1	1:275:A:VAL:HG22	10	0.11
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE1	1:275:A:VAL:HG23	10	0.11
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE2	1:275:A:VAL:HG21	10	0.11
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE2	1:275:A:VAL:HG22	10	0.11
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE2	1:275:A:VAL:HG23	10	0.11
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE1	1:275:A:VAL:HG21	20	0.11
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE1	1:275:A:VAL:HG22	20	0.11
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE1	1:275:A:VAL:HG23	20	0.11
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE2	1:275:A:VAL:HG21	20	0.11
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE2	1:275:A:VAL:HG22	20	0.11
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE2	1:275:A:VAL:HG23	20	0.11
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE1	1:275:A:VAL:HG21	26	0.11
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE1	1:275:A:VAL:HG22	26	0.11
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE1	1:275:A:VAL:HG23	26	0.11
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE2	1:275:A:VAL:HG21	26	0.11
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE2	1:275:A:VAL:HG22	26	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE2	1:275:A:VAL:HG23	26	0.11
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE1	1:275:A:VAL:HG21	27	0.11
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE1	1:275:A:VAL:HG22	27	0.11
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE1	1:275:A:VAL:HG23	27	0.11
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE2	1:275:A:VAL:HG21	27	0.11
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE2	1:275:A:VAL:HG22	27	0.11
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE2	1:275:A:VAL:HG23	27	0.11
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE1	1:275:A:VAL:HG21	29	0.11
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE1	1:275:A:VAL:HG22	29	0.11
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE1	1:275:A:VAL:HG23	29	0.11
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE2	1:275:A:VAL:HG21	29	0.11
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE2	1:275:A:VAL:HG22	29	0.11
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE2	1:275:A:VAL:HG23	29	0.11
(1,1729)	1:295:A:ALA:HA	1:298:A:GLN:H	8	0.11
(1,1721)	1:294:A:ARG:H	1:293:A:VAL:HB	2	0.11
(1,1721)	1:294:A:ARG:H	1:293:A:VAL:HB	15	0.11
(1,1721)	1:294:A:ARG:H	1:293:A:VAL:HB	29	0.11
(1,1654)	1:287:A:TRP:HD1	1:286:A:SER:HA	13	0.11
(1,1646)	1:286:A:SER:H	1:289:A:CYS:HA	6	0.11
(1,1641)	1:285:A:PHE:HE1	1:286:A:SER:HA	30	0.11
(1,1641)	1:285:A:PHE:HE2	1:286:A:SER:HA	30	0.11
(1,1632)	1:285:A:PHE:HD1	1:290:A:ALA:HB1	21	0.11
(1,1632)	1:285:A:PHE:HD1	1:290:A:ALA:HB2	21	0.11
(1,1632)	1:285:A:PHE:HD1	1:290:A:ALA:HB3	21	0.11
(1,1632)	1:285:A:PHE:HD2	1:290:A:ALA:HB1	21	0.11
(1,1632)	1:285:A:PHE:HD2	1:290:A:ALA:HB2	21	0.11
(1,1632)	1:285:A:PHE:HD2	1:290:A:ALA:HB3	21	0.11
(1,1609)	1:281:A:TRP:HE3	1:314:A:ASP:H	23	0.11
(1,1578)	1:279:A:ILE:HB	1:309:A:ALA:HA	14	0.11
(1,1578)	1:279:A:ILE:HB	1:309:A:ALA:HA	22	0.11
(1,1562)	1:279:A:ILE:HG13	1:309:A:ALA:HA	14	0.11
(1,1562)	1:279:A:ILE:HG13	1:309:A:ALA:HA	17	0.11
(1,1557)	1:279:A:ILE:H	1:308:A:PHE:H	19	0.11
(1,1545)	1:278:A:PHE:H	1:216:A:LEU:HD21	29	0.11
(1,1545)	1:278:A:PHE:H	1:216:A:LEU:HD22	29	0.11
(1,1545)	1:278:A:PHE:H	1:216:A:LEU:HD23	29	0.11
(1,1525)	1:277:A:TRP:HH2	1:293:A:VAL:HB	28	0.11
(1,1525)	1:277:A:TRP:HH2	1:293:A:VAL:HB	30	0.11
(1,1523)	1:277:A:TRP:HZ2	1:238:A:LEU:HD21	2	0.11
(1,1523)	1:277:A:TRP:HZ2	1:238:A:LEU:HD22	2	0.11
(1,1523)	1:277:A:TRP:HZ2	1:238:A:LEU:HD23	2	0.11
(1,1523)	1:277:A:TRP:HZ2	1:238:A:LEU:HD21	5	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1523)	1:277:A:TRP:HZ2	1:238:A:LEU:HD22	5	0.11
(1,1523)	1:277:A:TRP:HZ2	1:238:A:LEU:HD23	5	0.11
(1,1523)	1:277:A:TRP:HZ2	1:238:A:LEU:HD21	17	0.11
(1,1523)	1:277:A:TRP:HZ2	1:238:A:LEU:HD22	17	0.11
(1,1523)	1:277:A:TRP:HZ2	1:238:A:LEU:HD23	17	0.11
(1,1523)	1:277:A:TRP:HZ2	1:238:A:LEU:HD21	19	0.11
(1,1523)	1:277:A:TRP:HZ2	1:238:A:LEU:HD22	19	0.11
(1,1523)	1:277:A:TRP:HZ2	1:238:A:LEU:HD23	19	0.11
(1,1486)	1:276:A:THR:HG21	1:308:A:PHE:H	6	0.11
(1,1486)	1:276:A:THR:HG22	1:308:A:PHE:H	6	0.11
(1,1486)	1:276:A:THR:HG23	1:308:A:PHE:H	6	0.11
(1,1486)	1:276:A:THR:HG21	1:308:A:PHE:H	28	0.11
(1,1486)	1:276:A:THR:HG22	1:308:A:PHE:H	28	0.11
(1,1486)	1:276:A:THR:HG23	1:308:A:PHE:H	28	0.11
(1,1486)	1:276:A:THR:HG21	1:308:A:PHE:H	30	0.11
(1,1486)	1:276:A:THR:HG22	1:308:A:PHE:H	30	0.11
(1,1486)	1:276:A:THR:HG23	1:308:A:PHE:H	30	0.11
(1,1464)	1:275:A:VAL:HB	1:305:A:LEU:HA	11	0.11
(1,1464)	1:275:A:VAL:HB	1:305:A:LEU:HA	22	0.11
(1,1464)	1:275:A:VAL:HB	1:305:A:LEU:HA	27	0.11
(1,1394)	1:273:A:TYR:HB2	1:220:A:VAL:HG21	30	0.11
(1,1394)	1:273:A:TYR:HB2	1:220:A:VAL:HG22	30	0.11
(1,1394)	1:273:A:TYR:HB2	1:220:A:VAL:HG23	30	0.11
(1,1380)	1:273:A:TYR:HA	1:223:A:LEU:HD21	19	0.11
(1,1380)	1:273:A:TYR:HA	1:223:A:LEU:HD22	19	0.11
(1,1380)	1:273:A:TYR:HA	1:223:A:LEU:HD23	19	0.11
(1,1380)	1:273:A:TYR:HA	1:223:A:LEU:HD21	21	0.11
(1,1380)	1:273:A:TYR:HA	1:223:A:LEU:HD22	21	0.11
(1,1380)	1:273:A:TYR:HA	1:223:A:LEU:HD23	21	0.11
(1,1373)	1:273:A:TYR:HA	1:221:A:GLU:HB2	1	0.11
(1,1373)	1:273:A:TYR:HA	1:221:A:GLU:HB2	2	0.11
(1,1373)	1:273:A:TYR:HA	1:221:A:GLU:HB2	9	0.11
(1,1373)	1:273:A:TYR:HA	1:221:A:GLU:HB2	17	0.11
(1,1373)	1:273:A:TYR:HA	1:221:A:GLU:HB2	23	0.11
(1,1373)	1:273:A:TYR:HA	1:221:A:GLU:HB2	25	0.11
(1,1356)	1:272:A:ILE:HA	1:228:A:TRP:HZ3	22	0.11
(1,1333)	1:271:A:GLN:HG3	1:271:A:GLN:HA	8	0.11
(1,1333)	1:271:A:GLN:HG3	1:271:A:GLN:HA	19	0.11
(1,1333)	1:271:A:GLN:HG3	1:271:A:GLN:HA	21	0.11
(1,1303)	1:269:A:PRO:HB3	1:270:A:ALA:H	9	0.11
(1,1228)	1:266:A:GLN:H	1:265:A:LEU:HA	5	0.11
(1,1228)	1:266:A:GLN:H	1:265:A:LEU:HA	11	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1228)	1:266:A:GLN:H	1:265:A:LEU:HA	14	0.11
(1,1228)	1:266:A:GLN:H	1:265:A:LEU:HA	26	0.11
(1,1226)	1:266:A:GLN:H	1:265:A:LEU:HD21	27	0.11
(1,1226)	1:266:A:GLN:H	1:265:A:LEU:HD22	27	0.11
(1,1226)	1:266:A:GLN:H	1:265:A:LEU:HD23	27	0.11
(1,1185)	1:264:A:SER:H	1:261:A:LEU:HA	9	0.11
(1,1170)	1:262:A:VAL:H	1:261:A:LEU:HB2	1	0.11
(1,1169)	1:262:A:VAL:HG21	1:259:A:LEU:HB2	28	0.11
(1,1169)	1:262:A:VAL:HG22	1:259:A:LEU:HB2	28	0.11
(1,1169)	1:262:A:VAL:HG23	1:259:A:LEU:HB2	28	0.11
(1,1164)	1:262:A:VAL:HB	1:265:A:LEU:H	30	0.11
(1,1155)	1:262:A:VAL:HA	1:265:A:LEU:HB3	3	0.11
(1,1155)	1:262:A:VAL:HA	1:265:A:LEU:HB3	7	0.11
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG11	1:265:A:LEU:HD21	13	0.11
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG11	1:265:A:LEU:HD22	13	0.11
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG11	1:265:A:LEU:HD23	13	0.11
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG12	1:265:A:LEU:HD21	13	0.11
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG12	1:265:A:LEU:HD22	13	0.11
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG12	1:265:A:LEU:HD23	13	0.11
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG13	1:265:A:LEU:HD21	13	0.11
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG13	1:265:A:LEU:HD22	13	0.11
(1,1149)	1:262:A:VAL:HG13	1:265:A:LEU:HD23	13	0.11
(1,1117)	1:261:A:LEU:HD11	1:262:A:VAL:H	22	0.11
(1,1117)	1:261:A:LEU:HD12	1:262:A:VAL:H	22	0.11
(1,1117)	1:261:A:LEU:HD13	1:262:A:VAL:H	22	0.11
(1,1101)	1:261:A:LEU:HD21	1:238:A:LEU:HB2	18	0.11
(1,1101)	1:261:A:LEU:HD22	1:238:A:LEU:HB2	18	0.11
(1,1101)	1:261:A:LEU:HD23	1:238:A:LEU:HB2	18	0.11
(1,1101)	1:261:A:LEU:HD21	1:238:A:LEU:HB2	27	0.11
(1,1101)	1:261:A:LEU:HD22	1:238:A:LEU:HB2	27	0.11
(1,1101)	1:261:A:LEU:HD23	1:238:A:LEU:HB2	27	0.11
(1,1100)	1:261:A:LEU:HD11	1:238:A:LEU:HB3	28	0.11
(1,1100)	1:261:A:LEU:HD12	1:238:A:LEU:HB3	28	0.11
(1,1100)	1:261:A:LEU:HD13	1:238:A:LEU:HB3	28	0.11
(1,977)	1:257:A:ARG:HA	1:261:A:LEU:HD11	7	0.11
(1,977)	1:257:A:ARG:HA	1:261:A:LEU:HD12	7	0.11
(1,977)	1:257:A:ARG:HA	1:261:A:LEU:HD13	7	0.11
(1,958)	1:256:A:LEU:H	1:258:A:PHE:H	7	0.11
(1,956)	1:256:A:LEU:H	1:254:A:ALA:H	10	0.11
(1,956)	1:256:A:LEU:H	1:254:A:ALA:H	17	0.11
(1,930)	1:255:A:GLU:H	1:253:A:HIS:HB2	29	0.11
(1,823)	1:238:A:LEU:HD11	1:254:A:ALA:HA	26	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,823)	1:238:A:LEU:HD12	1:254:A:ALA:HA	26	0.11
(1,823)	1:238:A:LEU:HD13	1:254:A:ALA:HA	26	0.11
(1,816)	1:238:A:LEU:HD11	1:216:A:LEU:HA	23	0.11
(1,816)	1:238:A:LEU:HD12	1:216:A:LEU:HA	23	0.11
(1,816)	1:238:A:LEU:HD13	1:216:A:LEU:HA	23	0.11
(1,816)	1:238:A:LEU:HD21	1:216:A:LEU:HA	23	0.11
(1,816)	1:238:A:LEU:HD22	1:216:A:LEU:HA	23	0.11
(1,816)	1:238:A:LEU:HD23	1:216:A:LEU:HA	23	0.11
(1,727)	1:234:A:HIS:HD2	1:235:A:MET:H	1	0.11
(1,727)	1:234:A:HIS:HD2	1:235:A:MET:H	12	0.11
(1,719)	1:234:A:HIS:H	1:265:A:LEU:HD11	4	0.11
(1,719)	1:234:A:HIS:H	1:265:A:LEU:HD12	4	0.11
(1,719)	1:234:A:HIS:H	1:265:A:LEU:HD13	4	0.11
(1,719)	1:234:A:HIS:H	1:265:A:LEU:HD11	11	0.11
(1,719)	1:234:A:HIS:H	1:265:A:LEU:HD12	11	0.11
(1,719)	1:234:A:HIS:H	1:265:A:LEU:HD13	11	0.11
(1,719)	1:234:A:HIS:H	1:265:A:LEU:HD11	15	0.11
(1,719)	1:234:A:HIS:H	1:265:A:LEU:HD12	15	0.11
(1,719)	1:234:A:HIS:H	1:265:A:LEU:HD13	15	0.11
(1,719)	1:234:A:HIS:H	1:265:A:LEU:HD11	17	0.11
(1,719)	1:234:A:HIS:H	1:265:A:LEU:HD12	17	0.11
(1,719)	1:234:A:HIS:H	1:265:A:LEU:HD13	17	0.11
(1,719)	1:234:A:HIS:H	1:265:A:LEU:HD11	21	0.11
(1,719)	1:234:A:HIS:H	1:265:A:LEU:HD12	21	0.11
(1,719)	1:234:A:HIS:H	1:265:A:LEU:HD13	21	0.11
(1,712)	1:233:A:GLN:HE22	1:233:A:GLN:HG2	2	0.11
(1,712)	1:233:A:GLN:HE22	1:233:A:GLN:HG2	10	0.11
(1,712)	1:233:A:GLN:HE22	1:233:A:GLN:HG2	19	0.11
(1,712)	1:233:A:GLN:HE22	1:233:A:GLN:HG2	28	0.11
(1,703)	1:233:A:GLN:HG3	1:234:A:HIS:H	2	0.11
(1,660)	1:230:A:LEU:HD21	1:219:A:GLU:HB3	6	0.11
(1,660)	1:230:A:LEU:HD22	1:219:A:GLU:HB3	6	0.11
(1,660)	1:230:A:LEU:HD23	1:219:A:GLU:HB3	6	0.11
(1,660)	1:230:A:LEU:HD21	1:219:A:GLU:HB3	11	0.11
(1,660)	1:230:A:LEU:HD22	1:219:A:GLU:HB3	11	0.11
(1,660)	1:230:A:LEU:HD23	1:219:A:GLU:HB3	11	0.11
(1,660)	1:230:A:LEU:HD21	1:219:A:GLU:HB3	12	0.11
(1,660)	1:230:A:LEU:HD22	1:219:A:GLU:HB3	12	0.11
(1,660)	1:230:A:LEU:HD23	1:219:A:GLU:HB3	12	0.11
(1,660)	1:230:A:LEU:HD21	1:219:A:GLU:HB3	19	0.11
(1,660)	1:230:A:LEU:HD22	1:219:A:GLU:HB3	19	0.11
(1,660)	1:230:A:LEU:HD23	1:219:A:GLU:HB3	19	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,660)	1:230:A:LEU:HD21	1:219:A:GLU:HB3	23	0.11
(1,660)	1:230:A:LEU:HD22	1:219:A:GLU:HB3	23	0.11
(1,660)	1:230:A:LEU:HD23	1:219:A:GLU:HB3	23	0.11
(1,660)	1:230:A:LEU:HD21	1:219:A:GLU:HB3	30	0.11
(1,660)	1:230:A:LEU:HD22	1:219:A:GLU:HB3	30	0.11
(1,660)	1:230:A:LEU:HD23	1:219:A:GLU:HB3	30	0.11
(1,653)	1:230:A:LEU:HD21	1:229:A:VAL:HA	28	0.11
(1,653)	1:230:A:LEU:HD22	1:229:A:VAL:HA	28	0.11
(1,653)	1:230:A:LEU:HD23	1:229:A:VAL:HA	28	0.11
(1,638)	1:230:A:LEU:HD11	1:222:A:ARG:H	29	0.11
(1,638)	1:230:A:LEU:HD12	1:222:A:ARG:H	29	0.11
(1,638)	1:230:A:LEU:HD13	1:222:A:ARG:H	29	0.11
(1,600)	1:229:A:VAL:HB	1:222:A:ARG:H	2	0.11
(1,595)	1:228:A:TRP:HH2	1:222:A:ARG:HA	9	0.11
(1,574)	1:228:A:TRP:HE3	1:221:A:GLU:HG3	13	0.11
(1,574)	1:228:A:TRP:HE3	1:221:A:GLU:HG3	23	0.11
(1,566)	1:228:A:TRP:HH2	1:223:A:LEU:HD21	15	0.11
(1,566)	1:228:A:TRP:HH2	1:223:A:LEU:HD22	15	0.11
(1,566)	1:228:A:TRP:HH2	1:223:A:LEU:HD23	15	0.11
(1,557)	1:227:A:THR:HB	1:228:A:TRP:H	15	0.11
(1,510)	1:224:A:ASP:H	1:227:A:THR:HG21	12	0.11
(1,510)	1:224:A:ASP:H	1:227:A:THR:HG22	12	0.11
(1,510)	1:224:A:ASP:H	1:227:A:THR:HG23	12	0.11
(1,510)	1:224:A:ASP:H	1:227:A:THR:HG21	20	0.11
(1,510)	1:224:A:ASP:H	1:227:A:THR:HG22	20	0.11
(1,510)	1:224:A:ASP:H	1:227:A:THR:HG23	20	0.11
(1,510)	1:224:A:ASP:H	1:227:A:THR:HG21	26	0.11
(1,510)	1:224:A:ASP:H	1:227:A:THR:HG22	26	0.11
(1,510)	1:224:A:ASP:H	1:227:A:THR:HG23	26	0.11
(1,386)	1:219:A:GLU:H	1:276:A:THR:HG21	26	0.11
(1,386)	1:219:A:GLU:H	1:276:A:THR:HG22	26	0.11
(1,386)	1:219:A:GLU:H	1:276:A:THR:HG23	26	0.11
(1,381)	1:219:A:GLU:H	1:275:A:VAL:HG11	4	0.11
(1,381)	1:219:A:GLU:H	1:275:A:VAL:HG12	4	0.11
(1,381)	1:219:A:GLU:H	1:275:A:VAL:HG13	4	0.11
(1,364)	1:219:A:GLU:HA	1:219:A:GLU:HG3	13	0.11
(1,337)	1:217:A:CYS:HB2	1:237:A:PHE:HA	25	0.11
(1,335)	1:217:A:CYS:H	1:216:A:LEU:HB3	20	0.11
(1,311)	1:216:A:LEU:HG	1:277:A:TRP:HD1	5	0.11
(1,311)	1:216:A:LEU:HG	1:277:A:TRP:HD1	20	0.11
(1,306)	1:216:A:LEU:HD11	1:254:A:ALA:H	1	0.11
(1,306)	1:216:A:LEU:HD12	1:254:A:ALA:H	1	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,306)	1:216:A:LEU:HD13	1:254:A:ALA:H	1	0.11
(1,306)	1:216:A:LEU:HD11	1:254:A:ALA:H	9	0.11
(1,306)	1:216:A:LEU:HD12	1:254:A:ALA:H	9	0.11
(1,306)	1:216:A:LEU:HD13	1:254:A:ALA:H	9	0.11
(1,306)	1:216:A:LEU:HD11	1:254:A:ALA:H	12	0.11
(1,306)	1:216:A:LEU:HD12	1:254:A:ALA:H	12	0.11
(1,306)	1:216:A:LEU:HD13	1:254:A:ALA:H	12	0.11
(1,288)	1:216:A:LEU:HD21	1:277:A:TRP:HB2	7	0.11
(1,288)	1:216:A:LEU:HD22	1:277:A:TRP:HB2	7	0.11
(1,288)	1:216:A:LEU:HD23	1:277:A:TRP:HB2	7	0.11
(1,288)	1:216:A:LEU:HD21	1:277:A:TRP:HB2	21	0.11
(1,288)	1:216:A:LEU:HD22	1:277:A:TRP:HB2	21	0.11
(1,288)	1:216:A:LEU:HD23	1:277:A:TRP:HB2	21	0.11
(1,283)	1:216:A:LEU:HD11	1:258:A:PHE:HA	13	0.11
(1,283)	1:216:A:LEU:HD12	1:258:A:PHE:HA	13	0.11
(1,283)	1:216:A:LEU:HD13	1:258:A:PHE:HA	13	0.11
(1,283)	1:216:A:LEU:HD11	1:258:A:PHE:HA	14	0.11
(1,283)	1:216:A:LEU:HD12	1:258:A:PHE:HA	14	0.11
(1,283)	1:216:A:LEU:HD13	1:258:A:PHE:HA	14	0.11
(1,278)	1:216:A:LEU:HD11	1:258:A:PHE:HB3	10	0.11
(1,278)	1:216:A:LEU:HD12	1:258:A:PHE:HB3	10	0.11
(1,278)	1:216:A:LEU:HD13	1:258:A:PHE:HB3	10	0.11
(1,278)	1:216:A:LEU:HD11	1:258:A:PHE:HB3	27	0.11
(1,278)	1:216:A:LEU:HD12	1:258:A:PHE:HB3	27	0.11
(1,278)	1:216:A:LEU:HD13	1:258:A:PHE:HB3	27	0.11
(1,276)	1:216:A:LEU:HD11	1:215:A:TYR:H	18	0.11
(1,276)	1:216:A:LEU:HD12	1:215:A:TYR:H	18	0.11
(1,276)	1:216:A:LEU:HD13	1:215:A:TYR:H	18	0.11
(1,275)	1:216:A:LEU:HG	1:258:A:PHE:HD1	30	0.11
(1,275)	1:216:A:LEU:HG	1:258:A:PHE:HD2	30	0.11
(1,254)	1:215:A:TYR:H	1:216:A:LEU:HD21	29	0.11
(1,254)	1:215:A:TYR:H	1:216:A:LEU:HD22	29	0.11
(1,254)	1:215:A:TYR:H	1:216:A:LEU:HD23	29	0.11
(1,249)	1:213:A:GLN:HE22	1:213:A:GLN:HG2	28	0.11
(1,169)	1:196:A:ASP:H	1:195:A:PRO:HB3	6	0.11
(1,169)	1:196:A:ASP:H	1:195:A:PRO:HB3	26	0.11
(1,143)	1:194:A:ASP:HB2	1:193:A:MET:HA	11	0.11
(1,98)	1:192:A:LEU:H	1:192:A:LEU:HG	26	0.11
(1,85)	1:192:A:LEU:HD21	1:348:A:PHE:H	28	0.11
(1,85)	1:192:A:LEU:HD22	1:348:A:PHE:H	28	0.11
(1,85)	1:192:A:LEU:HD23	1:348:A:PHE:H	28	0.11
(1,85)	1:192:A:LEU:HD21	1:348:A:PHE:H	30	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,85)	1:192:A:LEU:HD22	1:348:A:PHE:H	30	0.11
(1,85)	1:192:A:LEU:HD23	1:348:A:PHE:H	30	0.11
(1,74)	1:191:A:TYR:HB3	1:192:A:LEU:H	5	0.11
(1,69)	1:191:A:TYR:H	1:237:A:PHE:HZ	11	0.11
(1,69)	1:191:A:TYR:H	1:237:A:PHE:HZ	17	0.11
(1,69)	1:191:A:TYR:H	1:237:A:PHE:HZ	20	0.11
(1,67)	1:190:A:ARG:HA	1:237:A:PHE:HE1	10	0.11
(1,67)	1:190:A:ARG:HA	1:237:A:PHE:HE2	10	0.11
(1,63)	1:190:A:ARG:H	1:191:A:TYR:H	12	0.11
(1,63)	1:190:A:ARG:H	1:191:A:TYR:H	18	0.11
(1,63)	1:190:A:ARG:H	1:191:A:TYR:H	25	0.11
(1,63)	1:190:A:ARG:H	1:191:A:TYR:H	26	0.11
(1,46)	1:189:A:LEU:H	1:189:A:LEU:HD11	17	0.11
(1,46)	1:189:A:LEU:H	1:189:A:LEU:HD12	17	0.11
(1,46)	1:189:A:LEU:H	1:189:A:LEU:HD13	17	0.11
(1,14)	1:188:A:ILE:HD11	1:189:A:LEU:H	1	0.11
(1,14)	1:188:A:ILE:HD12	1:189:A:LEU:H	1	0.11
(1,14)	1:188:A:ILE:HD13	1:189:A:LEU:H	1	0.11
(3,159)	1:370:A:SER:N	1:366:A:SER:O	27	0.1
(3,110)	1:264:A:SER:N	1:261:A:LEU:O	23	0.1
(3,60)	1:334:A:SER:H	1:307:A:ILE:O	15	0.1
(3,59)	1:332:A:GLN:H	1:305:A:LEU:O	19	0.1
(3,50)	1:309:A:ALA:H	1:334:A:SER:O	10	0.1
(3,50)	1:309:A:ALA:H	1:334:A:SER:O	15	0.1
(3,50)	1:309:A:ALA:H	1:334:A:SER:O	28	0.1
(3,49)	1:308:A:PHE:H	1:277:A:TRP:O	3	0.1
(3,49)	1:308:A:PHE:H	1:277:A:TRP:O	6	0.1
(3,49)	1:308:A:PHE:H	1:277:A:TRP:O	23	0.1
(3,48)	1:307:A:ILE:H	1:332:A:GLN:O	21	0.1
(3,43)	1:298:A:GLN:H	1:294:A:ARG:O	3	0.1
(3,20)	1:234:A:HIS:H	1:231:A:MET:O	18	0.1
(3,19)	1:238:A:LEU:H	1:216:A:LEU:O	21	0.1
(3,16)	1:229:A:VAL:H	1:222:A:ARG:O	4	0.1
(3,16)	1:229:A:VAL:H	1:222:A:ARG:O	11	0.1
(3,13)	1:223:A:LEU:H	1:272:A:ILE:O	7	0.1
(3,10)	1:219:A:GLU:H	1:276:A:THR:O	27	0.1
(1,3071)	1:255:A:GLU:N	1:255:A:GLU:OE1	7	0.1
(1,3038)	1:379:A:ASN:HD22	1:379:A:ASN:HD21	6	0.1
(1,3038)	1:379:A:ASN:HD22	1:379:A:ASN:HD21	19	0.1
(1,3038)	1:379:A:ASN:HD22	1:379:A:ASN:HD21	21	0.1
(1,2867)	1:367:A:GLN:HG3	1:364:A:GLU:HA	8	0.1
(1,2859)	1:367:A:GLN:HE21	1:367:A:GLN:HE22	12	0.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2859)	1:367:A:GLN:HE21	1:367:A:GLN:HE22	19	0.1
(1,2859)	1:367:A:GLN:HE21	1:367:A:GLN:HE22	27	0.1
(1,2684)	1:354:A:CYS:H	1:352:A:GLN:HA	29	0.1
(1,2582)	1:346:A:ASP:H	1:344:A:CYS:H	17	0.1
(1,2366)	1:333:A:VAL:H	1:327:A:ARG:HB3	6	0.1
(1,2366)	1:333:A:VAL:H	1:327:A:ARG:HB3	20	0.1
(1,2366)	1:333:A:VAL:H	1:327:A:ARG:HB3	30	0.1
(1,2353)	1:333:A:VAL:HG11	1:326:A:LEU:HD11	18	0.1
(1,2353)	1:333:A:VAL:HG11	1:326:A:LEU:HD12	18	0.1
(1,2353)	1:333:A:VAL:HG11	1:326:A:LEU:HD13	18	0.1
(1,2353)	1:333:A:VAL:HG12	1:326:A:LEU:HD11	18	0.1
(1,2353)	1:333:A:VAL:HG12	1:326:A:LEU:HD12	18	0.1
(1,2353)	1:333:A:VAL:HG12	1:326:A:LEU:HD13	18	0.1
(1,2353)	1:333:A:VAL:HG13	1:326:A:LEU:HD11	18	0.1
(1,2353)	1:333:A:VAL:HG13	1:326:A:LEU:HD12	18	0.1
(1,2353)	1:333:A:VAL:HG13	1:326:A:LEU:HD13	18	0.1
(1,2322)	1:332:A:GLN:HG2	1:332:A:GLN:HE22	17	0.1
(1,2314)	1:332:A:GLN:HE22	1:332:A:GLN:HE21	6	0.1
(1,2298)	1:331:A:ALA:HB1	1:326:A:LEU:HB2	15	0.1
(1,2298)	1:331:A:ALA:HB2	1:326:A:LEU:HB2	15	0.1
(1,2298)	1:331:A:ALA:HB3	1:326:A:LEU:HB2	15	0.1
(1,2159)	1:320:A:LYS:HD2	1:320:A:LYS:HA	27	0.1
(1,2082)	1:312:A:ILE:HG21	1:376:A:ILE:HG13	27	0.1
(1,2082)	1:312:A:ILE:HG22	1:376:A:ILE:HG13	27	0.1
(1,2082)	1:312:A:ILE:HG23	1:376:A:ILE:HG13	27	0.1
(1,2003)	1:307:A:ILE:H	1:305:A:LEU:HD11	23	0.1
(1,2003)	1:307:A:ILE:H	1:305:A:LEU:HD12	23	0.1
(1,2003)	1:307:A:ILE:H	1:305:A:LEU:HD13	23	0.1
(1,1998)	1:307:A:ILE:HD11	1:308:A:PHE:H	15	0.1
(1,1998)	1:307:A:ILE:HD12	1:308:A:PHE:H	15	0.1
(1,1998)	1:307:A:ILE:HD13	1:308:A:PHE:H	15	0.1
(1,1981)	1:305:A:LEU:HD11	1:275:A:VAL:HB	11	0.1
(1,1981)	1:305:A:LEU:HD12	1:275:A:VAL:HB	11	0.1
(1,1981)	1:305:A:LEU:HD13	1:275:A:VAL:HB	11	0.1
(1,1981)	1:305:A:LEU:HD11	1:275:A:VAL:HB	14	0.1
(1,1981)	1:305:A:LEU:HD12	1:275:A:VAL:HB	14	0.1
(1,1981)	1:305:A:LEU:HD13	1:275:A:VAL:HB	14	0.1
(1,1981)	1:305:A:LEU:HD11	1:275:A:VAL:HB	28	0.1
(1,1981)	1:305:A:LEU:HD12	1:275:A:VAL:HB	28	0.1
(1,1981)	1:305:A:LEU:HD13	1:275:A:VAL:HB	28	0.1
(1,1970)	1:305:A:LEU:HD21	1:258:A:PHE:HZ	27	0.1
(1,1970)	1:305:A:LEU:HD22	1:258:A:PHE:HZ	27	0.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1970)	1:305:A:LEU:HD23	1:258:A:PHE:HZ	27	0.1
(1,1946)	1:305:A:LEU:HD11	1:306:A:ARG:HA	27	0.1
(1,1946)	1:305:A:LEU:HD12	1:306:A:ARG:HA	27	0.1
(1,1946)	1:305:A:LEU:HD13	1:306:A:ARG:HA	27	0.1
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD21	19	0.1
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD22	19	0.1
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG21	1:265:A:LEU:HD23	19	0.1
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD21	19	0.1
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD22	19	0.1
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG22	1:265:A:LEU:HD23	19	0.1
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD21	19	0.1
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD22	19	0.1
(1,1921)	1:303:A:VAL:HG23	1:265:A:LEU:HD23	19	0.1
(1,1895)	1:303:A:VAL:HB	1:296:A:PHE:HE1	4	0.1
(1,1895)	1:303:A:VAL:HB	1:296:A:PHE:HE2	4	0.1
(1,1876)	1:302:A:HIS:HD2	1:303:A:VAL:HB	23	0.1
(1,1876)	1:302:A:HIS:HD2	1:303:A:VAL:HB	25	0.1
(1,1834)	1:299:A:GLU:HG2	1:296:A:PHE:HD1	24	0.1
(1,1834)	1:299:A:GLU:HG2	1:296:A:PHE:HD2	24	0.1
(1,1829)	1:299:A:GLU:HG3	1:300:A:ASN:H	21	0.1
(1,1768)	1:296:A:PHE:HE1	1:259:A:LEU:HD21	6	0.1
(1,1768)	1:296:A:PHE:HE1	1:259:A:LEU:HD22	6	0.1
(1,1768)	1:296:A:PHE:HE1	1:259:A:LEU:HD23	6	0.1
(1,1768)	1:296:A:PHE:HE2	1:259:A:LEU:HD21	6	0.1
(1,1768)	1:296:A:PHE:HE2	1:259:A:LEU:HD22	6	0.1
(1,1768)	1:296:A:PHE:HE2	1:259:A:LEU:HD23	6	0.1
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE1	1:275:A:VAL:HG21	14	0.1
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE1	1:275:A:VAL:HG22	14	0.1
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE1	1:275:A:VAL:HG23	14	0.1
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE2	1:275:A:VAL:HG21	14	0.1
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE2	1:275:A:VAL:HG22	14	0.1
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE2	1:275:A:VAL:HG23	14	0.1
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE1	1:275:A:VAL:HG21	24	0.1
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE1	1:275:A:VAL:HG22	24	0.1
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE1	1:275:A:VAL:HG23	24	0.1
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE2	1:275:A:VAL:HG21	24	0.1
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE2	1:275:A:VAL:HG22	24	0.1
(1,1745)	1:296:A:PHE:HE2	1:275:A:VAL:HG23	24	0.1
(1,1705)	1:293:A:VAL:HG11	1:290:A:ALA:H	20	0.1
(1,1705)	1:293:A:VAL:HG12	1:290:A:ALA:H	20	0.1
(1,1705)	1:293:A:VAL:HG13	1:290:A:ALA:H	20	0.1
(1,1655)	1:287:A:TRP:HD1	1:286:A:SER:H	10	0.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1646)	1:286:A:SER:H	1:289:A:CYS:HA	13	0.1
(1,1617)	1:282:A:SER:H	1:309:A:ALA:HA	19	0.1
(1,1617)	1:282:A:SER:H	1:309:A:ALA:HA	28	0.1
(1,1578)	1:279:A:ILE:HB	1:309:A:ALA:HA	4	0.1
(1,1562)	1:279:A:ILE:HG13	1:309:A:ALA:HA	19	0.1
(1,1562)	1:279:A:ILE:HG13	1:309:A:ALA:HA	26	0.1
(1,1557)	1:279:A:ILE:H	1:308:A:PHE:H	9	0.1
(1,1557)	1:279:A:ILE:H	1:308:A:PHE:H	10	0.1
(1,1523)	1:277:A:TRP:HZ2	1:238:A:LEU:HD21	1	0.1
(1,1523)	1:277:A:TRP:HZ2	1:238:A:LEU:HD22	1	0.1
(1,1523)	1:277:A:TRP:HZ2	1:238:A:LEU:HD23	1	0.1
(1,1491)	1:277:A:TRP:HE1	1:305:A:LEU:HG	4	0.1
(1,1464)	1:275:A:VAL:HB	1:305:A:LEU:HA	28	0.1
(1,1394)	1:273:A:TYR:HB2	1:220:A:VAL:HG21	4	0.1
(1,1394)	1:273:A:TYR:HB2	1:220:A:VAL:HG22	4	0.1
(1,1394)	1:273:A:TYR:HB2	1:220:A:VAL:HG23	4	0.1
(1,1380)	1:273:A:TYR:HA	1:223:A:LEU:HD21	10	0.1
(1,1380)	1:273:A:TYR:HA	1:223:A:LEU:HD22	10	0.1
(1,1380)	1:273:A:TYR:HA	1:223:A:LEU:HD23	10	0.1
(1,1380)	1:273:A:TYR:HA	1:223:A:LEU:HD21	24	0.1
(1,1380)	1:273:A:TYR:HA	1:223:A:LEU:HD22	24	0.1
(1,1380)	1:273:A:TYR:HA	1:223:A:LEU:HD23	24	0.1
(1,1373)	1:273:A:TYR:HA	1:221:A:GLU:HB2	21	0.1
(1,1356)	1:272:A:ILE:HA	1:228:A:TRP:HZ3	6	0.1
(1,1356)	1:272:A:ILE:HA	1:228:A:TRP:HZ3	30	0.1
(1,1333)	1:271:A:GLN:HG3	1:271:A:GLN:HA	6	0.1
(1,1333)	1:271:A:GLN:HG3	1:271:A:GLN:HA	13	0.1
(1,1260)	1:267:A:LEU:H	1:266:A:GLN:HB3	15	0.1
(1,1226)	1:266:A:GLN:H	1:265:A:LEU:HD21	30	0.1
(1,1226)	1:266:A:GLN:H	1:265:A:LEU:HD22	30	0.1
(1,1226)	1:266:A:GLN:H	1:265:A:LEU:HD23	30	0.1
(1,1215)	1:265:A:LEU:HD21	1:267:A:LEU:HD21	15	0.1
(1,1215)	1:265:A:LEU:HD21	1:267:A:LEU:HD22	15	0.1
(1,1215)	1:265:A:LEU:HD21	1:267:A:LEU:HD23	15	0.1
(1,1215)	1:265:A:LEU:HD22	1:267:A:LEU:HD21	15	0.1
(1,1215)	1:265:A:LEU:HD22	1:267:A:LEU:HD22	15	0.1
(1,1215)	1:265:A:LEU:HD22	1:267:A:LEU:HD23	15	0.1
(1,1215)	1:265:A:LEU:HD23	1:267:A:LEU:HD21	15	0.1
(1,1215)	1:265:A:LEU:HD23	1:267:A:LEU:HD22	15	0.1
(1,1215)	1:265:A:LEU:HD23	1:267:A:LEU:HD23	15	0.1
(1,1185)	1:264:A:SER:H	1:261:A:LEU:HA	3	0.1
(1,1155)	1:262:A:VAL:HA	1:265:A:LEU:HB3	11	0.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1155)	1:262:A:VAL:HA	1:265:A:LEU:HB3	17	0.1
(1,1155)	1:262:A:VAL:HA	1:265:A:LEU:HB3	27	0.1
(1,1155)	1:262:A:VAL:HA	1:265:A:LEU:HB3	28	0.1
(1,1148)	1:262:A:VAL:HG21	1:263:A:PRO:HG2	7	0.1
(1,1148)	1:262:A:VAL:HG22	1:263:A:PRO:HG2	7	0.1
(1,1148)	1:262:A:VAL:HG23	1:263:A:PRO:HG2	7	0.1
(1,1107)	1:261:A:LEU:HD21	1:264:A:SER:HB2	7	0.1
(1,1107)	1:261:A:LEU:HD22	1:264:A:SER:HB2	7	0.1
(1,1107)	1:261:A:LEU:HD23	1:264:A:SER:HB2	7	0.1
(1,1101)	1:261:A:LEU:HD21	1:238:A:LEU:HB2	30	0.1
(1,1101)	1:261:A:LEU:HD22	1:238:A:LEU:HB2	30	0.1
(1,1101)	1:261:A:LEU:HD23	1:238:A:LEU:HB2	30	0.1
(1,1082)	1:260:A:ASP:HA	1:262:A:VAL:H	4	0.1
(1,1001)	1:258:A:PHE:HZ	1:259:A:LEU:HD11	5	0.1
(1,1001)	1:258:A:PHE:HZ	1:259:A:LEU:HD12	5	0.1
(1,1001)	1:258:A:PHE:HZ	1:259:A:LEU:HD13	5	0.1
(1,995)	1:258:A:PHE:HD1	1:255:A:GLU:HA	2	0.1
(1,995)	1:258:A:PHE:HD2	1:255:A:GLU:HA	2	0.1
(1,956)	1:256:A:LEU:H	1:254:A:ALA:H	15	0.1
(1,835)	1:241:A:GLU:H	1:240:A:ASN:HB2	23	0.1
(1,823)	1:238:A:LEU:HD11	1:254:A:ALA:HA	11	0.1
(1,823)	1:238:A:LEU:HD12	1:254:A:ALA:HA	11	0.1
(1,823)	1:238:A:LEU:HD13	1:254:A:ALA:HA	11	0.1
(1,823)	1:238:A:LEU:HD11	1:254:A:ALA:HA	20	0.1
(1,823)	1:238:A:LEU:HD12	1:254:A:ALA:HA	20	0.1
(1,823)	1:238:A:LEU:HD13	1:254:A:ALA:HA	20	0.1
(1,792)	1:237:A:PHE:HD1	1:238:A:LEU:HA	11	0.1
(1,792)	1:237:A:PHE:HD2	1:238:A:LEU:HA	11	0.1
(1,792)	1:237:A:PHE:HD1	1:238:A:LEU:HA	18	0.1
(1,792)	1:237:A:PHE:HD2	1:238:A:LEU:HA	18	0.1
(1,719)	1:234:A:HIS:H	1:265:A:LEU:HD11	13	0.1
(1,719)	1:234:A:HIS:H	1:265:A:LEU:HD12	13	0.1
(1,719)	1:234:A:HIS:H	1:265:A:LEU:HD13	13	0.1
(1,660)	1:230:A:LEU:HD21	1:219:A:GLU:HB3	10	0.1
(1,660)	1:230:A:LEU:HD22	1:219:A:GLU:HB3	10	0.1
(1,660)	1:230:A:LEU:HD23	1:219:A:GLU:HB3	10	0.1
(1,660)	1:230:A:LEU:HD21	1:219:A:GLU:HB3	20	0.1
(1,660)	1:230:A:LEU:HD22	1:219:A:GLU:HB3	20	0.1
(1,660)	1:230:A:LEU:HD23	1:219:A:GLU:HB3	20	0.1
(1,660)	1:230:A:LEU:HD21	1:219:A:GLU:HB3	22	0.1
(1,660)	1:230:A:LEU:HD22	1:219:A:GLU:HB3	22	0.1
(1,660)	1:230:A:LEU:HD23	1:219:A:GLU:HB3	22	0.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,660)	1:230:A:LEU:HD21	1:219:A:GLU:HB3	26	0.1
(1,660)	1:230:A:LEU:HD22	1:219:A:GLU:HB3	26	0.1
(1,660)	1:230:A:LEU:HD23	1:219:A:GLU:HB3	26	0.1
(1,600)	1:229:A:VAL:HB	1:222:A:ARG:H	7	0.1
(1,600)	1:229:A:VAL:HB	1:222:A:ARG:H	22	0.1
(1,557)	1:227:A:THR:HB	1:228:A:TRP:H	7	0.1
(1,522)	1:225:A:ASN:HD22	1:225:A:ASN:HD21	1	0.1
(1,522)	1:225:A:ASN:HD22	1:225:A:ASN:HD21	3	0.1
(1,522)	1:225:A:ASN:HD22	1:225:A:ASN:HD21	9	0.1
(1,522)	1:225:A:ASN:HD22	1:225:A:ASN:HD21	10	0.1
(1,522)	1:225:A:ASN:HD22	1:225:A:ASN:HD21	14	0.1
(1,522)	1:225:A:ASN:HD22	1:225:A:ASN:HD21	23	0.1
(1,522)	1:225:A:ASN:HD22	1:225:A:ASN:HD21	25	0.1
(1,522)	1:225:A:ASN:HD22	1:225:A:ASN:HD21	26	0.1
(1,510)	1:224:A:ASP:H	1:227:A:THR:HG21	1	0.1
(1,510)	1:224:A:ASP:H	1:227:A:THR:HG22	1	0.1
(1,510)	1:224:A:ASP:H	1:227:A:THR:HG23	1	0.1
(1,393)	1:220:A:VAL:HB	1:273:A:TYR:HD1	9	0.1
(1,393)	1:220:A:VAL:HB	1:273:A:TYR:HD2	9	0.1
(1,386)	1:219:A:GLU:H	1:276:A:THR:HG21	2	0.1
(1,386)	1:219:A:GLU:H	1:276:A:THR:HG22	2	0.1
(1,386)	1:219:A:GLU:H	1:276:A:THR:HG23	2	0.1
(1,335)	1:217:A:CYS:H	1:216:A:LEU:HB3	22	0.1
(1,313)	1:216:A:LEU:HD21	1:218:A:TYR:HB2	23	0.1
(1,313)	1:216:A:LEU:HD22	1:218:A:TYR:HB2	23	0.1
(1,313)	1:216:A:LEU:HD23	1:218:A:TYR:HB2	23	0.1
(1,311)	1:216:A:LEU:HG	1:277:A:TRP:HD1	3	0.1
(1,288)	1:216:A:LEU:HD21	1:277:A:TRP:HB2	12	0.1
(1,288)	1:216:A:LEU:HD22	1:277:A:TRP:HB2	12	0.1
(1,288)	1:216:A:LEU:HD23	1:277:A:TRP:HB2	12	0.1
(1,279)	1:216:A:LEU:HD21	1:279:A:ILE:HD11	26	0.1
(1,279)	1:216:A:LEU:HD21	1:279:A:ILE:HD12	26	0.1
(1,279)	1:216:A:LEU:HD21	1:279:A:ILE:HD13	26	0.1
(1,279)	1:216:A:LEU:HD22	1:279:A:ILE:HD11	26	0.1
(1,279)	1:216:A:LEU:HD22	1:279:A:ILE:HD12	26	0.1
(1,279)	1:216:A:LEU:HD22	1:279:A:ILE:HD13	26	0.1
(1,279)	1:216:A:LEU:HD23	1:279:A:ILE:HD11	26	0.1
(1,279)	1:216:A:LEU:HD23	1:279:A:ILE:HD12	26	0.1
(1,279)	1:216:A:LEU:HD23	1:279:A:ILE:HD13	26	0.1
(1,278)	1:216:A:LEU:HD11	1:258:A:PHE:HB3	5	0.1
(1,278)	1:216:A:LEU:HD12	1:258:A:PHE:HB3	5	0.1
(1,278)	1:216:A:LEU:HD13	1:258:A:PHE:HB3	5	0.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,278)	1:216:A:LEU:HD11	1:258:A:PHE:HB3	28	0.1
(1,278)	1:216:A:LEU:HD12	1:258:A:PHE:HB3	28	0.1
(1,278)	1:216:A:LEU:HD13	1:258:A:PHE:HB3	28	0.1
(1,237)	1:213:A:GLN:HE21	1:213:A:GLN:HE22	12	0.1
(1,169)	1:196:A:ASP:H	1:195:A:PRO:HB3	1	0.1
(1,169)	1:196:A:ASP:H	1:195:A:PRO:HB3	3	0.1
(1,106)	1:192:A:LEU:HD21	1:191:A:TYR:HB3	22	0.1
(1,106)	1:192:A:LEU:HD22	1:191:A:TYR:HB3	22	0.1
(1,106)	1:192:A:LEU:HD23	1:191:A:TYR:HB3	22	0.1
(1,106)	1:192:A:LEU:HD21	1:191:A:TYR:HB3	28	0.1
(1,106)	1:192:A:LEU:HD22	1:191:A:TYR:HB3	28	0.1
(1,106)	1:192:A:LEU:HD23	1:191:A:TYR:HB3	28	0.1
(1,98)	1:192:A:LEU:H	1:192:A:LEU:HG	20	0.1
(1,97)	1:192:A:LEU:H	1:192:A:LEU:HD11	9	0.1
(1,97)	1:192:A:LEU:H	1:192:A:LEU:HD12	9	0.1
(1,97)	1:192:A:LEU:H	1:192:A:LEU:HD13	9	0.1
(1,93)	1:192:A:LEU:HD21	1:237:A:PHE:HZ	21	0.1
(1,93)	1:192:A:LEU:HD22	1:237:A:PHE:HZ	21	0.1
(1,93)	1:192:A:LEU:HD23	1:237:A:PHE:HZ	21	0.1
(1,85)	1:192:A:LEU:HD21	1:348:A:PHE:H	11	0.1
(1,85)	1:192:A:LEU:HD22	1:348:A:PHE:H	11	0.1
(1,85)	1:192:A:LEU:HD23	1:348:A:PHE:H	11	0.1
(1,69)	1:191:A:TYR:H	1:237:A:PHE:HZ	16	0.1
(1,69)	1:191:A:TYR:H	1:237:A:PHE:HZ	26	0.1
(1,59)	1:190:A:ARG:HB2	1:190:A:ARG:H	18	0.1
(1,59)	1:190:A:ARG:HB2	1:190:A:ARG:H	26	0.1

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

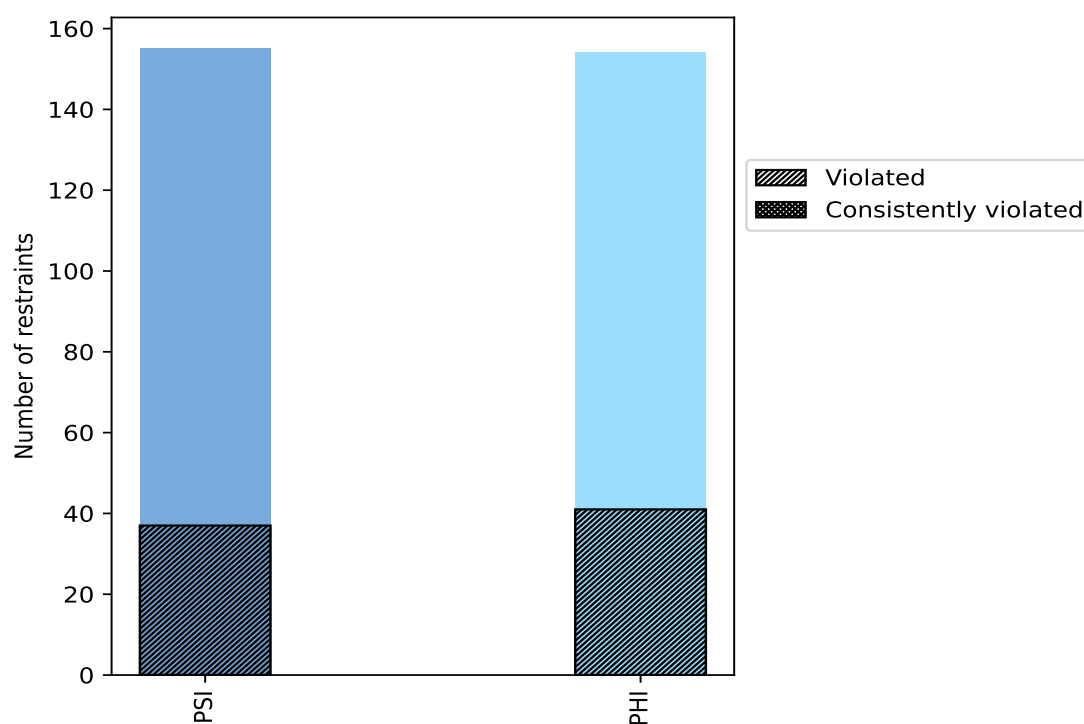
10.1 Summary of dihedral-angle violations [i](#)

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

Angle type	Count	% ¹	Violated ³			Consistently Violated ⁴		
			Count	% ²	% ¹	Count	% ²	% ¹
PSI	155	50.2	37	23.9	12.0	0	0.0	0.0
PHI	154	49.8	41	26.6	13.3	0	0.0	0.0
Total	309	100.0	78	25.2	25.2	0	0.0	0.0

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

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



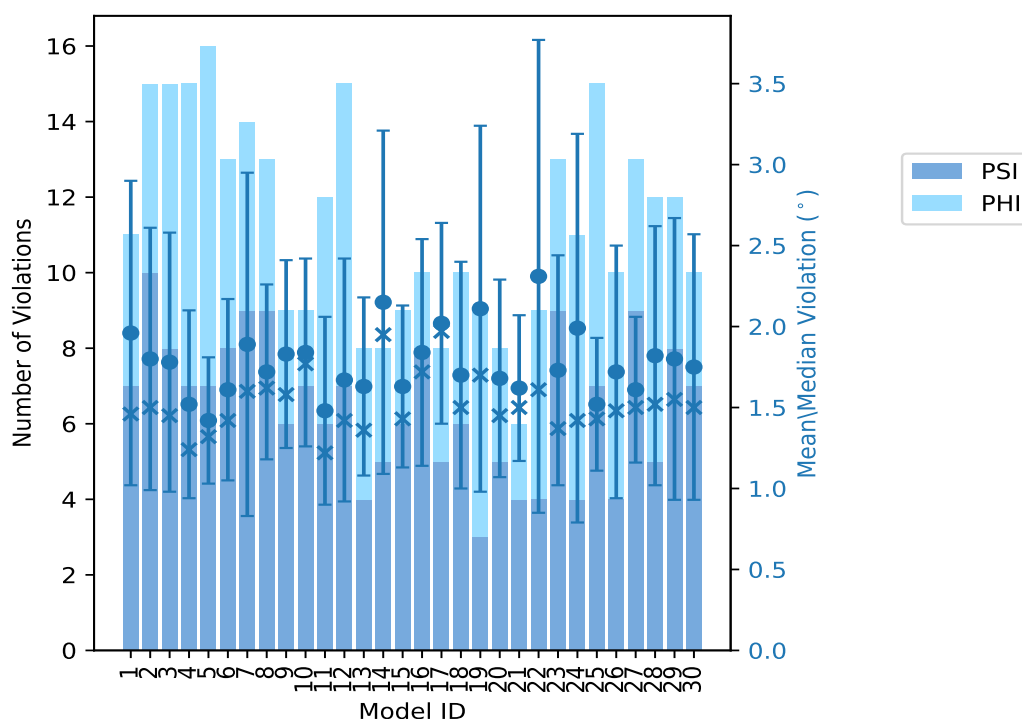
Violated and consistently violated restraints are shown using different hatch patterns in their respective categories

10.2 Dihedral-angle violation statistics for each model

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

Model ID	Number of violations			Mean (°)	Max (°)	SD (°)	Median (°)
	PSI	PHI	Total				
1	7	4	11	1.96	3.72	0.94	1.46
2	10	5	15	1.8	4.09	0.81	1.5
3	8	7	15	1.78	4.11	0.8	1.45
4	7	8	15	1.52	3.03	0.58	1.24
5	7	9	16	1.42	2.46	0.39	1.32
6	8	5	13	1.61	2.74	0.56	1.42
7	9	5	14	1.89	4.79	1.06	1.6
8	9	4	13	1.72	2.71	0.54	1.62
9	6	3	9	1.83	2.97	0.58	1.58
10	7	2	9	1.84	2.85	0.58	1.77
11	6	6	12	1.48	2.83	0.58	1.22
12	7	8	15	1.67	3.18	0.75	1.42
13	4	4	8	1.63	2.68	0.55	1.36
14	5	3	8	2.15	4.43	1.06	1.95
15	6	3	9	1.63	2.84	0.5	1.43
16	8	2	10	1.84	3.34	0.7	1.72
17	5	3	8	2.02	2.79	0.62	1.97
18	6	4	10	1.7	3.51	0.7	1.5
19	3	6	9	2.11	4.89	1.13	1.7
20	5	3	8	1.68	3.18	0.61	1.45
21	4	2	6	1.62	2.51	0.45	1.5
22	4	5	9	2.31	5.58	1.46	1.61
23	9	4	13	1.73	3.02	0.71	1.37
24	4	7	11	1.99	5.14	1.2	1.42
25	7	8	15	1.52	2.39	0.41	1.43
26	4	6	10	1.72	3.59	0.78	1.48
27	9	4	13	1.61	2.79	0.45	1.5
28	5	7	12	1.82	4.16	0.8	1.52
29	8	4	12	1.8	4.09	0.87	1.55
30	7	3	10	1.75	4.04	0.82	1.5

10.2.1 Bar graph : Dihedral violation statistics for each model [i](#)



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

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

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

Number of violated restraints			Fraction of the ensemble	
PSI	PHI	Total	Count ¹	%
13	19	32	1	3.3
2	6	8	2	6.7
1	4	5	3	10.0
6	3	9	4	13.3
2	1	3	5	16.7
4	3	7	6	20.0
0	0	0	7	23.3
2	1	3	8	26.7
0	2	2	9	30.0
2	0	2	10	33.3
0	0	0	11	36.7

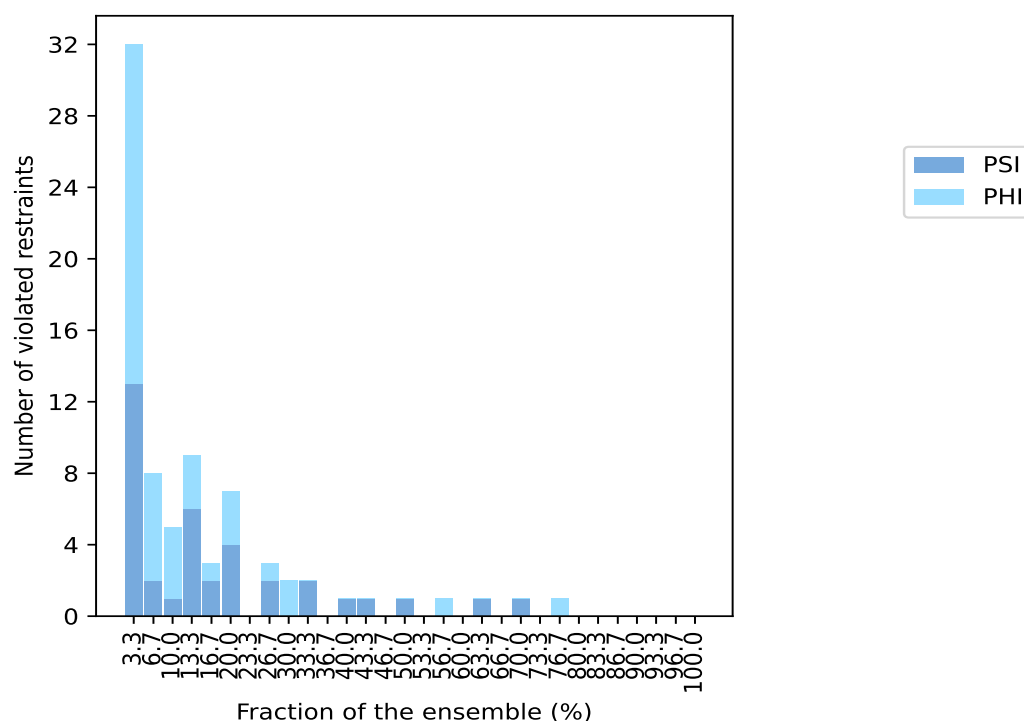
Continued on next page...

Continued from previous page...

Number of violated restraints			Fraction of the ensemble	
PSI	PHI	Total	Count ¹	%
1	0	1	12	40.0
1	0	1	13	43.3
0	0	0	14	46.7
1	0	1	15	50.0
0	0	0	16	53.3
0	1	1	17	56.7
0	0	0	18	60.0
1	0	1	19	63.3
0	0	0	20	66.7
1	0	1	21	70.0
0	0	0	22	73.3
0	1	1	23	76.7
0	0	0	24	80.0
0	0	0	25	83.3
0	0	0	26	86.7
0	0	0	27	90.0
0	0	0	28	93.3
0	0	0	29	96.7
0	0	0	30	100.0

¹ Number of models with violations

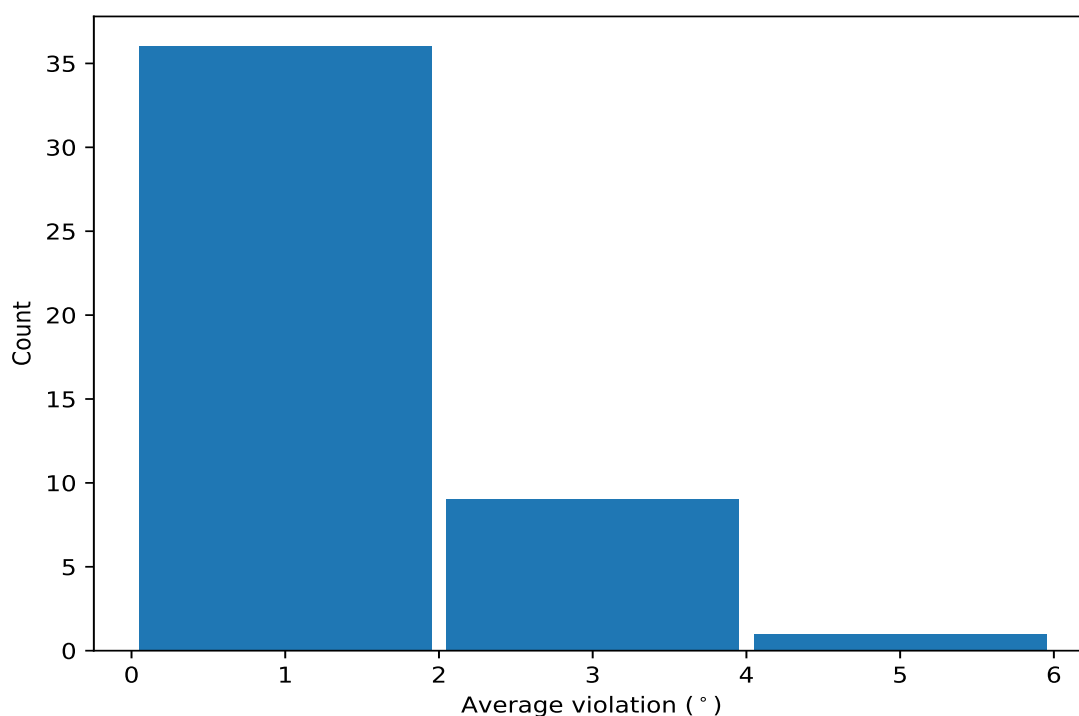
10.3.1 Bar graph : Dihedral-angle Violation statistics for the ensemble [i](#)



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

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

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



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

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

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,150)	1:288:A:GLY:C	1:289:A:CYS:N	1:289:A:CYS:CA	1:289:A:CYS:C	23	1.84	0.61	1.65
(1,271)	1:356:A:PHE:N	1:356:A:PHE:CA	1:356:A:PHE:C	1:357:A:GLN:N	21	2.46	0.42	2.49
(1,185)	1:308:A:PHE:N	1:308:A:PHE:CA	1:308:A:PHE:C	1:309:A:ALA:N	19	2.03	0.79	1.89
(1,104)	1:259:A:LEU:C	1:260:A:ASP:N	1:260:A:ASP:CA	1:260:A:ASP:C	17	2.72	1.17	2.83
(1,261)	1:350:A:TYR:N	1:350:A:TYR:CA	1:350:A:TYR:C	1:351:A:ARG:N	15	2.16	0.72	2.0
(1,231)	1:334:A:SER:N	1:334:A:SER:CA	1:334:A:SER:C	1:335:A:ILE:N	13	1.4	0.22	1.34
(1,134)	1:277:A:TRP:N	1:277:A:TRP:CA	1:277:A:TRP:C	1:278:A:PHE:N	12	1.41	0.21	1.43
(1,279)	1:362:A:LEU:N	1:362:A:LEU:CA	1:362:A:LEU:C	1:363:A:GLU:N	10	1.45	0.1	1.42
(1,171)	1:299:A:GLU:N	1:299:A:GLU:CA	1:299:A:GLU:C	1:300:A:ASN:N	10	1.15	0.1	1.17
(1,106)	1:260:A:ASP:C	1:261:A:LEU:N	1:261:A:LEU:CA	1:261:A:LEU:C	9	1.67	0.47	1.58
(1,142)	1:282:A:SER:C	1:283:A:PRO:N	1:283:A:PRO:CA	1:283:A:PRO:C	9	1.44	0.3	1.29
(1,151)	1:289:A:CYS:N	1:289:A:CYS:CA	1:289:A:CYS:C	1:290:A:ALA:N	8	1.53	0.4	1.32
(1,262)	1:351:A:ARG:C	1:352:A:GLN:N	1:352:A:GLN:CA	1:352:A:GLN:C	8	1.42	0.26	1.48
(1,35)	1:218:A:TYR:N	1:218:A:TYR:CA	1:218:A:TYR:C	1:219:A:GLU:N	8	1.41	0.19	1.44
(1,275)	1:358:A:PRO:N	1:358:A:PRO:CA	1:358:A:PRO:C	1:359:A:TRP:N	6	4.2	1.03	4.3
(1,49)	1:225:A:ASN:N	1:225:A:ASN:CA	1:225:A:ASN:C	1:226:A:GLY:N	6	2.38	0.18	2.34
(1,276)	1:360:A:ASP:C	1:361:A:GLY:N	1:361:A:GLY:CA	1:361:A:GLY:C	6	1.55	0.11	1.54
(1,149)	1:288:A:GLY:N	1:288:A:GLY:CA	1:288:A:GLY:C	1:289:A:CYS:N	6	1.51	0.73	1.24
(1,226)	1:331:A:ALA:C	1:332:A:GLN:N	1:332:A:GLN:CA	1:332:A:GLN:C	6	1.42	0.25	1.32
(1,267)	1:354:A:CYS:N	1:354:A:CYS:CA	1:354:A:CYS:C	1:355:A:PRO:N	6	1.38	0.53	1.11
(1,133)	1:276:A:THR:C	1:277:A:TRP:N	1:277:A:TRP:CA	1:277:A:TRP:C	6	1.38	0.32	1.29

Continued on next page...

Continued from previous page...

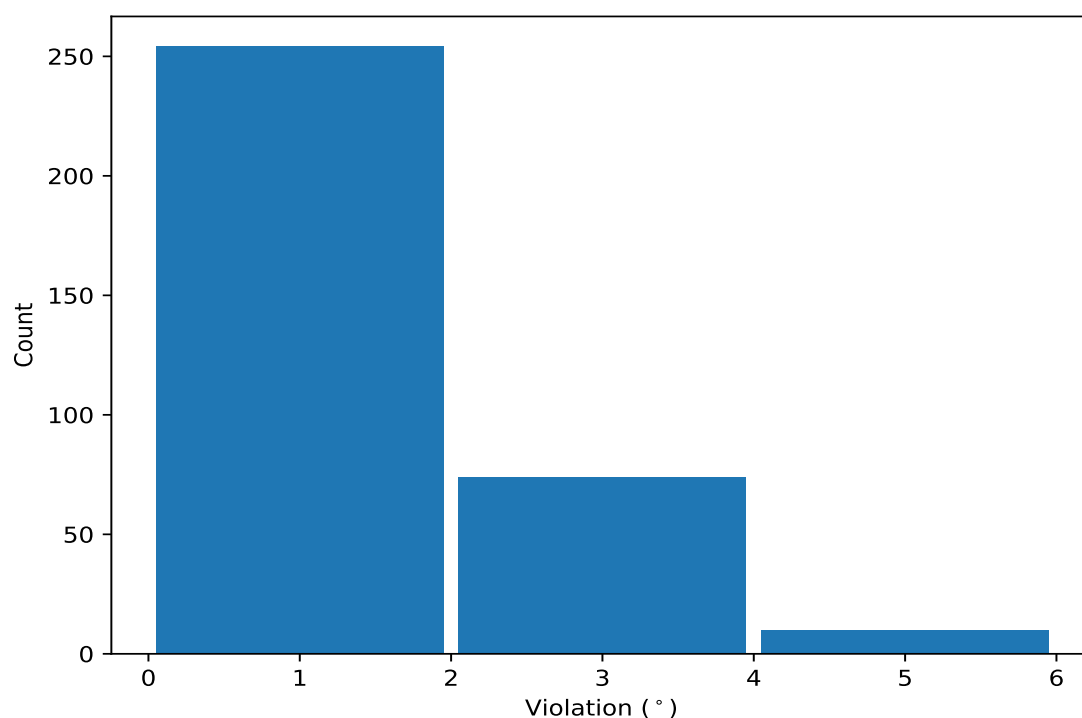
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean	SD ²	Median
(1,66)	1:234:A:HIS:C	1:235:A:MET:N	1:235:A:MET:CA	1:235:A:MET:C	5	1.39	0.2	1.42
(1,177)	1:304:A:ARG:N	1:304:A:ARG:CA	1:304:A:ARG:C	1:305:A:LEU:N	5	1.28	0.26	1.1
(1,136)	1:278:A:PHE:N	1:278:A:PHE:CA	1:278:A:PHE:C	1:279:A:ILE:N	5	1.22	0.13	1.18
(1,264)	1:352:A:GLN:C	1:353:A:GLY:N	1:353:A:GLY:CA	1:353:A:GLY:C	4	2.59	0.39	2.54
(1,263)	1:352:A:GLN:N	1:352:A:GLN:CA	1:352:A:GLN:C	1:353:A:GLY:N	4	2.4	0.55	2.31
(1,145)	1:286:A:SER:N	1:286:A:SER:CA	1:286:A:SER:C	1:287:A:TRP:N	4	2.0	1.07	1.52
(1,73)	1:240:A:ASN:N	1:240:A:ASN:CA	1:240:A:ASN:C	1:241:A:GLU:N	4	1.97	0.8	1.56
(1,107)	1:261:A:LEU:N	1:261:A:LEU:CA	1:261:A:LEU:C	1:262:A:VAL:N	4	1.71	0.55	1.57
(1,101)	1:258:A:PHE:N	1:258:A:PHE:CA	1:258:A:PHE:C	1:259:A:LEU:N	4	1.53	0.32	1.56
(1,217)	1:326:A:LEU:N	1:326:A:LEU:CA	1:326:A:LEU:C	1:327:A:ARG:N	4	1.35	0.19	1.28
(1,268)	1:354:A:CYS:C	1:355:A:PRO:N	1:355:A:PRO:CA	1:355:A:PRO:C	4	1.27	0.15	1.29
(1,7)	1:195:A:PRO:C	1:196:A:ASP:N	1:196:A:ASP:CA	1:196:A:ASP:C	4	1.15	0.02	1.15
(1,64)	1:232:A:ASP:C	1:233:A:GLN:N	1:233:A:GLN:CA	1:233:A:GLN:C	3	3.85	0.67	3.51
(1,182)	1:306:A:ARG:C	1:307:A:ILE:N	1:307:A:ILE:CA	1:307:A:ILE:C	3	1.39	0.29	1.39
(1,117)	1:266:A:GLN:N	1:266:A:GLN:CA	1:266:A:GLN:C	1:267:A:LEU:N	3	1.27	0.08	1.24
(1,152)	1:289:A:CYS:C	1:290:A:ALA:N	1:290:A:ALA:CA	1:290:A:ALA:C	3	1.16	0.12	1.13
(1,28)	1:214:A:THR:C	1:215:A:TYR:N	1:215:A:TYR:CA	1:215:A:TYR:C	3	1.06	0.04	1.07
(1,38)	1:219:A:GLU:C	1:220:A:VAL:N	1:220:A:VAL:CA	1:220:A:VAL:C	2	1.6	0.09	1.6
(1,286)	1:365:A:HIS:C	1:366:A:SER:N	1:366:A:SER:CA	1:366:A:SER:C	2	1.6	0.02	1.6
(1,90)	1:252:A:ARG:C	1:253:A:HIS:N	1:253:A:HIS:CA	1:253:A:HIS:C	2	1.6	0.26	1.6
(1,114)	1:264:A:SER:C	1:265:A:LEU:N	1:265:A:LEU:CA	1:265:A:LEU:C	2	1.54	0.07	1.54
(1,183)	1:307:A:ILE:N	1:307:A:ILE:CA	1:307:A:ILE:C	1:308:A:PHE:N	2	1.44	0.12	1.44
(1,4)	1:194:A:ASP:N	1:194:A:ASP:CA	1:194:A:ASP:C	1:195:A:PRO:N	2	1.36	0.12	1.36
(1,254)	1:346:A:ASP:C	1:347:A:THR:N	1:347:A:THR:CA	1:347:A:THR:C	2	1.32	0.28	1.32
(1,170)	1:298:A:GLN:C	1:299:A:GLU:N	1:299:A:GLU:CA	1:299:A:GLU:C	2	1.27	0.09	1.27

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

10.5 All violated dihedral-angle restraints [i](#)

10.5.1 Histogram : Distribution of violations [i](#)

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



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

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

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,275)	1:358:A:PRO:N	1:358:A:PRO:CA	1:358:A:PRO:C	1:359:A:TRP:N	22	5.58
(1,275)	1:358:A:PRO:N	1:358:A:PRO:CA	1:358:A:PRO:C	1:359:A:TRP:N	24	5.14
(1,104)	1:259:A:LEU:C	1:260:A:ASP:N	1:260:A:ASP:CA	1:260:A:ASP:C	19	4.89
(1,64)	1:232:A:ASP:C	1:233:A:GLN:N	1:233:A:GLN:CA	1:233:A:GLN:C	7	4.79
(1,275)	1:358:A:PRO:N	1:358:A:PRO:CA	1:358:A:PRO:C	1:359:A:TRP:N	14	4.43
(1,275)	1:358:A:PRO:N	1:358:A:PRO:CA	1:358:A:PRO:C	1:359:A:TRP:N	28	4.16
(1,104)	1:259:A:LEU:C	1:260:A:ASP:N	1:260:A:ASP:CA	1:260:A:ASP:C	3	4.11
(1,150)	1:288:A:GLY:C	1:289:A:CYS:N	1:289:A:CYS:CA	1:289:A:CYS:C	29	4.09
(1,104)	1:259:A:LEU:C	1:260:A:ASP:N	1:260:A:ASP:CA	1:260:A:ASP:C	2	4.09
(1,185)	1:308:A:PHE:N	1:308:A:PHE:CA	1:308:A:PHE:C	1:309:A:ALA:N	30	4.04
(1,145)	1:286:A:SER:N	1:286:A:SER:CA	1:286:A:SER:C	1:287:A:TRP:N	7	3.83
(1,104)	1:259:A:LEU:C	1:260:A:ASP:N	1:260:A:ASP:CA	1:260:A:ASP:C	1	3.72
(1,104)	1:259:A:LEU:C	1:260:A:ASP:N	1:260:A:ASP:CA	1:260:A:ASP:C	26	3.59
(1,104)	1:259:A:LEU:C	1:260:A:ASP:N	1:260:A:ASP:CA	1:260:A:ASP:C	22	3.58
(1,64)	1:232:A:ASP:C	1:233:A:GLN:N	1:233:A:GLN:CA	1:233:A:GLN:C	18	3.51
(1,261)	1:350:A:TYR:N	1:350:A:TYR:CA	1:350:A:TYR:C	1:351:A:ARG:N	22	3.41
(1,275)	1:358:A:PRO:N	1:358:A:PRO:CA	1:358:A:PRO:C	1:359:A:TRP:N	1	3.4
(1,73)	1:240:A:ASN:N	1:240:A:ASN:CA	1:240:A:ASN:C	1:241:A:GLU:N	16	3.34
(1,271)	1:356:A:PHE:N	1:356:A:PHE:CA	1:356:A:PHE:C	1:357:A:GLN:N	2	3.31
(1,64)	1:232:A:ASP:C	1:233:A:GLN:N	1:233:A:GLN:CA	1:233:A:GLN:C	24	3.25
(1,263)	1:352:A:GLN:N	1:352:A:GLN:CA	1:352:A:GLN:C	1:353:A:GLY:N	12	3.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,104)	1:259:A:LEU:C	1:260:A:ASP:N	1:260:A:ASP:CA	1:260:A:ASP:C	20	3.18
(1,264)	1:352:A:GLN:C	1:353:A:GLY:N	1:353:A:GLY:CA	1:353:A:GLY:C	12	3.16
(1,149)	1:288:A:GLY:N	1:288:A:GLY:CA	1:288:A:GLY:C	1:289:A:CYS:N	29	3.12
(1,261)	1:350:A:TYR:N	1:350:A:TYR:CA	1:350:A:TYR:C	1:351:A:ARG:N	1	3.05
(1,104)	1:259:A:LEU:C	1:260:A:ASP:N	1:260:A:ASP:CA	1:260:A:ASP:C	4	3.03
(1,271)	1:356:A:PHE:N	1:356:A:PHE:CA	1:356:A:PHE:C	1:357:A:GLN:N	23	3.02
(1,271)	1:356:A:PHE:N	1:356:A:PHE:CA	1:356:A:PHE:C	1:357:A:GLN:N	12	2.97
(1,261)	1:350:A:TYR:N	1:350:A:TYR:CA	1:350:A:TYR:C	1:351:A:ARG:N	9	2.97
(1,261)	1:350:A:TYR:N	1:350:A:TYR:CA	1:350:A:TYR:C	1:351:A:ARG:N	19	2.96
(1,185)	1:308:A:PHE:N	1:308:A:PHE:CA	1:308:A:PHE:C	1:309:A:ALA:N	3	2.96
(1,271)	1:356:A:PHE:N	1:356:A:PHE:CA	1:356:A:PHE:C	1:357:A:GLN:N	10	2.85
(1,271)	1:356:A:PHE:N	1:356:A:PHE:CA	1:356:A:PHE:C	1:357:A:GLN:N	15	2.84
(1,185)	1:308:A:PHE:N	1:308:A:PHE:CA	1:308:A:PHE:C	1:309:A:ALA:N	14	2.83
(1,104)	1:259:A:LEU:C	1:260:A:ASP:N	1:260:A:ASP:CA	1:260:A:ASP:C	11	2.83
(1,185)	1:308:A:PHE:N	1:308:A:PHE:CA	1:308:A:PHE:C	1:309:A:ALA:N	27	2.79
(1,104)	1:259:A:LEU:C	1:260:A:ASP:N	1:260:A:ASP:CA	1:260:A:ASP:C	17	2.79
(1,185)	1:308:A:PHE:N	1:308:A:PHE:CA	1:308:A:PHE:C	1:309:A:ALA:N	10	2.76
(1,271)	1:356:A:PHE:N	1:356:A:PHE:CA	1:356:A:PHE:C	1:357:A:GLN:N	6	2.74
(1,150)	1:288:A:GLY:C	1:289:A:CYS:N	1:289:A:CYS:CA	1:289:A:CYS:C	23	2.73
(1,271)	1:356:A:PHE:N	1:356:A:PHE:CA	1:356:A:PHE:C	1:357:A:GLN:N	8	2.71
(1,264)	1:352:A:GLN:C	1:353:A:GLY:N	1:353:A:GLY:CA	1:353:A:GLY:C	17	2.7
(1,271)	1:356:A:PHE:N	1:356:A:PHE:CA	1:356:A:PHE:C	1:357:A:GLN:N	13	2.68
(1,49)	1:225:A:ASN:N	1:225:A:ASN:CA	1:225:A:ASN:C	1:226:A:GLY:N	26	2.68
(1,271)	1:356:A:PHE:N	1:356:A:PHE:CA	1:356:A:PHE:C	1:357:A:GLN:N	9	2.66
(1,263)	1:352:A:GLN:N	1:352:A:GLN:CA	1:352:A:GLN:C	1:353:A:GLY:N	17	2.62
(1,107)	1:261:A:LEU:N	1:261:A:LEU:CA	1:261:A:LEU:C	1:262:A:VAL:N	8	2.59
(1,261)	1:350:A:TYR:N	1:350:A:TYR:CA	1:350:A:TYR:C	1:351:A:ARG:N	6	2.56
(1,261)	1:350:A:TYR:N	1:350:A:TYR:CA	1:350:A:TYR:C	1:351:A:ARG:N	16	2.53
(1,185)	1:308:A:PHE:N	1:308:A:PHE:CA	1:308:A:PHE:C	1:309:A:ALA:N	23	2.53
(1,267)	1:354:A:CYS:N	1:354:A:CYS:CA	1:354:A:CYS:C	1:355:A:PRO:N	23	2.52
(1,275)	1:358:A:PRO:N	1:358:A:PRO:CA	1:358:A:PRO:C	1:359:A:TRP:N	21	2.51
(1,261)	1:350:A:TYR:N	1:350:A:TYR:CA	1:350:A:TYR:C	1:351:A:ARG:N	14	2.5
(1,271)	1:356:A:PHE:N	1:356:A:PHE:CA	1:356:A:PHE:C	1:357:A:GLN:N	11	2.49
(1,271)	1:356:A:PHE:N	1:356:A:PHE:CA	1:356:A:PHE:C	1:357:A:GLN:N	16	2.49
(1,49)	1:225:A:ASN:N	1:225:A:ASN:CA	1:225:A:ASN:C	1:226:A:GLY:N	3	2.49
(1,271)	1:356:A:PHE:N	1:356:A:PHE:CA	1:356:A:PHE:C	1:357:A:GLN:N	5	2.46
(1,185)	1:308:A:PHE:N	1:308:A:PHE:CA	1:308:A:PHE:C	1:309:A:ALA:N	4	2.42
(1,264)	1:352:A:GLN:C	1:353:A:GLY:N	1:353:A:GLY:CA	1:353:A:GLY:C	28	2.39
(1,150)	1:288:A:GLY:C	1:289:A:CYS:N	1:289:A:CYS:CA	1:289:A:CYS:C	25	2.39
(1,106)	1:260:A:ASP:C	1:261:A:LEU:N	1:261:A:LEU:CA	1:261:A:LEU:C	24	2.38
(1,185)	1:308:A:PHE:N	1:308:A:PHE:CA	1:308:A:PHE:C	1:309:A:ALA:N	13	2.37
(1,150)	1:288:A:GLY:C	1:289:A:CYS:N	1:289:A:CYS:CA	1:289:A:CYS:C	24	2.36
(1,49)	1:225:A:ASN:N	1:225:A:ASN:CA	1:225:A:ASN:C	1:226:A:GLY:N	1	2.35
(1,49)	1:225:A:ASN:N	1:225:A:ASN:CA	1:225:A:ASN:C	1:226:A:GLY:N	25	2.34
(1,49)	1:225:A:ASN:N	1:225:A:ASN:CA	1:225:A:ASN:C	1:226:A:GLY:N	14	2.33
(1,285)	1:365:A:HIS:N	1:365:A:HIS:CA	1:365:A:HIS:C	1:366:A:SER:N	19	2.32
(1,271)	1:356:A:PHE:N	1:356:A:PHE:CA	1:356:A:PHE:C	1:357:A:GLN:N	17	2.29
(1,271)	1:356:A:PHE:N	1:356:A:PHE:CA	1:356:A:PHE:C	1:357:A:GLN:N	4	2.28
(1,271)	1:356:A:PHE:N	1:356:A:PHE:CA	1:356:A:PHE:C	1:357:A:GLN:N	27	2.26
(1,151)	1:289:A:CYS:N	1:289:A:CYS:CA	1:289:A:CYS:C	1:290:A:ALA:N	8	2.26
(1,106)	1:260:A:ASP:C	1:261:A:LEU:N	1:261:A:LEU:CA	1:261:A:LEU:C	6	2.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,106)	1:260:A:ASP:C	1:261:A:LEU:N	1:261:A:LEU:CA	1:261:A:LEU:C	28	2.17
(1,150)	1:288:A:GLY:C	1:289:A:CYS:N	1:289:A:CYS:CA	1:289:A:CYS:C	7	2.16
(1,104)	1:259:A:LEU:C	1:260:A:ASP:N	1:260:A:ASP:CA	1:260:A:ASP:C	8	2.16
(1,104)	1:259:A:LEU:C	1:260:A:ASP:N	1:260:A:ASP:CA	1:260:A:ASP:C	5	2.15
(1,271)	1:356:A:PHE:N	1:356:A:PHE:CA	1:356:A:PHE:C	1:357:A:GLN:N	18	2.14
(1,271)	1:356:A:PHE:N	1:356:A:PHE:CA	1:356:A:PHE:C	1:357:A:GLN:N	30	2.1
(1,264)	1:352:A:GLN:C	1:353:A:GLY:N	1:353:A:GLY:CA	1:353:A:GLY:C	2	2.1
(1,49)	1:225:A:ASN:N	1:225:A:ASN:CA	1:225:A:ASN:C	1:226:A:GLY:N	23	2.07
(1,133)	1:276:A:THR:C	1:277:A:TRP:N	1:277:A:TRP:CA	1:277:A:TRP:C	2	2.02
(1,151)	1:289:A:CYS:N	1:289:A:CYS:CA	1:289:A:CYS:C	1:290:A:ALA:N	15	2.01
(1,263)	1:352:A:GLN:N	1:352:A:GLN:CA	1:352:A:GLN:C	1:353:A:GLY:N	28	2.0
(1,261)	1:350:A:TYR:N	1:350:A:TYR:CA	1:350:A:TYR:C	1:351:A:ARG:N	8	2.0
(1,150)	1:288:A:GLY:C	1:289:A:CYS:N	1:289:A:CYS:CA	1:289:A:CYS:C	10	1.99
(1,150)	1:288:A:GLY:C	1:289:A:CYS:N	1:289:A:CYS:CA	1:289:A:CYS:C	20	1.99
(1,185)	1:308:A:PHE:N	1:308:A:PHE:CA	1:308:A:PHE:C	1:309:A:ALA:N	9	1.98
(1,271)	1:356:A:PHE:N	1:356:A:PHE:CA	1:356:A:PHE:C	1:357:A:GLN:N	26	1.95
(1,261)	1:350:A:TYR:N	1:350:A:TYR:CA	1:350:A:TYR:C	1:351:A:ARG:N	18	1.95
(1,271)	1:356:A:PHE:N	1:356:A:PHE:CA	1:356:A:PHE:C	1:357:A:GLN:N	7	1.94
(1,142)	1:282:A:SER:C	1:283:A:PRO:N	1:283:A:PRO:CA	1:283:A:PRO:C	11	1.93
(1,101)	1:258:A:PHE:N	1:258:A:PHE:CA	1:258:A:PHE:C	1:259:A:LEU:N	27	1.93
(1,185)	1:308:A:PHE:N	1:308:A:PHE:CA	1:308:A:PHE:C	1:309:A:ALA:N	6	1.89
(1,150)	1:288:A:GLY:C	1:289:A:CYS:N	1:289:A:CYS:CA	1:289:A:CYS:C	3	1.86
(1,90)	1:252:A:ARG:C	1:253:A:HIS:N	1:253:A:HIS:CA	1:253:A:HIS:C	29	1.86
(1,226)	1:331:A:ALA:C	1:332:A:GLN:N	1:332:A:GLN:CA	1:332:A:GLN:C	4	1.84
(1,142)	1:282:A:SER:C	1:283:A:PRO:N	1:283:A:PRO:CA	1:283:A:PRO:C	18	1.84
(1,106)	1:260:A:ASP:C	1:261:A:LEU:N	1:261:A:LEU:CA	1:261:A:LEU:C	25	1.84
(1,134)	1:277:A:TRP:N	1:277:A:TRP:CA	1:277:A:TRP:C	1:278:A:PHE:N	10	1.83
(1,231)	1:334:A:SER:N	1:334:A:SER:CA	1:334:A:SER:C	1:335:A:ILE:N	16	1.82
(1,150)	1:288:A:GLY:C	1:289:A:CYS:N	1:289:A:CYS:CA	1:289:A:CYS:C	30	1.81
(1,263)	1:352:A:GLN:N	1:352:A:GLN:CA	1:352:A:GLN:C	1:353:A:GLY:N	2	1.79
(1,261)	1:350:A:TYR:N	1:350:A:TYR:CA	1:350:A:TYR:C	1:351:A:ARG:N	10	1.77
(1,151)	1:289:A:CYS:N	1:289:A:CYS:CA	1:289:A:CYS:C	1:290:A:ALA:N	5	1.77
(1,271)	1:356:A:PHE:N	1:356:A:PHE:CA	1:356:A:PHE:C	1:357:A:GLN:N	3	1.76
(1,262)	1:351:A:ARG:C	1:352:A:GLN:N	1:352:A:GLN:CA	1:352:A:GLN:C	21	1.76
(1,231)	1:334:A:SER:N	1:334:A:SER:CA	1:334:A:SER:C	1:335:A:ILE:N	19	1.75
(1,182)	1:306:A:ARG:C	1:307:A:ILE:N	1:307:A:ILE:CA	1:307:A:ILE:C	9	1.75
(1,150)	1:288:A:GLY:C	1:289:A:CYS:N	1:289:A:CYS:CA	1:289:A:CYS:C	15	1.75
(1,72)	1:239:A:CYS:C	1:240:A:ASN:N	1:240:A:ASN:CA	1:240:A:ASN:C	16	1.73
(1,177)	1:304:A:ARG:N	1:304:A:ARG:CA	1:304:A:ARG:C	1:305:A:LEU:N	7	1.72
(1,107)	1:261:A:LEU:N	1:261:A:LEU:CA	1:261:A:LEU:C	1:262:A:VAL:N	25	1.72
(1,35)	1:218:A:TYR:N	1:218:A:TYR:CA	1:218:A:TYR:C	1:219:A:GLU:N	30	1.72
(1,73)	1:240:A:ASN:N	1:240:A:ASN:CA	1:240:A:ASN:C	1:241:A:GLU:N	3	1.71
(1,276)	1:360:A:ASP:C	1:361:A:GLY:N	1:361:A:GLY:CA	1:361:A:GLY:C	13	1.7
(1,142)	1:282:A:SER:C	1:283:A:PRO:N	1:283:A:PRO:CA	1:283:A:PRO:C	19	1.7
(1,101)	1:258:A:PHE:N	1:258:A:PHE:CA	1:258:A:PHE:C	1:259:A:LEU:N	16	1.7
(1,38)	1:219:A:GLU:C	1:220:A:VAL:N	1:220:A:VAL:CA	1:220:A:VAL:C	7	1.7
(1,271)	1:356:A:PHE:N	1:356:A:PHE:CA	1:356:A:PHE:C	1:357:A:GLN:N	25	1.69
(1,66)	1:234:A:HIS:C	1:235:A:MET:N	1:235:A:MET:CA	1:235:A:MET:C	6	1.68
(1,276)	1:360:A:ASP:C	1:361:A:GLY:N	1:361:A:GLY:CA	1:361:A:GLY:C	8	1.66
(1,262)	1:351:A:ARG:C	1:352:A:GLN:N	1:352:A:GLN:CA	1:352:A:GLN:C	3	1.66
(1,217)	1:326:A:LEU:N	1:326:A:LEU:CA	1:326:A:LEU:C	1:327:A:ARG:N	29	1.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,185)	1:308:A:PHE:N	1:308:A:PHE:CA	1:308:A:PHE:C	1:309:A:ALA:N	7	1.66
(1,150)	1:288:A:GLY:C	1:289:A:CYS:N	1:289:A:CYS:CA	1:289:A:CYS:C	22	1.66
(1,284)	1:364:A:GLU:C	1:365:A:HIS:N	1:365:A:HIS:CA	1:365:A:HIS:C	12	1.65
(1,262)	1:351:A:ARG:C	1:352:A:GLN:N	1:352:A:GLN:CA	1:352:A:GLN:C	25	1.65
(1,231)	1:334:A:SER:N	1:334:A:SER:CA	1:334:A:SER:C	1:335:A:ILE:N	17	1.65
(1,226)	1:331:A:ALA:C	1:332:A:GLN:N	1:332:A:GLN:CA	1:332:A:GLN:C	29	1.65
(1,150)	1:288:A:GLY:C	1:289:A:CYS:N	1:289:A:CYS:CA	1:289:A:CYS:C	5	1.65
(1,286)	1:365:A:HIS:C	1:366:A:SER:N	1:366:A:SER:CA	1:366:A:SER:C	12	1.62
(1,134)	1:277:A:TRP:N	1:277:A:TRP:CA	1:277:A:TRP:C	1:278:A:PHE:N	23	1.62
(1,35)	1:218:A:TYR:N	1:218:A:TYR:CA	1:218:A:TYR:C	1:219:A:GLU:N	8	1.62
(1,279)	1:362:A:LEU:N	1:362:A:LEU:CA	1:362:A:LEU:C	1:363:A:GLU:N	27	1.61
(1,272)	1:356:A:PHE:C	1:357:A:GLN:N	1:357:A:GLN:CA	1:357:A:GLN:C	28	1.61
(1,262)	1:351:A:ARG:C	1:352:A:GLN:N	1:352:A:GLN:CA	1:352:A:GLN:C	22	1.61
(1,114)	1:264:A:SER:C	1:265:A:LEU:N	1:265:A:LEU:CA	1:265:A:LEU:C	12	1.61
(1,254)	1:346:A:ASP:C	1:347:A:THR:N	1:347:A:THR:CA	1:347:A:THR:C	19	1.6
(1,279)	1:362:A:LEU:N	1:362:A:LEU:CA	1:362:A:LEU:C	1:363:A:GLU:N	2	1.59
(1,104)	1:259:A:LEU:C	1:260:A:ASP:N	1:260:A:ASP:CA	1:260:A:ASP:C	28	1.59
(1,286)	1:365:A:HIS:C	1:366:A:SER:N	1:366:A:SER:CA	1:366:A:SER:C	27	1.58
(1,150)	1:288:A:GLY:C	1:289:A:CYS:N	1:289:A:CYS:CA	1:289:A:CYS:C	2	1.58
(1,150)	1:288:A:GLY:C	1:289:A:CYS:N	1:289:A:CYS:CA	1:289:A:CYS:C	9	1.58
(1,134)	1:277:A:TRP:N	1:277:A:TRP:CA	1:277:A:TRP:C	1:278:A:PHE:N	15	1.58
(1,106)	1:260:A:ASP:C	1:261:A:LEU:N	1:261:A:LEU:CA	1:261:A:LEU:C	30	1.58
(1,276)	1:360:A:ASP:C	1:361:A:GLY:N	1:361:A:GLY:CA	1:361:A:GLY:C	10	1.57
(1,150)	1:288:A:GLY:C	1:289:A:CYS:N	1:289:A:CYS:CA	1:289:A:CYS:C	14	1.57
(1,145)	1:286:A:SER:N	1:286:A:SER:CA	1:286:A:SER:C	1:287:A:TRP:N	9	1.57
(1,183)	1:307:A:ILE:N	1:307:A:ILE:CA	1:307:A:ILE:C	1:308:A:PHE:N	18	1.56
(1,150)	1:288:A:GLY:C	1:289:A:CYS:N	1:289:A:CYS:CA	1:289:A:CYS:C	19	1.56
(1,231)	1:334:A:SER:N	1:334:A:SER:CA	1:334:A:SER:C	1:335:A:ILE:N	29	1.55
(1,185)	1:308:A:PHE:N	1:308:A:PHE:CA	1:308:A:PHE:C	1:309:A:ALA:N	29	1.55
(1,134)	1:277:A:TRP:N	1:277:A:TRP:CA	1:277:A:TRP:C	1:278:A:PHE:N	27	1.55
(1,279)	1:362:A:LEU:N	1:362:A:LEU:CA	1:362:A:LEU:C	1:363:A:GLU:N	21	1.54
(1,261)	1:350:A:TYR:N	1:350:A:TYR:CA	1:350:A:TYR:C	1:351:A:ARG:N	7	1.53
(1,231)	1:334:A:SER:N	1:334:A:SER:CA	1:334:A:SER:C	1:335:A:ILE:N	26	1.53
(1,276)	1:360:A:ASP:C	1:361:A:GLY:N	1:361:A:GLY:CA	1:361:A:GLY:C	25	1.52
(1,150)	1:288:A:GLY:C	1:289:A:CYS:N	1:289:A:CYS:CA	1:289:A:CYS:C	17	1.52
(1,38)	1:219:A:GLU:C	1:220:A:VAL:N	1:220:A:VAL:CA	1:220:A:VAL:C	24	1.51
(1,261)	1:350:A:TYR:N	1:350:A:TYR:CA	1:350:A:TYR:C	1:351:A:ARG:N	2	1.5
(1,104)	1:259:A:LEU:C	1:260:A:ASP:N	1:260:A:ASP:CA	1:260:A:ASP:C	27	1.5
(1,66)	1:234:A:HIS:C	1:235:A:MET:N	1:235:A:MET:CA	1:235:A:MET:C	12	1.5
(1,279)	1:362:A:LEU:N	1:362:A:LEU:CA	1:362:A:LEU:C	1:363:A:GLU:N	9	1.49
(1,142)	1:282:A:SER:C	1:283:A:PRO:N	1:283:A:PRO:CA	1:283:A:PRO:C	1	1.49
(1,133)	1:276:A:THR:C	1:277:A:TRP:N	1:277:A:TRP:CA	1:277:A:TRP:C	26	1.49
(1,4)	1:194:A:ASP:N	1:194:A:ASP:CA	1:194:A:ASP:C	1:195:A:PRO:N	20	1.48
(1,276)	1:360:A:ASP:C	1:361:A:GLY:N	1:361:A:GLY:CA	1:361:A:GLY:C	26	1.47
(1,114)	1:264:A:SER:C	1:265:A:LEU:N	1:265:A:LEU:CA	1:265:A:LEU:C	27	1.47
(1,35)	1:218:A:TYR:N	1:218:A:TYR:CA	1:218:A:TYR:C	1:219:A:GLU:N	17	1.47
(1,267)	1:354:A:CYS:N	1:354:A:CYS:CA	1:354:A:CYS:C	1:355:A:PRO:N	28	1.46
(1,261)	1:350:A:TYR:N	1:350:A:TYR:CA	1:350:A:TYR:C	1:351:A:ARG:N	29	1.46
(1,150)	1:288:A:GLY:C	1:289:A:CYS:N	1:289:A:CYS:CA	1:289:A:CYS:C	21	1.46
(1,145)	1:286:A:SER:N	1:286:A:SER:CA	1:286:A:SER:C	1:287:A:TRP:N	1	1.46
(1,134)	1:277:A:TRP:N	1:277:A:TRP:CA	1:277:A:TRP:C	1:278:A:PHE:N	20	1.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,174)	1:301:A:THR:C	1:302:A:HIS:N	1:302:A:HIS:CA	1:302:A:HIS:C	3	1.45
(1,274)	1:357:A:GLN:C	1:358:A:PRO:N	1:358:A:PRO:CA	1:358:A:PRO:C	28	1.44
(1,177)	1:304:A:ARG:N	1:304:A:ARG:CA	1:304:A:ARG:C	1:305:A:LEU:N	18	1.44
(1,150)	1:288:A:GLY:C	1:289:A:CYS:N	1:289:A:CYS:CA	1:289:A:CYS:C	6	1.44
(1,134)	1:277:A:TRP:N	1:277:A:TRP:CA	1:277:A:TRP:C	1:278:A:PHE:N	8	1.44
(1,35)	1:218:A:TYR:N	1:218:A:TYR:CA	1:218:A:TYR:C	1:219:A:GLU:N	20	1.44
(1,279)	1:362:A:LEU:N	1:362:A:LEU:CA	1:362:A:LEU:C	1:363:A:GLU:N	15	1.43
(1,185)	1:308:A:PHE:N	1:308:A:PHE:CA	1:308:A:PHE:C	1:309:A:ALA:N	25	1.43
(1,35)	1:218:A:TYR:N	1:218:A:TYR:CA	1:218:A:TYR:C	1:219:A:GLU:N	5	1.43
(1,279)	1:362:A:LEU:N	1:362:A:LEU:CA	1:362:A:LEU:C	1:363:A:GLU:N	6	1.42
(1,268)	1:354:A:CYS:C	1:355:A:PRO:N	1:355:A:PRO:CA	1:355:A:PRO:C	5	1.42
(1,268)	1:354:A:CYS:C	1:355:A:PRO:N	1:355:A:PRO:CA	1:355:A:PRO:C	15	1.42
(1,245)	1:342:A:GLU:N	1:342:A:GLU:CA	1:342:A:GLU:C	1:343:A:TYR:N	30	1.42
(1,134)	1:277:A:TRP:N	1:277:A:TRP:CA	1:277:A:TRP:C	1:278:A:PHE:N	30	1.42
(1,107)	1:261:A:LEU:N	1:261:A:LEU:CA	1:261:A:LEU:C	1:262:A:VAL:N	24	1.42
(1,101)	1:258:A:PHE:N	1:258:A:PHE:CA	1:258:A:PHE:C	1:259:A:LEU:N	12	1.42
(1,73)	1:240:A:ASN:N	1:240:A:ASN:CA	1:240:A:ASN:C	1:241:A:GLU:N	29	1.42
(1,66)	1:234:A:HIS:C	1:235:A:MET:N	1:235:A:MET:CA	1:235:A:MET:C	3	1.42
(1,279)	1:362:A:LEU:N	1:362:A:LEU:CA	1:362:A:LEU:C	1:363:A:GLU:N	16	1.4
(1,259)	1:349:A:VAL:N	1:349:A:VAL:CA	1:349:A:VAL:C	1:350:A:TYR:N	27	1.4
(1,195)	1:314:A:ASP:N	1:314:A:ASP:CA	1:314:A:ASP:C	1:315:A:TYR:N	21	1.4
(1,185)	1:308:A:PHE:N	1:308:A:PHE:CA	1:308:A:PHE:C	1:309:A:ALA:N	2	1.4
(1,136)	1:278:A:PHE:N	1:278:A:PHE:CA	1:278:A:PHE:C	1:279:A:ILE:N	2	1.4
(1,73)	1:240:A:ASN:N	1:240:A:ASN:CA	1:240:A:ASN:C	1:241:A:GLU:N	2	1.4
(1,182)	1:306:A:ARG:C	1:307:A:ILE:N	1:307:A:ILE:CA	1:307:A:ILE:C	13	1.39
(1,117)	1:266:A:GLN:N	1:266:A:GLN:CA	1:266:A:GLN:C	1:267:A:LEU:N	10	1.39
(1,279)	1:362:A:LEU:N	1:362:A:LEU:CA	1:362:A:LEU:C	1:363:A:GLU:N	3	1.38
(1,279)	1:362:A:LEU:N	1:362:A:LEU:CA	1:362:A:LEU:C	1:363:A:GLU:N	7	1.38
(1,150)	1:288:A:GLY:C	1:289:A:CYS:N	1:289:A:CYS:CA	1:289:A:CYS:C	11	1.38
(1,40)	1:220:A:VAL:C	1:221:A:GLU:N	1:221:A:GLU:CA	1:221:A:GLU:C	28	1.38
(1,276)	1:360:A:ASP:C	1:361:A:GLY:N	1:361:A:GLY:CA	1:361:A:GLY:C	4	1.37
(1,149)	1:288:A:GLY:N	1:288:A:GLY:CA	1:288:A:GLY:C	1:289:A:CYS:N	10	1.37
(1,149)	1:288:A:GLY:N	1:288:A:GLY:CA	1:288:A:GLY:C	1:289:A:CYS:N	23	1.37
(1,262)	1:351:A:ARG:C	1:352:A:GLN:N	1:352:A:GLN:CA	1:352:A:GLN:C	6	1.36
(1,231)	1:334:A:SER:N	1:334:A:SER:CA	1:334:A:SER:C	1:335:A:ILE:N	4	1.36
(1,170)	1:298:A:GLN:C	1:299:A:GLU:N	1:299:A:GLU:CA	1:299:A:GLU:C	25	1.36
(1,136)	1:278:A:PHE:N	1:278:A:PHE:CA	1:278:A:PHE:C	1:279:A:ILE:N	5	1.35
(1,134)	1:277:A:TRP:N	1:277:A:TRP:CA	1:277:A:TRP:C	1:278:A:PHE:N	3	1.35
(1,231)	1:334:A:SER:N	1:334:A:SER:CA	1:334:A:SER:C	1:335:A:ILE:N	22	1.34
(1,226)	1:331:A:ALA:C	1:332:A:GLN:N	1:332:A:GLN:CA	1:332:A:GLN:C	3	1.34
(1,217)	1:326:A:LEU:N	1:326:A:LEU:CA	1:326:A:LEU:C	1:327:A:ARG:N	15	1.34
(1,185)	1:308:A:PHE:N	1:308:A:PHE:CA	1:308:A:PHE:C	1:309:A:ALA:N	24	1.34
(1,151)	1:289:A:CYS:N	1:289:A:CYS:CA	1:289:A:CYS:C	1:290:A:ALA:N	20	1.33
(1,106)	1:260:A:ASP:C	1:261:A:LEU:N	1:261:A:LEU:CA	1:261:A:LEU:C	5	1.33
(1,90)	1:252:A:ARG:C	1:253:A:HIS:N	1:253:A:HIS:CA	1:253:A:HIS:C	8	1.33
(1,231)	1:334:A:SER:N	1:334:A:SER:CA	1:334:A:SER:C	1:335:A:ILE:N	13	1.32
(1,183)	1:307:A:ILE:N	1:307:A:ILE:CA	1:307:A:ILE:C	1:308:A:PHE:N	2	1.32
(1,152)	1:289:A:CYS:C	1:290:A:ALA:N	1:290:A:ALA:CA	1:290:A:ALA:C	24	1.32
(1,133)	1:276:A:THR:C	1:277:A:TRP:N	1:277:A:TRP:CA	1:277:A:TRP:C	1	1.32
(1,151)	1:289:A:CYS:N	1:289:A:CYS:CA	1:289:A:CYS:C	1:290:A:ALA:N	30	1.31
(1,226)	1:331:A:ALA:C	1:332:A:GLN:N	1:332:A:GLN:CA	1:332:A:GLN:C	20	1.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,185)	1:308:A:PHE:N	1:308:A:PHE:CA	1:308:A:PHE:C	1:309:A:ALA:N	5	1.3
(1,231)	1:334:A:SER:N	1:334:A:SER:CA	1:334:A:SER:C	1:335:A:ILE:N	14	1.29
(1,142)	1:282:A:SER:C	1:283:A:PRO:N	1:283:A:PRO:CA	1:283:A:PRO:C	13	1.29
(1,21)	1:202:A:PHE:C	1:203:A:ASN:N	1:203:A:ASN:CA	1:203:A:ASN:C	22	1.29
(1,171)	1:299:A:GLU:N	1:299:A:GLU:CA	1:299:A:GLU:C	1:300:A:ASN:N	11	1.28
(1,150)	1:288:A:GLY:C	1:289:A:CYS:N	1:289:A:CYS:CA	1:289:A:CYS:C	26	1.28
(1,226)	1:331:A:ALA:C	1:332:A:GLN:N	1:332:A:GLN:CA	1:332:A:GLN:C	25	1.27
(1,142)	1:282:A:SER:C	1:283:A:PRO:N	1:283:A:PRO:CA	1:283:A:PRO:C	27	1.27
(1,35)	1:218:A:TYR:N	1:218:A:TYR:CA	1:218:A:TYR:C	1:219:A:GLU:N	2	1.27
(1,279)	1:362:A:LEU:N	1:362:A:LEU:CA	1:362:A:LEU:C	1:363:A:GLU:N	1	1.26
(1,171)	1:299:A:GLU:N	1:299:A:GLU:CA	1:299:A:GLU:C	1:300:A:ASN:N	18	1.26
(1,133)	1:276:A:THR:C	1:277:A:TRP:N	1:277:A:TRP:CA	1:277:A:TRP:C	5	1.26
(1,171)	1:299:A:GLU:N	1:299:A:GLU:CA	1:299:A:GLU:C	1:300:A:ASN:N	12	1.25
(1,150)	1:288:A:GLY:C	1:289:A:CYS:N	1:289:A:CYS:CA	1:289:A:CYS:C	1	1.25
(1,134)	1:277:A:TRP:N	1:277:A:TRP:CA	1:277:A:TRP:C	1:278:A:PHE:N	4	1.25
(1,134)	1:277:A:TRP:N	1:277:A:TRP:CA	1:277:A:TRP:C	1:278:A:PHE:N	11	1.25
(1,171)	1:299:A:GLU:N	1:299:A:GLU:CA	1:299:A:GLU:C	1:300:A:ASN:N	6	1.24
(1,171)	1:299:A:GLU:N	1:299:A:GLU:CA	1:299:A:GLU:C	1:300:A:ASN:N	7	1.24
(1,151)	1:289:A:CYS:N	1:289:A:CYS:CA	1:289:A:CYS:C	1:290:A:ALA:N	4	1.24
(1,117)	1:266:A:GLN:N	1:266:A:GLN:CA	1:266:A:GLN:C	1:267:A:LEU:N	9	1.24
(1,203)	1:319:A:TYR:N	1:319:A:TYR:CA	1:319:A:TYR:C	1:320:A:LYS:N	20	1.23
(1,4)	1:194:A:ASP:N	1:194:A:ASP:CA	1:194:A:ASP:C	1:195:A:PRO:N	8	1.23
(1,217)	1:326:A:LEU:N	1:326:A:LEU:CA	1:326:A:LEU:C	1:327:A:ARG:N	23	1.22
(1,140)	1:281:A:TRP:C	1:282:A:SER:N	1:282:A:SER:CA	1:282:A:SER:C	23	1.22
(1,74)	1:240:A:ASN:C	1:241:A:GLU:N	1:241:A:GLU:CA	1:241:A:GLU:C	2	1.22
(1,151)	1:289:A:CYS:N	1:289:A:CYS:CA	1:289:A:CYS:C	1:290:A:ALA:N	28	1.21
(1,106)	1:260:A:ASP:C	1:261:A:LEU:N	1:261:A:LEU:CA	1:261:A:LEU:C	3	1.21
(1,35)	1:218:A:TYR:N	1:218:A:TYR:CA	1:218:A:TYR:C	1:219:A:GLU:N	27	1.21
(1,261)	1:350:A:TYR:N	1:350:A:TYR:CA	1:350:A:TYR:C	1:351:A:ARG:N	27	1.2
(1,185)	1:308:A:PHE:N	1:308:A:PHE:CA	1:308:A:PHE:C	1:309:A:ALA:N	28	1.2
(1,156)	1:291:A:GLY:C	1:292:A:GLU:N	1:292:A:GLU:CA	1:292:A:GLU:C	9	1.2
(1,66)	1:234:A:HIS:C	1:235:A:MET:N	1:235:A:MET:CA	1:235:A:MET:C	19	1.2
(1,231)	1:334:A:SER:N	1:334:A:SER:CA	1:334:A:SER:C	1:335:A:ILE:N	11	1.19
(1,217)	1:326:A:LEU:N	1:326:A:LEU:CA	1:326:A:LEU:C	1:327:A:ARG:N	4	1.19
(1,170)	1:298:A:GLN:C	1:299:A:GLU:N	1:299:A:GLU:CA	1:299:A:GLU:C	7	1.19
(1,144)	1:285:A:PHE:C	1:286:A:SER:N	1:286:A:SER:CA	1:286:A:SER:C	13	1.19
(1,142)	1:282:A:SER:C	1:283:A:PRO:N	1:283:A:PRO:CA	1:283:A:PRO:C	4	1.19
(1,142)	1:282:A:SER:C	1:283:A:PRO:N	1:283:A:PRO:CA	1:283:A:PRO:C	12	1.19
(1,117)	1:266:A:GLN:N	1:266:A:GLN:CA	1:266:A:GLN:C	1:267:A:LEU:N	7	1.19
(1,77)	1:245:A:LEU:N	1:245:A:LEU:CA	1:245:A:LEU:C	1:246:A:LEU:N	16	1.19
(1,60)	1:230:A:LEU:C	1:231:A:MET:N	1:231:A:MET:CA	1:231:A:MET:C	28	1.19
(1,300)	1:372:A:ARG:C	1:373:A:LEU:N	1:373:A:LEU:CA	1:373:A:LEU:C	5	1.18
(1,136)	1:278:A:PHE:N	1:278:A:PHE:CA	1:278:A:PHE:C	1:279:A:ILE:N	4	1.18
(1,20)	1:202:A:PHE:N	1:202:A:PHE:CA	1:202:A:PHE:C	1:203:A:ASN:N	22	1.18
(1,231)	1:334:A:SER:N	1:334:A:SER:CA	1:334:A:SER:C	1:335:A:ILE:N	15	1.17
(1,231)	1:334:A:SER:N	1:334:A:SER:CA	1:334:A:SER:C	1:335:A:ILE:N	27	1.17
(1,89)	1:252:A:ARG:N	1:252:A:ARG:CA	1:252:A:ARG:C	1:253:A:HIS:N	8	1.17
(1,7)	1:195:A:PRO:C	1:196:A:ASP:N	1:196:A:ASP:CA	1:196:A:ASP:C	25	1.17
(1,268)	1:354:A:CYS:C	1:355:A:PRO:N	1:355:A:PRO:CA	1:355:A:PRO:C	14	1.16
(1,106)	1:260:A:ASP:C	1:261:A:LEU:N	1:261:A:LEU:CA	1:261:A:LEU:C	8	1.16
(1,7)	1:195:A:PRO:C	1:196:A:ASP:N	1:196:A:ASP:CA	1:196:A:ASP:C	5	1.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,150)	1:288:A:GLY:C	1:289:A:CYS:N	1:289:A:CYS:CA	1:289:A:CYS:C	18	1.15
(1,266)	1:353:A:GLY:C	1:354:A:CYS:N	1:354:A:CYS:CA	1:354:A:CYS:C	15	1.14
(1,184)	1:307:A:ILE:C	1:308:A:PHE:N	1:308:A:PHE:CA	1:308:A:PHE:C	18	1.14
(1,145)	1:286:A:SER:N	1:286:A:SER:CA	1:286:A:SER:C	1:287:A:TRP:N	12	1.14
(1,7)	1:195:A:PRO:C	1:196:A:ASP:N	1:196:A:ASP:CA	1:196:A:ASP:C	22	1.14
(1,267)	1:354:A:CYS:N	1:354:A:CYS:CA	1:354:A:CYS:C	1:355:A:PRO:N	1	1.13
(1,262)	1:351:A:ARG:C	1:352:A:GLN:N	1:352:A:GLN:CA	1:352:A:GLN:C	12	1.13
(1,152)	1:289:A:CYS:C	1:290:A:ALA:N	1:290:A:ALA:CA	1:290:A:ALA:C	14	1.13
(1,134)	1:277:A:TRP:N	1:277:A:TRP:CA	1:277:A:TRP:C	1:278:A:PHE:N	25	1.13
(1,133)	1:276:A:THR:C	1:277:A:TRP:N	1:277:A:TRP:CA	1:277:A:TRP:C	4	1.13
(1,106)	1:260:A:ASP:C	1:261:A:LEU:N	1:261:A:LEU:CA	1:261:A:LEU:C	26	1.13
(1,66)	1:234:A:HIS:C	1:235:A:MET:N	1:235:A:MET:CA	1:235:A:MET:C	16	1.13
(1,7)	1:195:A:PRO:C	1:196:A:ASP:N	1:196:A:ASP:CA	1:196:A:ASP:C	11	1.13
(1,262)	1:351:A:ARG:C	1:352:A:GLN:N	1:352:A:GLN:CA	1:352:A:GLN:C	4	1.12
(1,231)	1:334:A:SER:N	1:334:A:SER:CA	1:334:A:SER:C	1:335:A:ILE:N	12	1.12
(1,149)	1:288:A:GLY:N	1:288:A:GLY:CA	1:288:A:GLY:C	1:289:A:CYS:N	25	1.11
(1,136)	1:278:A:PHE:N	1:278:A:PHE:CA	1:278:A:PHE:C	1:279:A:ILE:N	1	1.11
(1,107)	1:261:A:LEU:N	1:261:A:LEU:CA	1:261:A:LEU:C	1:262:A:VAL:N	6	1.11
(1,35)	1:218:A:TYR:N	1:218:A:TYR:CA	1:218:A:TYR:C	1:219:A:GLU:N	11	1.11
(1,28)	1:214:A:THR:C	1:215:A:TYR:N	1:215:A:TYR:CA	1:215:A:TYR:C	4	1.11
(1,252)	1:345:A:TRP:C	1:346:A:ASP:N	1:346:A:ASP:CA	1:346:A:ASP:C	23	1.1
(1,226)	1:331:A:ALA:C	1:332:A:GLN:N	1:332:A:GLN:CA	1:332:A:GLN:C	5	1.1
(1,177)	1:304:A:ARG:N	1:304:A:ARG:CA	1:304:A:ARG:C	1:305:A:LEU:N	23	1.1
(1,171)	1:299:A:GLU:N	1:299:A:GLU:CA	1:299:A:GLU:C	1:300:A:ASN:N	5	1.1
(1,267)	1:354:A:CYS:N	1:354:A:CYS:CA	1:354:A:CYS:C	1:355:A:PRO:N	29	1.09
(1,177)	1:304:A:ARG:N	1:304:A:ARG:CA	1:304:A:ARG:C	1:305:A:LEU:N	13	1.09
(1,171)	1:299:A:GLU:N	1:299:A:GLU:CA	1:299:A:GLU:C	1:300:A:ASN:N	16	1.09
(1,151)	1:289:A:CYS:N	1:289:A:CYS:CA	1:289:A:CYS:C	1:290:A:ALA:N	6	1.09
(1,134)	1:277:A:TRP:N	1:277:A:TRP:CA	1:277:A:TRP:C	1:278:A:PHE:N	17	1.09
(1,268)	1:354:A:CYS:C	1:355:A:PRO:N	1:355:A:PRO:CA	1:355:A:PRO:C	11	1.08
(1,262)	1:351:A:ARG:C	1:352:A:GLN:N	1:352:A:GLN:CA	1:352:A:GLN:C	29	1.08
(1,161)	1:294:A:ARG:N	1:294:A:ARG:CA	1:294:A:ARG:C	1:295:A:ALA:N	7	1.08
(1,101)	1:258:A:PHE:N	1:258:A:PHE:CA	1:258:A:PHE:C	1:259:A:LEU:N	30	1.08
(1,28)	1:214:A:THR:C	1:215:A:TYR:N	1:215:A:TYR:CA	1:215:A:TYR:C	25	1.07
(1,267)	1:354:A:CYS:N	1:354:A:CYS:CA	1:354:A:CYS:C	1:355:A:PRO:N	24	1.06
(1,185)	1:308:A:PHE:N	1:308:A:PHE:CA	1:308:A:PHE:C	1:309:A:ALA:N	12	1.06
(1,171)	1:299:A:GLU:N	1:299:A:GLU:CA	1:299:A:GLU:C	1:300:A:ASN:N	8	1.06
(1,153)	1:290:A:ALA:N	1:290:A:ALA:CA	1:290:A:ALA:C	1:291:A:GLY:N	11	1.06
(1,136)	1:278:A:PHE:N	1:278:A:PHE:CA	1:278:A:PHE:C	1:279:A:ILE:N	18	1.06
(1,125)	1:272:A:ILE:C	1:273:A:TYR:N	1:273:A:TYR:CA	1:273:A:TYR:C	4	1.06
(1,103)	1:259:A:LEU:N	1:259:A:LEU:CA	1:259:A:LEU:C	1:260:A:ASP:N	6	1.06
(1,185)	1:308:A:PHE:N	1:308:A:PHE:CA	1:308:A:PHE:C	1:309:A:ALA:N	21	1.05
(1,149)	1:288:A:GLY:N	1:288:A:GLY:CA	1:288:A:GLY:C	1:289:A:CYS:N	3	1.05
(1,133)	1:276:A:THR:C	1:277:A:TRP:N	1:277:A:TRP:CA	1:277:A:TRP:C	11	1.05
(1,59)	1:230:A:LEU:N	1:230:A:LEU:CA	1:230:A:LEU:C	1:231:A:MET:N	25	1.05
(1,254)	1:346:A:ASP:C	1:347:A:THR:N	1:347:A:THR:CA	1:347:A:THR:C	24	1.04
(1,182)	1:306:A:ARG:C	1:307:A:ILE:N	1:307:A:ILE:CA	1:307:A:ILE:C	5	1.04
(1,177)	1:304:A:ARG:N	1:304:A:ARG:CA	1:304:A:ARG:C	1:305:A:LEU:N	5	1.04
(1,142)	1:282:A:SER:C	1:283:A:PRO:N	1:283:A:PRO:CA	1:283:A:PRO:C	24	1.04
(1,104)	1:259:A:LEU:C	1:260:A:ASP:N	1:260:A:ASP:CA	1:260:A:ASP:C	12	1.04
(1,149)	1:288:A:GLY:N	1:288:A:GLY:CA	1:288:A:GLY:C	1:289:A:CYS:N	2	1.03

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,104)	1:259:A:LEU:C	1:260:A:ASP:N	1:260:A:ASP:CA	1:260:A:ASP:C	6	1.03
(1,171)	1:299:A:GLU:N	1:299:A:GLU:CA	1:299:A:GLU:C	1:300:A:ASN:N	26	1.02
(1,152)	1:289:A:CYS:C	1:290:A:ALA:N	1:290:A:ALA:CA	1:290:A:ALA:C	23	1.02
(1,104)	1:259:A:LEU:C	1:260:A:ASP:N	1:260:A:ASP:CA	1:260:A:ASP:C	30	1.02
(1,299)	1:372:A:ARG:N	1:372:A:ARG:CA	1:372:A:ARG:C	1:373:A:LEU:N	29	1.01
(1,267)	1:354:A:CYS:N	1:354:A:CYS:CA	1:354:A:CYS:C	1:355:A:PRO:N	10	1.01
(1,261)	1:350:A:TYR:N	1:350:A:TYR:CA	1:350:A:TYR:C	1:351:A:ARG:N	3	1.01
(1,256)	1:347:A:THR:C	1:348:A:PHE:N	1:348:A:PHE:CA	1:348:A:PHE:C	19	1.01
(1,162)	1:294:A:ARG:C	1:295:A:ALA:N	1:295:A:ALA:CA	1:295:A:ALA:C	7	1.01
(1,28)	1:214:A:THR:C	1:215:A:TYR:N	1:215:A:TYR:CA	1:215:A:TYR:C	26	1.01
(1,171)	1:299:A:GLU:N	1:299:A:GLU:CA	1:299:A:GLU:C	1:300:A:ASN:N	23	1.0