



Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 9, 2026 – 05:03 PM UTC

PDB ID : 5ZVF / pdb_00005zvf
BMRB ID : 36189
Title : Structure of [T9,K7]indolicidin, a non glycosylated analogue of indolicidin
Authors : Dwivedi, R.; Aggarwal, P.; Kaur, K.J.; Bhavesh, N.S.
Deposited on : 2018-05-10

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

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

A user guide is available at

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

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The types of validation reports are described at

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

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

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

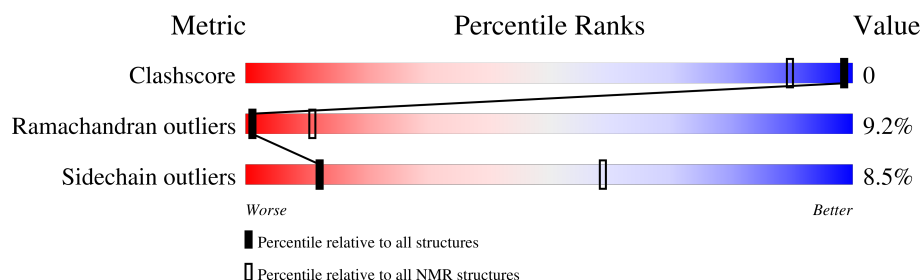
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment is 36%.

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	14	 100%

2 Ensemble composition and analysis ⓘ

This entry contains 20 models.

Cyrange was unable to find well-defined residues.

Error message: The number of core atoms (2) was below the domain threshold value (8).

NmrClust was unable to cluster the ensemble.

Error message: Wrapper check: not enough residues in core to run NmrClust

3 Entry composition [i](#)

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 271 atoms, of which 137 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called non glycosylated analogue of Indolicidin.

Mol	Chain	Residues	Atoms					Trace
1	A	14	Total	C	H	N	O	1
			271	94	137	26	14	

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: non glycosylated analogue of Indolicidin

Chain A:  100%

There are no outlier residues in this chain.

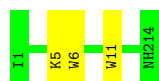
4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: non glycosylated analogue of Indolicidin

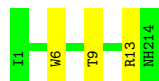
Chain A:  79% 21%



4.2.2 Score per residue for model 2

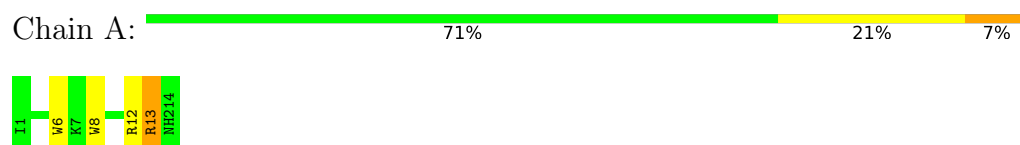
- Molecule 1: non glycosylated analogue of Indolicidin

Chain A:  79% 21%



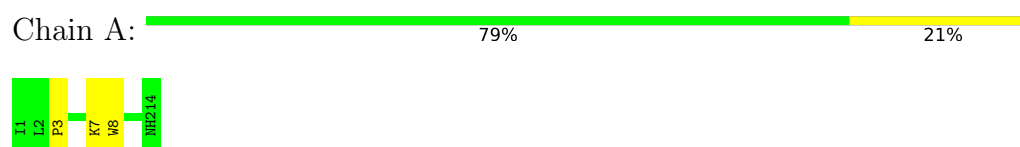
4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: non glycosylated analogue of Indolicidin



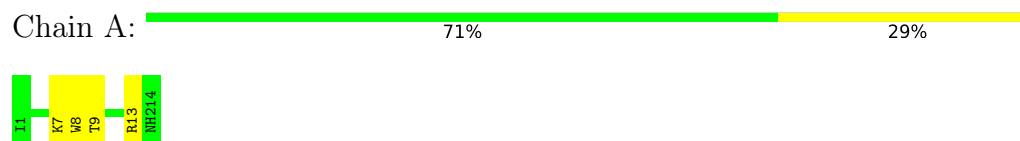
4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: non glycosylated analogue of Indolicidin



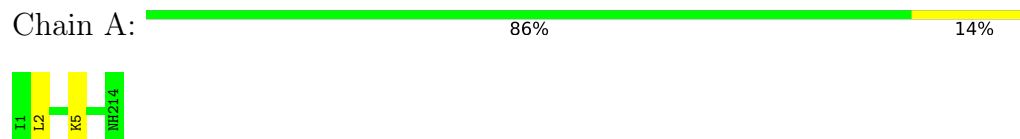
4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: non glycosylated analogue of Indolicidin



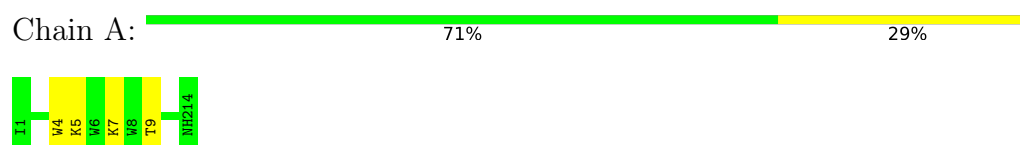
4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: non glycosylated analogue of Indolicidin



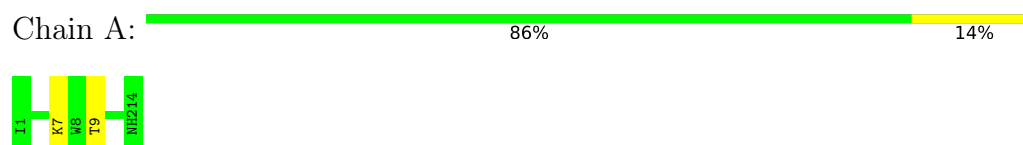
4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: non glycosylated analogue of Indolicidin



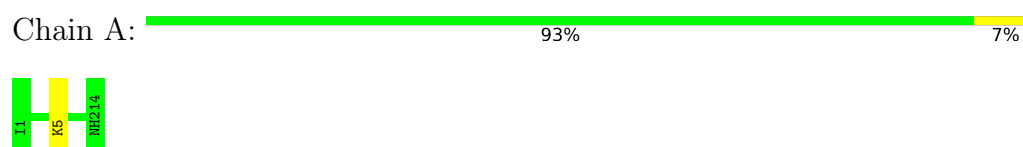
4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: non glycosylated analogue of Indolicidin



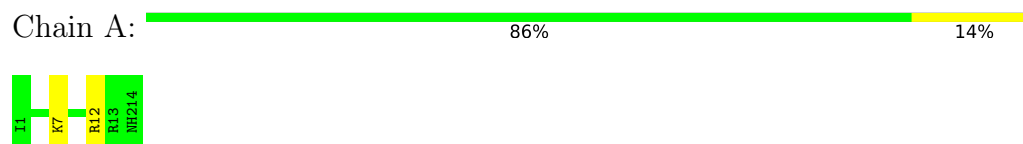
4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: non glycosylated analogue of Indolicidin



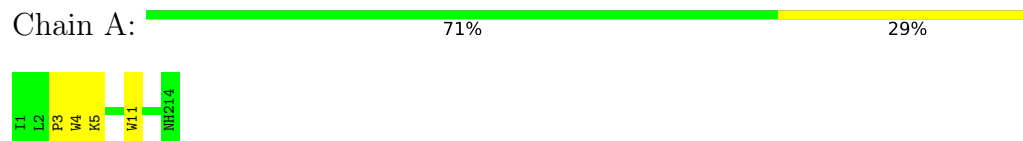
4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: non glycosylated analogue of Indolicidin



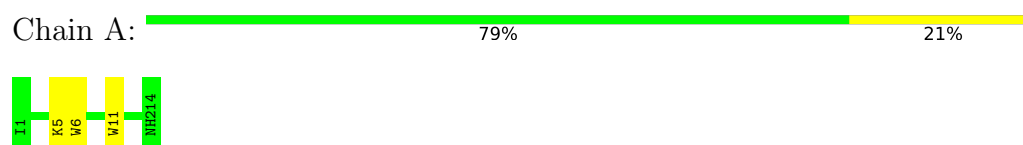
4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: non glycosylated analogue of Indolicidin



4.2.12 Score per residue for model 12

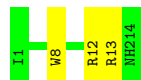
- Molecule 1: non glycosylated analogue of Indolicidin



4.2.13 Score per residue for model 13

- Molecule 1: non glycosylated analogue of Indolicidin

Chain A:  79% 21%



4.2.14 Score per residue for model 14

- Molecule 1: non glycosylated analogue of Indolicidin

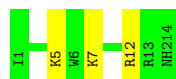
Chain A:  79% 21%



4.2.15 Score per residue for model 15

- Molecule 1: non glycosylated analogue of Indolicidin

Chain A:  79% 21%



4.2.16 Score per residue for model 16

- Molecule 1: non glycosylated analogue of Indolicidin

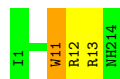
Chain A:  100%

There are no outlier residues in this chain.

4.2.17 Score per residue for model 17

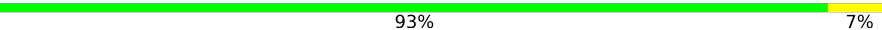
- Molecule 1: non glycosylated analogue of Indolicidin

Chain A:  79% 14% 7%



4.2.18 Score per residue for model 18

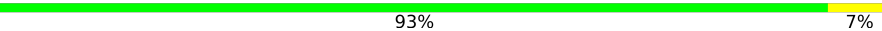
- Molecule 1: non glycosylated analogue of Indolicidin

Chain A:  93% 7%



4.2.19 Score per residue for model 19

- Molecule 1: non glycosylated analogue of Indolicidin

Chain A:  93% 7%



4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: non glycosylated analogue of Indolicidin

Chain A:  79% 21%



5 Refinement protocol and experimental data overview

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

Of the 100 calculated structures, 20 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
CYANA	structure calculation	
Amber	refinement	

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

Chemical shift file(s)	working_cs.cif
Number of chemical shift lists	1
Total number of shifts	84
Number of shifts mapped to atoms	84
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Assignment completeness (well-defined parts)	36%

6 Model quality

6.1 Standard geometry

Bond lengths and bond angles in the following residue types are not validated in this section: NH2

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	0.94±0.02	0±0/142 (0.0± 0.0%)	1.51±0.08	1±1/195 (0.4± 0.4%)
All	All	0.94	0/2840 (0.0%)	1.51	14/3900 (0.4%)

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	12	ARG	CA-C-N	7.20	134.66	121.70	3	3
1	A	12	ARG	C-N-CA	7.20	134.66	121.70	3	3
1	A	9	THR	CB-CA-C	7.00	119.25	110.98	8	4
1	A	3	PRO	CA-C-N	5.64	132.32	121.54	11	2
1	A	3	PRO	C-N-CA	5.64	132.32	121.54	11	2

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

6.2 Too-close contacts

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	134	137	137	0±0
All	All	2680	2740	2740	1

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 0.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:5:LYS:HD3	1:A:5:LYS:H	0.42	1.75	14	1

6.3 Torsion angles [i](#)

6.3.1 Protein backbone [i](#)

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	12/14 (86%)	7±1 (61±12%)	4±1 (30±12%)	1±1 (9±6%)	1	11
All	All	240/280 (86%)	146 (61%)	72 (30%)	22 (9%)	1	11

All 10 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	13	ARG	6
1	A	6	TRP	3
1	A	4	TRP	3
1	A	7	LYS	2
1	A	5	LYS	2
1	A	11	TRP	2
1	A	3	PRO	1
1	A	8	TRP	1
1	A	12	ARG	1
1	A	9	THR	1

6.3.2 Protein sidechains [i](#)

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles	
1	A	13/13 (100%)	12±1 (92±6%)	1±1 (8±6%)	12	59
All	All	260/260 (100%)	238 (92%)	22 (8%)	12	59

All 8 unique residues with a non-rotameric sidechain are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	5	LYS	6
1	A	7	LYS	4
1	A	11	TRP	3
1	A	8	TRP	3
1	A	2	LEU	2
1	A	12	ARG	2
1	A	6	TRP	1
1	A	13	ARG	1

6.3.3 RNA [i](#)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates [i](#)

There are no oligosaccharides in this entry.

6.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues [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 36% for the well-defined parts and 36% for the entire structure.

7.1 Chemical shift list 1

File name: `working_cs.cif`

Chemical shift list name: *starch_output*

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	84
Number of shifts mapped to atoms	84
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Number of shift outliers (ShiftChecker)	0

7.1.2 Chemical shift referencing

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

7.1.3 Completeness of resonance assignments

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the well-defined regions of the structure. The overall completeness is 36%, i.e. 84 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 233. 0 out of 1 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	¹ H	¹³ C	¹⁵ N
Backbone	23/61 (38%)	23/24 (96%)	0/26 (0%)	0/11 (0%)
Sidechain	61/124 (49%)	61/80 (76%)	0/36 (0%)	0/8 (0%)
Aromatic	0/48 (0%)	0/24 (0%)	0/20 (0%)	0/4 (0%)
Overall	84/233 (36%)	84/128 (66%)	0/82 (0%)	0/23 (0%)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 36%, i.e. 84 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 233. 0 out of 1 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	^1H	^{13}C	^{15}N
Backbone	23/61 (38%)	23/24 (96%)	0/26 (0%)	0/11 (0%)
Sidechain	61/124 (49%)	61/80 (76%)	0/36 (0%)	0/8 (0%)
Aromatic	0/48 (0%)	0/24 (0%)	0/20 (0%)	0/4 (0%)
Overall	84/233 (36%)	84/128 (66%)	0/82 (0%)	0/23 (0%)

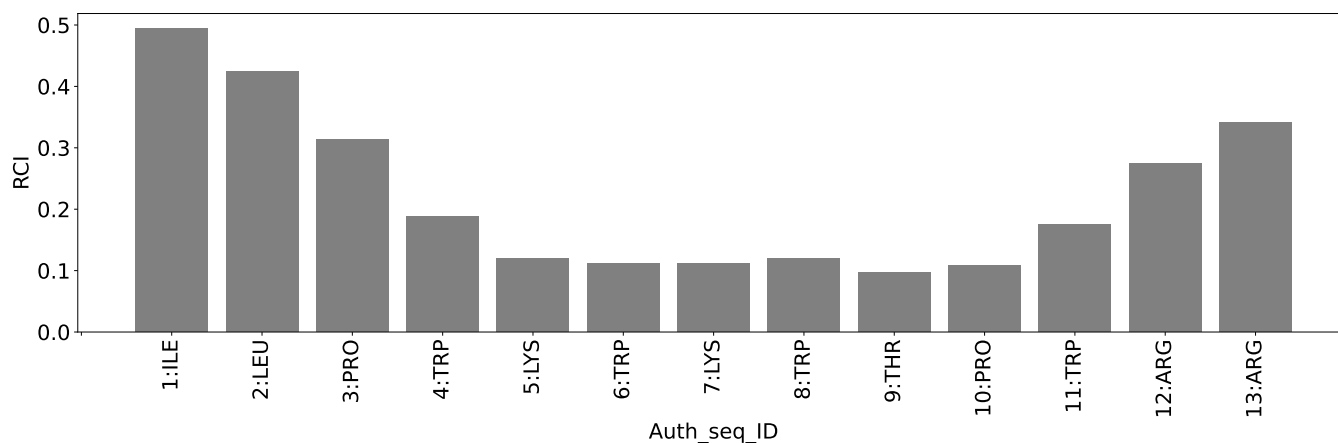
7.1.4 Statistically unusual chemical shifts [i](#)

There are no statistically unusual chemical shifts.

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

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

Random coil index (RCI) for chain A:



8 NMR restraints analysis

8.1 Conformationally restricting restraints

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

Description	Value
Total distance restraints	323
Intra-residue ($ i-j =0$)	58
Sequential ($ i-j =1$)	88
Medium range ($ i-j >1$ and $ i-j <5$)	97
Long range ($ i-j \geq 5$)	80
Inter-chain	0
Hydrogen bond restraints	0
Disulfide bond restraints	0
Total dihedral-angle restraints	0
Number of unmapped restraints	0
Number of restraints per residue	23.1
Number of long range restraints per residue ¹	5.7

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)	2.5	0.2
0.2-0.5 (Medium)	4.3	0.49
>0.5 (Large)	242.6	36.18

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

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

9 Distance violation analysis ⓘ

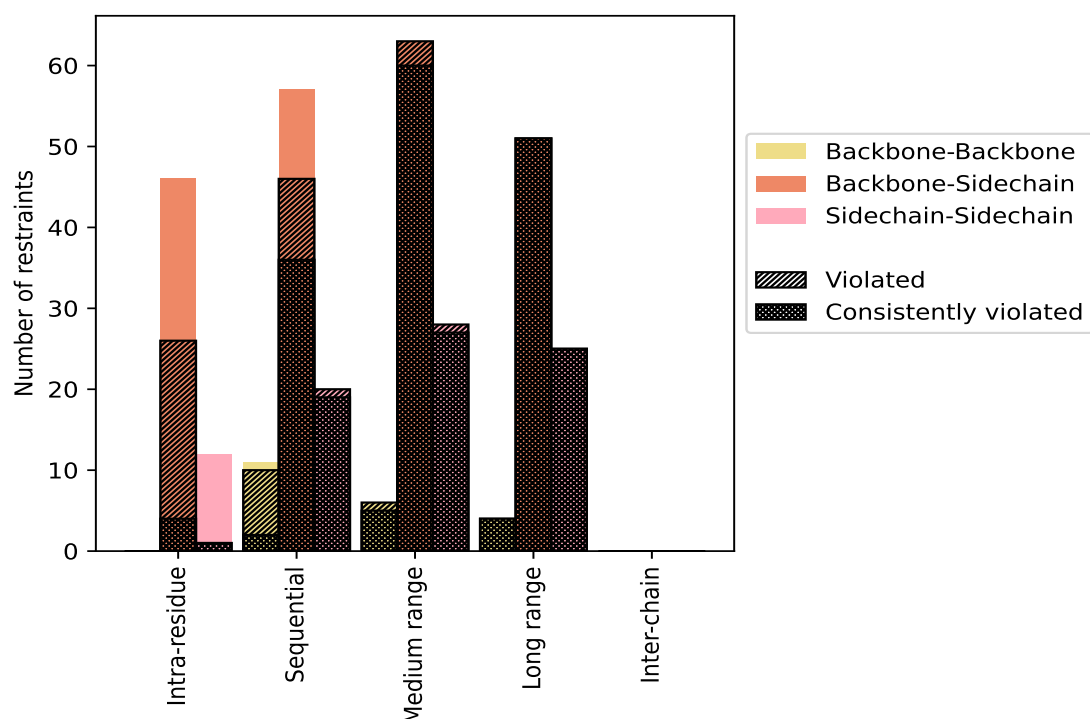
9.1 Summary of distance violations ⓘ

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

Restrains type	Count	% ¹	Violated ³			Consistently Violated ⁴		
			Count	% ²	% ¹	Count	% ²	% ¹
Intra-residue ($i-j =0$)	58	18.0	27	46.6	8.4	5	8.6	1.5
Backbone-Backbone	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	46	14.2	26	56.5	8.0	4	8.7	1.2
Sidechain-Sidechain	12	3.7	1	8.3	0.3	1	8.3	0.3
Sequential ($i-j =1$)	88	27.2	76	86.4	23.5	57	64.8	17.6
Backbone-Backbone	11	3.4	10	90.9	3.1	2	18.2	0.6
Backbone-Sidechain	57	17.6	46	80.7	14.2	36	63.2	11.1
Sidechain-Sidechain	20	6.2	20	100.0	6.2	19	95.0	5.9
Medium range ($i-j >1$ & $i-j <5$)	97	30.0	97	100.0	30.0	92	94.8	28.5
Backbone-Backbone	6	1.9	6	100.0	1.9	5	83.3	1.5
Backbone-Sidechain	63	19.5	63	100.0	19.5	60	95.2	18.6
Sidechain-Sidechain	28	8.7	28	100.0	8.7	27	96.4	8.4
Long range ($i-j \geq 5$)	80	24.8	80	100.0	24.8	80	100.0	24.8
Backbone-Backbone	4	1.2	4	100.0	1.2	4	100.0	1.2
Backbone-Sidechain	51	15.8	51	100.0	15.8	51	100.0	15.8
Sidechain-Sidechain	25	7.7	25	100.0	7.7	25	100.0	7.7
Inter-chain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Backbone	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Hydrogen bond	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Disulfide bond	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Total	323	100.0	280	86.7	86.7	234	72.4	72.4
Backbone-Backbone	21	6.5	20	95.2	6.2	11	52.4	3.4
Backbone-Sidechain	217	67.2	186	85.7	57.6	151	69.6	46.7
Sidechain-Sidechain	85	26.3	74	87.1	22.9	72	84.7	22.3

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

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



Violated and consistently violated restraints are shown using different hatch patterns in their respective categories. The hydrogen bonds and 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	8	65	97	80	0	250	8.96	22.13	4.93	7.86
2	8	64	96	80	0	248	8.1	19.05	4.02	7.37
3	9	63	96	80	0	248	8.26	18.54	4.06	7.72
4	9	62	96	80	0	247	8.79	23.09	4.52	8.08
5	12	62	97	80	0	251	9.0	24.09	4.98	8.17
6	11	64	97	80	0	252	8.02	24.79	4.24	7.52
7	7	65	95	80	0	247	8.57	25.8	4.86	7.6
8	8	63	95	80	0	246	9.53	36.18	5.98	8.05
9	9	66	95	80	0	250	9.33	29.79	6.1	7.62
10	13	62	97	80	0	252	8.81	26.01	5.31	7.44

Continued on next page...

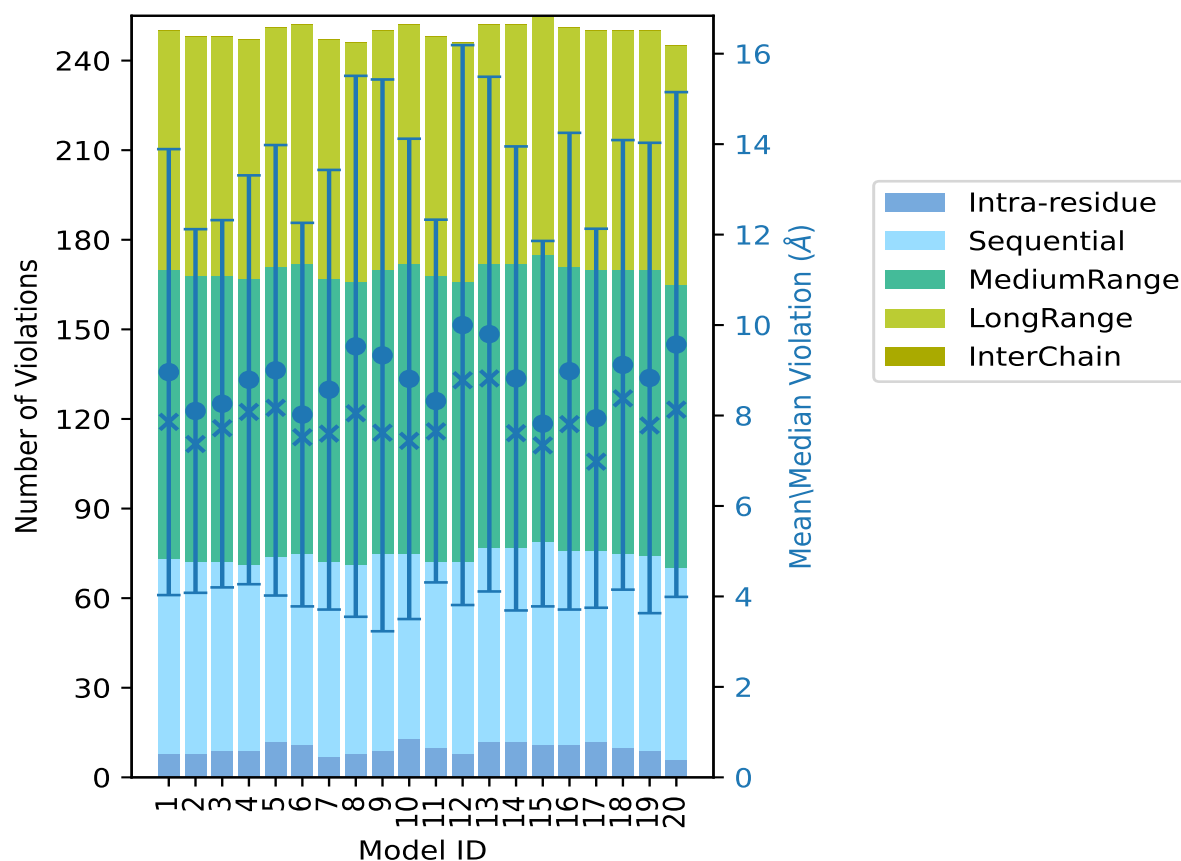
Continued from previous page...

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	62	96	80	0	248	8.32	18.7	4.01	7.65
12	8	64	94	80	0	246	10.0	34.65	6.19	8.78
13	12	65	95	80	0	252	9.8	31.03	5.69	8.82
14	12	65	95	80	0	252	8.82	25.84	5.13	7.61
15	11	68	96	80	0	255	7.82	19.72	4.04	7.34
16	11	65	95	80	0	251	8.98	29.67	5.27	7.81
17	12	64	94	80	0	250	7.94	22.89	4.19	6.98
18	10	65	95	80	0	250	9.12	23.5	4.97	8.38
19	9	65	96	80	0	250	8.83	27.69	5.2	7.78
20	6	64	95	80	0	245	9.57	32.26	5.58	8.13

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

⁵Inter-chain restraints, ⁶Standard deviation

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



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

9.3 Distance violation statistics for the ensemble

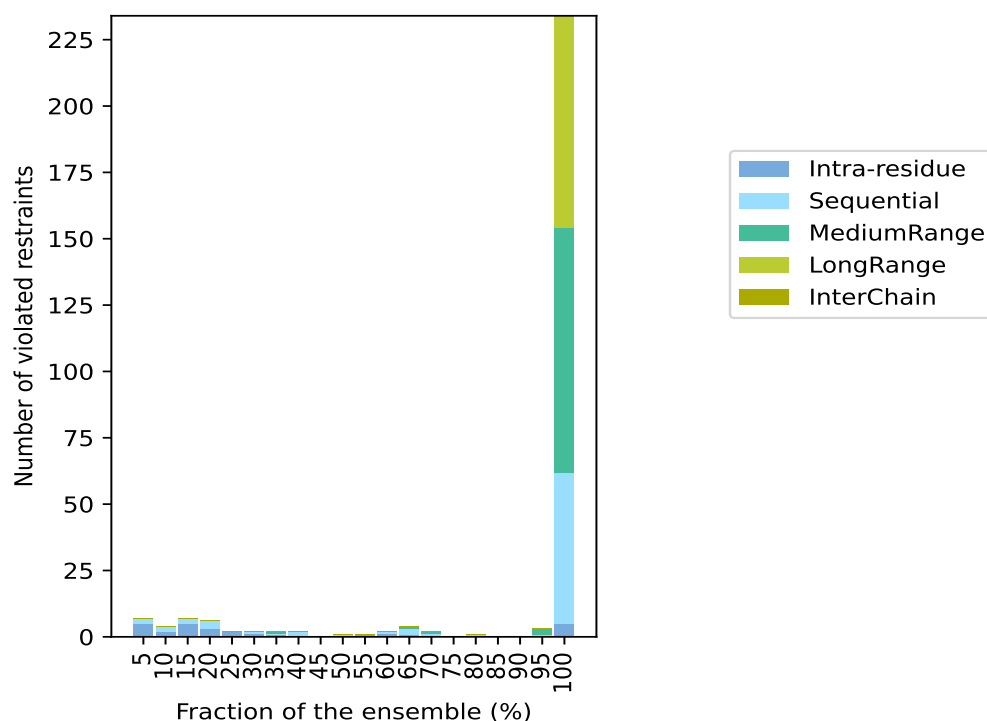
Violation analysis may find that some restraints are violated in few models and some are violated in most of models. The following table provides this information as number of violated restraints for a given fraction of the ensemble. In total, 43(IR:31, SQ:12, MR:0, LR:0, IC:0) restraints are not violated in the ensemble.

Number of violated restraints						Fraction of the ensemble	
IR ¹	SQ ²	MR ³	LR ⁴	IC ⁵	Total	Count ⁶	%
5	2	0	0	0	7	1	5.0
2	2	0	0	0	4	2	10.0
5	2	0	0	0	7	3	15.0
3	3	0	0	0	6	4	20.0
2	0	0	0	0	2	5	25.0
1	1	0	0	0	2	6	30.0
1	0	1	0	0	2	7	35.0
0	2	0	0	0	2	8	40.0
0	0	0	0	0	0	9	45.0
0	1	0	0	0	1	10	50.0
1	0	0	0	0	1	11	55.0
1	1	0	0	0	2	12	60.0
1	2	1	0	0	4	13	65.0
0	1	1	0	0	2	14	70.0
0	0	0	0	0	0	15	75.0
0	1	0	0	0	1	16	80.0
0	0	0	0	0	0	17	85.0
0	0	0	0	0	0	18	90.0
0	1	2	0	0	3	19	95.0
5	57	92	80	0	234	20	100.0

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

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

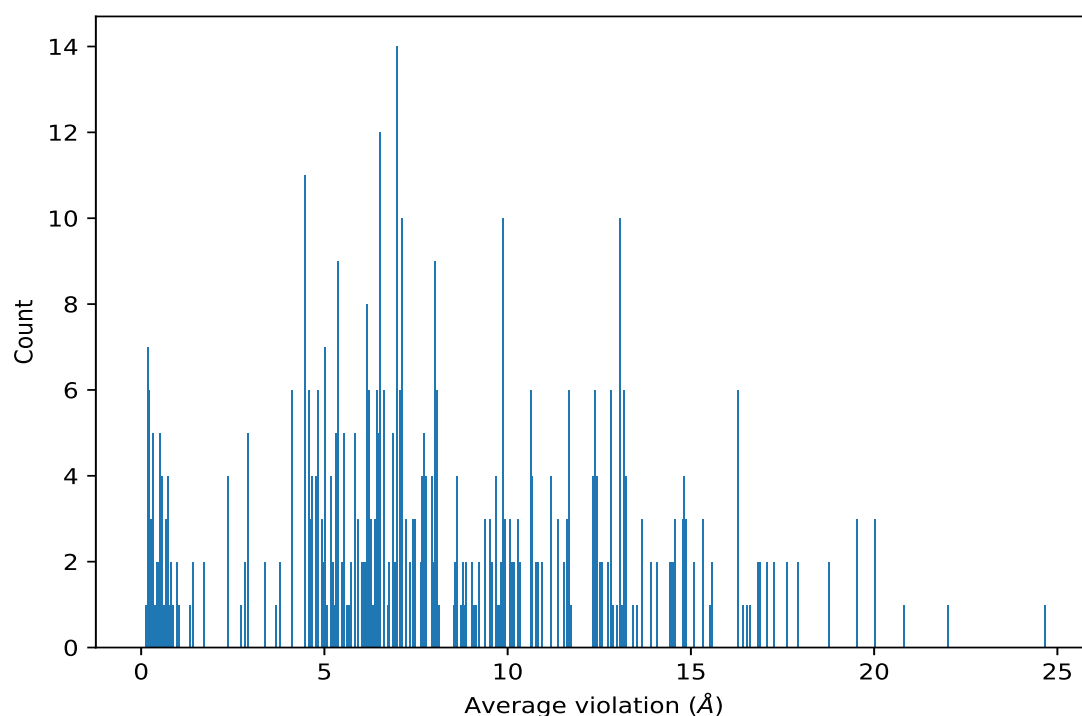
9.3.1 Bar graph : Distance violation statistics for the ensemble [i](#)



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)
(1,238)	1:1:A:ILE:HB	1:13:A:ARG:HG2	20	24.67	6.15	24.44
(1,4)	1:2:A:LEU:H	1:12:A:ARG:HA	20	22.04	4.97	22.52
(1,271)	1:4:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	20	20.83	4.8	20.49
(1,311)	1:1:A:ILE:HD11	1:12:A:ARG:HA	20	20.0	4.68	20.78
(1,311)	1:1:A:ILE:HD12	1:12:A:ARG:HA	20	20.0	4.68	20.78
(1,311)	1:1:A:ILE:HD13	1:12:A:ARG:HA	20	20.0	4.68	20.78
(1,143)	1:1:A:ILE:HG21	1:12:A:ARG:HE	20	19.54	5.65	20.65
(1,143)	1:1:A:ILE:HG22	1:12:A:ARG:HE	20	19.54	5.65	20.65
(1,143)	1:1:A:ILE:HG23	1:12:A:ARG:HE	20	19.54	5.65	20.65
(1,149)	1:4:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	20	18.78	4.1	18.56
(1,217)	1:1:A:ILE:HB	1:8:A:TRP:HB2	20	18.76	2.78	19.08
(1,116)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	20	17.93	4.06	17.83
(1,270)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	20	17.93	4.06	17.83
(1,99)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	20	17.6	4.24	18.12
(1,255)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	20	17.6	4.24	18.12
(1,179)	1:3:A:PRO:HA	1:12:A:ARG:HD2	20	17.28	4.51	17.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,179)	1:3:A:PRO:HA	1:12:A:ARG:HD3	20	17.28	4.51	17.34
(1,75)	1:5:A:LYS:HG2	1:13:A:ARG:HE	20	17.09	3.68	17.04
(1,75)	1:5:A:LYS:HG3	1:13:A:ARG:HE	20	17.09	3.68	17.04
(1,96)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG2	20	16.88	4.03	17.3
(1,234)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG2	20	16.88	4.03	17.3
(1,113)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD2	20	16.81	3.87	16.68
(1,113)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD3	20	16.81	3.87	16.68
(1,208)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HA	20	16.6	2.22	17.02
(1,124)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HE	20	16.5	3.61	17.46
(1,230)	1:6:A:TRP:HB2	1:13:A:ARG:HG2	20	16.44	4.52	17.79
(1,310)	1:2:A:LEU:HD11	1:12:A:ARG:HA	20	16.27	3.58	16.25
(1,310)	1:2:A:LEU:HD12	1:12:A:ARG:HA	20	16.27	3.58	16.25
(1,310)	1:2:A:LEU:HD13	1:12:A:ARG:HA	20	16.27	3.58	16.25
(1,310)	1:2:A:LEU:HD21	1:12:A:ARG:HA	20	16.27	3.58	16.25
(1,310)	1:2:A:LEU:HD22	1:12:A:ARG:HA	20	16.27	3.58	16.25
(1,310)	1:2:A:LEU:HD23	1:12:A:ARG:HA	20	16.27	3.58	16.25
(1,72)	1:7:A:LYS:HE2	1:13:A:ARG:HE	20	15.6	3.97	15.72
(1,72)	1:7:A:LYS:HE3	1:13:A:ARG:HE	20	15.6	3.97	15.72
(1,147)	1:6:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	20	15.51	3.49	16.21
(1,263)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HG2	20	15.34	3.08	16.44
(1,58)	1:5:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HD2	20	15.33	2.95	15.0
(1,58)	1:5:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HD3	20	15.33	2.95	15.0
(1,236)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HB2	20	15.1	2.52	15.11
(1,236)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HB3	20	15.1	2.52	15.11
(1,312)	1:1:A:ILE:HD11	1:7:A:LYS:HA	20	14.89	2.19	14.91
(1,312)	1:1:A:ILE:HD12	1:7:A:LYS:HA	20	14.89	2.19	14.91
(1,312)	1:1:A:ILE:HD13	1:7:A:LYS:HA	20	14.89	2.19	14.91
(1,33)	1:5:A:LYS:HB2	1:13:A:ARG:H	20	14.84	3.19	15.06
(1,33)	1:5:A:LYS:HB3	1:13:A:ARG:H	20	14.84	3.19	15.06
(1,273)	1:5:A:LYS:HB2	1:13:A:ARG:H	20	14.84	3.19	15.06
(1,273)	1:5:A:LYS:HB3	1:13:A:ARG:H	20	14.84	3.19	15.06
(1,100)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	20	14.75	2.55	15.25
(1,251)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	20	14.75	2.55	15.25
(1,256)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	20	14.75	2.55	15.25
(1,174)	1:5:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:H	20	14.59	3.43	14.68
(1,174)	1:5:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:H	20	14.59	3.43	14.68
(1,15)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HE	20	14.57	2.53	14.72
(1,176)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HD2	20	14.54	2.87	14.7
(1,176)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HD3	20	14.54	2.87	14.7
(1,289)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HA	20	14.49	2.99	14.99
(1,289)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HA	20	14.49	2.99	14.99
(1,3)	1:2:A:LEU:H	1:7:A:LYS:HA	20	14.42	2.05	14.78

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,127)	1:7:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HE	20	14.4	2.59	14.36
(1,55)	1:5:A:LYS:H	1:11:A:TRP:HB2	20	14.07	2.28	14.4
(1,55)	1:5:A:LYS:H	1:11:A:TRP:HB3	20	14.07	2.28	14.4
(1,84)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD2	20	13.95	2.3	13.96
(1,84)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD3	20	13.95	2.3	13.96
(1,315)	1:1:A:ILE:HD11	1:6:A:TRP:HB2	20	13.7	2.9	14.48
(1,315)	1:1:A:ILE:HD12	1:6:A:TRP:HB2	20	13.7	2.9	14.48
(1,315)	1:1:A:ILE:HD13	1:6:A:TRP:HB2	20	13.7	2.9	14.48
(1,24)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HG2	20	13.5	1.71	13.94
(1,150)	1:8:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	20	13.42	2.25	13.38
(1,216)	1:4:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB2	20	13.23	3.13	13.2
(1,216)	1:4:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB3	20	13.23	3.13	13.2
(1,22)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HB2	20	13.22	1.69	13.06
(1,22)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HB3	20	13.22	1.69	13.06
(1,194)	1:7:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:HA	20	13.18	2.8	13.17
(1,194)	1:7:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:HA	20	13.18	2.8	13.17
(1,173)	1:8:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HD2	20	13.15	2.92	13.61
(1,173)	1:8:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HD3	20	13.15	2.92	13.61
(1,166)	1:5:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:HB2	20	13.15	2.66	13.46
(1,166)	1:5:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:HB3	20	13.15	2.66	13.46
(1,122)	1:8:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HE	20	13.13	2.0	13.12
(1,265)	1:2:A:LEU:HB3	1:7:A:LYS:HA	20	13.1	2.44	13.36
(1,264)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:HA	20	13.07	2.65	13.84
(1,264)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:HA	20	13.07	2.65	13.84
(1,20)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:H	20	13.07	1.59	13.09
(1,319)	1:1:A:ILE:HD11	1:7:A:LYS:HD2	20	13.06	2.49	12.87
(1,319)	1:1:A:ILE:HD11	1:7:A:LYS:HD3	20	13.06	2.49	12.87
(1,319)	1:1:A:ILE:HD12	1:7:A:LYS:HD2	20	13.06	2.49	12.87
(1,319)	1:1:A:ILE:HD12	1:7:A:LYS:HD3	20	13.06	2.49	12.87
(1,319)	1:1:A:ILE:HD13	1:7:A:LYS:HD2	20	13.06	2.49	12.87
(1,319)	1:1:A:ILE:HD13	1:7:A:LYS:HD3	20	13.06	2.49	12.87
(1,126)	1:5:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:H	20	12.96	2.63	13.49
(1,134)	1:8:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HE	20	12.88	2.34	13.04
(1,202)	1:1:A:ILE:HG21	1:6:A:TRP:HB3	20	12.84	2.05	12.78
(1,202)	1:1:A:ILE:HG22	1:6:A:TRP:HB3	20	12.84	2.05	12.78
(1,202)	1:1:A:ILE:HG23	1:6:A:TRP:HB3	20	12.84	2.05	12.78
(1,299)	1:1:A:ILE:HG21	1:6:A:TRP:HB3	20	12.84	2.05	12.78
(1,299)	1:1:A:ILE:HG22	1:6:A:TRP:HB3	20	12.84	2.05	12.78
(1,299)	1:1:A:ILE:HG23	1:6:A:TRP:HB3	20	12.84	2.05	12.78
(1,13)	1:2:A:LEU:H	1:7:A:LYS:HD2	20	12.72	2.78	13.07
(1,13)	1:2:A:LEU:H	1:7:A:LYS:HD3	20	12.72	2.78	13.07
(1,38)	1:7:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:H	20	12.6	2.38	12.31

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,38)	1:7:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:H	20	12.6	2.38	12.31
(1,81)	1:6:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HB2	20	12.5	2.17	12.93
(1,81)	1:6:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HB3	20	12.5	2.17	12.93
(1,48)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:H	20	12.41	2.16	12.58
(1,48)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:H	20	12.41	2.16	12.58
(1,248)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:H	20	12.41	2.16	12.58
(1,248)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:H	20	12.41	2.16	12.58
(1,203)	1:1:A:ILE:HG21	1:7:A:LYS:HE2	20	12.38	2.93	12.54
(1,203)	1:1:A:ILE:HG21	1:7:A:LYS:HE3	20	12.38	2.93	12.54
(1,203)	1:1:A:ILE:HG22	1:7:A:LYS:HE2	20	12.38	2.93	12.54
(1,203)	1:1:A:ILE:HG22	1:7:A:LYS:HE3	20	12.38	2.93	12.54
(1,203)	1:1:A:ILE:HG23	1:7:A:LYS:HE2	20	12.38	2.93	12.54
(1,203)	1:1:A:ILE:HG23	1:7:A:LYS:HE3	20	12.38	2.93	12.54
(1,222)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:HB2	20	12.34	2.21	12.33
(1,222)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:HB3	20	12.34	2.21	12.33
(1,222)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:HB2	20	12.34	2.21	12.33
(1,222)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:HB3	20	12.34	2.21	12.33
(1,146)	1:6:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:H	20	11.72	2.84	12.42
(1,35)	1:7:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:H	20	11.7	1.95	11.86
(1,35)	1:7:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:H	20	11.7	1.95	11.86
(1,142)	1:5:A:LYS:HG2	1:11:A:TRP:H	20	11.67	2.53	10.98
(1,142)	1:5:A:LYS:HG3	1:11:A:TRP:H	20	11.67	2.53	10.98
(1,283)	1:5:A:LYS:HG2	1:11:A:TRP:H	20	11.67	2.53	10.98
(1,283)	1:5:A:LYS:HG3	1:11:A:TRP:H	20	11.67	2.53	10.98
(1,102)	1:1:A:ILE:HG21	1:6:A:TRP:H	20	11.63	1.37	11.48
(1,102)	1:1:A:ILE:HG22	1:6:A:TRP:H	20	11.63	1.37	11.48
(1,102)	1:1:A:ILE:HG23	1:6:A:TRP:H	20	11.63	1.37	11.48
(1,171)	1:8:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD2	20	11.54	1.5	11.43
(1,171)	1:8:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD3	20	11.54	1.5	11.43
(1,307)	1:1:A:ILE:HD11	1:5:A:LYS:HA	20	11.36	1.6	11.29
(1,307)	1:1:A:ILE:HD12	1:5:A:LYS:HA	20	11.36	1.6	11.29
(1,307)	1:1:A:ILE:HD13	1:5:A:LYS:HA	20	11.36	1.6	11.29
(1,136)	1:5:A:LYS:HB2	1:11:A:TRP:H	20	11.19	2.44	10.6
(1,136)	1:5:A:LYS:HB3	1:11:A:TRP:H	20	11.19	2.44	10.6
(1,275)	1:5:A:LYS:HB2	1:11:A:TRP:H	20	11.19	2.44	10.6
(1,275)	1:5:A:LYS:HB3	1:11:A:TRP:H	20	11.19	2.44	10.6
(1,225)	1:7:A:LYS:HB2	1:12:A:ARG:H	20	10.91	1.64	11.19
(1,225)	1:7:A:LYS:HB3	1:12:A:ARG:H	20	10.91	1.64	11.19
(1,139)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HE	20	10.83	3.39	10.06
(1,139)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HE	20	10.83	3.39	10.06
(1,209)	1:5:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB2	20	10.75	2.61	10.33
(1,209)	1:5:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB3	20	10.75	2.61	10.33

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,158)	1:7:A:LYS:HD2	1:11:A:TRP:HB2	20	10.7	2.08	10.61
(1,158)	1:7:A:LYS:HD2	1:11:A:TRP:HB3	20	10.7	2.08	10.61
(1,158)	1:7:A:LYS:HD3	1:11:A:TRP:HB2	20	10.7	2.08	10.61
(1,158)	1:7:A:LYS:HD3	1:11:A:TRP:HB3	20	10.7	2.08	10.61
(1,132)	1:7:A:LYS:HE2	1:11:A:TRP:H	20	10.63	2.27	10.74
(1,132)	1:7:A:LYS:HE3	1:11:A:TRP:H	20	10.63	2.27	10.74
(1,211)	1:1:A:ILE:HB	1:6:A:TRP:HB2	20	10.62	2.71	10.92
(1,286)	1:1:A:ILE:HG21	1:5:A:LYS:HA	20	10.61	1.24	10.66
(1,286)	1:1:A:ILE:HG22	1:5:A:LYS:HA	20	10.61	1.24	10.66
(1,286)	1:1:A:ILE:HG23	1:5:A:LYS:HA	20	10.61	1.24	10.66
(1,242)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HD2	20	10.35	2.97	10.62
(1,242)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HD3	20	10.35	2.97	10.62
(1,74)	1:9:A:THR:HG21	1:13:A:ARG:HE	20	10.26	2.25	10.18
(1,74)	1:9:A:THR:HG22	1:13:A:ARG:HE	20	10.26	2.25	10.18
(1,74)	1:9:A:THR:HG23	1:13:A:ARG:HE	20	10.26	2.25	10.18
(1,165)	1:3:A:PRO:HA	1:6:A:TRP:HB2	20	10.16	2.57	11.0
(1,128)	1:7:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:H	20	10.15	1.46	10.2
(1,281)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HE	20	10.12	3.39	9.35
(1,281)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HE	20	10.12	3.39	9.35
(1,135)	1:5:A:LYS:HB2	1:12:A:ARG:HE	20	10.07	3.32	9.95
(1,135)	1:5:A:LYS:HB3	1:12:A:ARG:HE	20	10.07	3.32	9.95
(1,196)	1:3:A:PRO:HA	1:6:A:TRP:HB3	20	10.06	2.37	10.34
(1,2)	1:2:A:LEU:H	1:5:A:LYS:HA	20	9.93	1.06	10.26
(1,94)	1:6:A:TRP:H	1:10:A:PRO:HB2	20	9.9	2.68	10.46
(1,94)	1:6:A:TRP:H	1:10:A:PRO:HB3	20	9.9	2.68	10.46
(1,61)	1:1:A:ILE:HG21	1:5:A:LYS:H	20	9.89	0.99	9.66
(1,61)	1:1:A:ILE:HG22	1:5:A:LYS:H	20	9.89	0.99	9.66
(1,61)	1:1:A:ILE:HG23	1:5:A:LYS:H	20	9.89	0.99	9.66
(1,309)	1:2:A:LEU:HD11	1:7:A:LYS:HA	20	9.88	1.91	10.44
(1,309)	1:2:A:LEU:HD12	1:7:A:LYS:HA	20	9.88	1.91	10.44
(1,309)	1:2:A:LEU:HD13	1:7:A:LYS:HA	20	9.88	1.91	10.44
(1,309)	1:2:A:LEU:HD21	1:7:A:LYS:HA	20	9.88	1.91	10.44
(1,309)	1:2:A:LEU:HD22	1:7:A:LYS:HA	20	9.88	1.91	10.44
(1,309)	1:2:A:LEU:HD23	1:7:A:LYS:HA	20	9.88	1.91	10.44
(1,197)	1:5:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB3	20	9.88	1.76	10.24
(1,98)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:H	20	9.84	2.02	10.44
(1,250)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:H	20	9.84	2.02	10.44
(1,130)	1:9:A:THR:HB	1:12:A:ARG:HE	20	9.75	2.46	9.75
(1,213)	1:1:A:ILE:HB	1:4:A:TRP:HB2	20	9.74	0.87	9.58
(1,131)	1:7:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:HE	20	9.69	3.07	8.67
(1,131)	1:7:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:HE	20	9.69	3.07	8.67
(1,9)	1:2:A:LEU:H	1:5:A:LYS:HG2	20	9.67	1.03	9.93

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,9)	1:2:A:LEU:H	1:5:A:LYS:HG3	20	9.67	1.03	9.93
(1,214)	1:6:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB2	20	9.58	3.34	10.0
(1,214)	1:6:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB3	20	9.58	3.34	10.0
(1,108)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE2	20	9.51	2.38	9.58
(1,108)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE3	20	9.51	2.38	9.58
(1,167)	1:5:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB2	20	9.5	1.73	9.64
(1,316)	1:1:A:ILE:HD11	1:4:A:TRP:HB2	20	9.37	1.0	9.69
(1,316)	1:1:A:ILE:HD12	1:4:A:TRP:HB2	20	9.37	1.0	9.69
(1,316)	1:1:A:ILE:HD13	1:4:A:TRP:HB2	20	9.37	1.0	9.69
(1,274)	1:5:A:LYS:HB2	1:12:A:ARG:HE	20	9.24	3.32	9.12
(1,274)	1:5:A:LYS:HB3	1:12:A:ARG:HE	20	9.24	3.32	9.12
(1,148)	1:8:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:H	20	9.11	0.98	9.06
(1,93)	1:1:A:ILE:HB	1:6:A:TRP:H	20	9.07	1.7	8.77
(1,115)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD2	20	9.02	2.12	9.46
(1,115)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD3	20	9.02	2.12	9.46
(1,107)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:HB3	20	8.86	1.49	9.18
(1,112)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:HB3	20	8.86	1.49	9.18
(1,110)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:HB2	20	8.82	1.93	9.12
(1,172)	1:5:A:LYS:HE2	1:8:A:TRP:H	20	8.76	1.9	8.68
(1,172)	1:5:A:LYS:HE3	1:8:A:TRP:H	20	8.76	1.9	8.68
(1,121)	1:8:A:TRP:H	1:11:A:TRP:H	20	8.71	1.02	8.96
(1,244)	1:7:A:LYS:HD2	1:10:A:PRO:HB2	20	8.61	2.09	9.59
(1,244)	1:7:A:LYS:HD2	1:10:A:PRO:HB3	20	8.61	2.09	9.59
(1,244)	1:7:A:LYS:HD3	1:10:A:PRO:HB2	20	8.61	2.09	9.59
(1,244)	1:7:A:LYS:HD3	1:10:A:PRO:HB3	20	8.61	2.09	9.59
(1,205)	1:1:A:ILE:HB	1:5:A:LYS:HA	20	8.59	1.19	8.84
(1,133)	1:8:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:H	20	8.57	1.06	8.47
(1,260)	1:2:A:LEU:HB3	1:5:A:LYS:HA	20	8.54	1.58	8.7
(1,89)	1:3:A:PRO:HA	1:6:A:TRP:H	20	8.13	1.59	8.51
(1,295)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD2	20	8.07	2.98	8.36
(1,295)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD3	20	8.07	2.98	8.36
(1,295)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD2	20	8.07	2.98	8.36
(1,295)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD3	20	8.07	2.98	8.36
(1,210)	1:7:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB2	20	8.05	1.88	8.82
(1,210)	1:7:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB3	20	8.05	1.88	8.82
(1,141)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HE	20	8.03	2.67	8.0
(1,141)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HE	20	8.03	2.67	8.0
(1,141)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HE	20	8.03	2.67	8.0
(1,284)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HE	20	8.03	2.67	8.0
(1,284)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HE	20	8.03	2.67	8.0
(1,284)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HE	20	8.03	2.67	8.0
(1,103)	1:6:A:TRP:H	1:9:A:THR:HG21	20	8.01	2.06	8.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,103)	1:6:A:TRP:H	1:9:A:THR:HG22	20	8.01	2.06	8.46
(1,103)	1:6:A:TRP:H	1:9:A:THR:HG23	20	8.01	2.06	8.46
(1,52)	1:5:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HE2	20	7.95	1.58	7.88
(1,52)	1:5:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HE3	20	7.95	1.58	7.88
(1,204)	1:6:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG21	20	7.9	1.68	8.2
(1,204)	1:6:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG22	20	7.9	1.68	8.2
(1,204)	1:6:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG23	20	7.9	1.68	8.2
(1,226)	1:2:A:LEU:HB2	1:6:A:TRP:HB2	20	7.9	2.9	8.75
(1,195)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE2	20	7.79	1.55	8.02
(1,195)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE3	20	7.79	1.55	8.02
(1,137)	1:12:A:ARG:HE	1:13:A:ARG:HG3	20	7.78	0.98	7.76
(1,10)	1:2:A:LEU:H	1:6:A:TRP:HB2	20	7.76	2.57	8.76
(1,201)	1:5:A:LYS:HG2	1:7:A:LYS:HE2	20	7.72	1.68	7.77
(1,201)	1:5:A:LYS:HG2	1:7:A:LYS:HE3	20	7.72	1.68	7.77
(1,201)	1:5:A:LYS:HG3	1:7:A:LYS:HE2	20	7.72	1.68	7.77
(1,201)	1:5:A:LYS:HG3	1:7:A:LYS:HE3	20	7.72	1.68	7.77
(1,138)	1:11:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	20	7.7	1.48	7.2
(1,180)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD2	20	7.69	2.98	7.98
(1,180)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD3	20	7.69	2.98	7.98
(1,180)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD2	20	7.69	2.98	7.98
(1,180)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD3	20	7.69	2.98	7.98
(1,69)	1:6:A:TRP:HB2	1:9:A:THR:H	20	7.61	1.67	7.6
(1,78)	1:6:A:TRP:HB2	1:9:A:THR:H	20	7.61	1.67	7.6
(1,288)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HA	20	7.45	1.96	7.7
(1,288)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HA	20	7.45	1.96	7.7
(1,288)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HA	20	7.45	1.96	7.7
(1,153)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:HB2	20	7.43	2.68	8.4
(1,280)	1:5:A:LYS:HD2	1:7:A:LYS:HA	20	7.42	0.85	7.38
(1,280)	1:5:A:LYS:HD3	1:7:A:LYS:HA	20	7.42	0.85	7.38
(1,71)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:H	20	7.34	1.18	7.6
(1,71)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:H	20	7.34	1.18	7.6
(1,11)	1:2:A:LEU:H	1:4:A:TRP:HB2	20	7.23	1.1	7.29
(1,152)	1:10:A:PRO:HB2	1:12:A:ARG:HE	20	7.23	2.08	7.38
(1,152)	1:10:A:PRO:HB3	1:12:A:ARG:HE	20	7.23	2.08	7.38
(1,67)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB2	20	7.13	0.6	7.17
(1,67)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB3	20	7.13	0.6	7.17
(1,77)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB2	20	7.13	0.6	7.17
(1,77)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB3	20	7.13	0.6	7.17
(1,199)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:HG21	20	7.13	1.69	7.8
(1,199)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:HG22	20	7.13	1.69	7.8
(1,199)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:HG23	20	7.13	1.69	7.8
(1,199)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:HG21	20	7.13	1.69	7.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,199)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:HG22	20	7.13	1.69	7.8
(1,199)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:HG23	20	7.13	1.69	7.8
(1,262)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD2	20	7.1	1.32	6.98
(1,262)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD3	20	7.1	1.32	6.98
(1,237)	1:7:A:LYS:HB2	1:10:A:PRO:HB2	20	7.08	1.87	7.84
(1,237)	1:7:A:LYS:HB2	1:10:A:PRO:HB3	20	7.08	1.87	7.84
(1,237)	1:7:A:LYS:HB3	1:10:A:PRO:HB2	20	7.08	1.87	7.84
(1,237)	1:7:A:LYS:HB3	1:10:A:PRO:HB3	20	7.08	1.87	7.84
(1,182)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD2	20	6.97	1.86	7.4
(1,182)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD3	20	6.97	1.86	7.4
(1,182)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD2	20	6.97	1.86	7.4
(1,182)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD3	20	6.97	1.86	7.4
(1,182)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD2	20	6.97	1.86	7.4
(1,182)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD3	20	6.97	1.86	7.4
(1,297)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD2	20	6.97	1.86	7.4
(1,297)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD3	20	6.97	1.86	7.4
(1,297)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD2	20	6.97	1.86	7.4
(1,297)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD3	20	6.97	1.86	7.4
(1,297)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD2	20	6.97	1.86	7.4
(1,297)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD3	20	6.97	1.86	7.4
(1,68)	1:11:A:TRP:HB2	1:13:A:ARG:HE	20	6.95	1.6	7.04
(1,68)	1:11:A:TRP:HB3	1:13:A:ARG:HE	20	6.95	1.6	7.04
(1,215)	1:8:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB2	20	6.92	0.95	6.96
(1,215)	1:8:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB3	20	6.92	0.95	6.96
(1,118)	1:1:A:ILE:HG21	1:4:A:TRP:H	20	6.87	1.2	6.88
(1,118)	1:1:A:ILE:HG22	1:4:A:TRP:H	20	6.87	1.2	6.88
(1,118)	1:1:A:ILE:HG23	1:4:A:TRP:H	20	6.87	1.2	6.88
(1,92)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE2	20	6.87	1.17	7.01
(1,92)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE3	20	6.87	1.17	7.01
(1,287)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HG2	20	6.77	0.94	6.9
(1,287)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HG3	20	6.77	0.94	6.9
(1,80)	1:4:A:TRP:HB2	1:6:A:TRP:H	20	6.7	1.06	6.98
(1,308)	1:1:A:ILE:HD11	1:3:A:PRO:HA	20	6.63	1.44	6.93
(1,308)	1:1:A:ILE:HD12	1:3:A:PRO:HA	20	6.63	1.44	6.93
(1,308)	1:1:A:ILE:HD13	1:3:A:PRO:HA	20	6.63	1.44	6.93
(1,206)	1:1:A:ILE:HB	1:3:A:PRO:HA	20	6.61	0.81	6.79
(1,170)	1:12:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD2	20	6.61	0.73	6.7
(1,170)	1:12:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD3	20	6.61	0.73	6.7
(1,306)	1:2:A:LEU:HD11	1:5:A:LYS:HA	20	6.52	1.66	6.82
(1,306)	1:2:A:LEU:HD12	1:5:A:LYS:HA	20	6.52	1.66	6.82
(1,306)	1:2:A:LEU:HD13	1:5:A:LYS:HA	20	6.52	1.66	6.82
(1,306)	1:2:A:LEU:HD21	1:5:A:LYS:HA	20	6.52	1.66	6.82

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,306)	1:2:A:LEU:HD22	1:5:A:LYS:HA	20	6.52	1.66	6.82
(1,306)	1:2:A:LEU:HD23	1:5:A:LYS:HA	20	6.52	1.66	6.82
(1,267)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:HB3	20	6.5	0.84	6.7
(1,267)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:HB3	20	6.5	0.84	6.7
(1,267)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:HB3	20	6.5	0.84	6.7
(1,318)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:HB3	20	6.5	0.84	6.7
(1,318)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:HB3	20	6.5	0.84	6.7
(1,318)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:HB3	20	6.5	0.84	6.7
(1,14)	1:7:A:LYS:H	1:11:A:TRP:H	20	6.49	1.73	6.52
(1,157)	1:7:A:LYS:HD2	1:8:A:TRP:HB2	20	6.47	1.03	6.63
(1,157)	1:7:A:LYS:HD3	1:8:A:TRP:HB2	20	6.47	1.03	6.63
(1,292)	1:5:A:LYS:HG2	1:7:A:LYS:HA	20	6.47	1.23	6.79
(1,292)	1:5:A:LYS:HG3	1:7:A:LYS:HA	20	6.47	1.23	6.79
(1,145)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	20	6.4	1.5	6.8
(1,145)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HE	20	6.4	1.5	6.8
(1,200)	1:5:A:LYS:HG2	1:6:A:TRP:HB3	20	6.4	0.75	6.34
(1,200)	1:5:A:LYS:HG3	1:6:A:TRP:HB3	20	6.4	0.75	6.34
(1,298)	1:5:A:LYS:HG2	1:6:A:TRP:HB3	20	6.4	0.75	6.34
(1,298)	1:5:A:LYS:HG3	1:6:A:TRP:HB3	20	6.4	0.75	6.34
(1,51)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB3	20	6.38	0.73	6.49
(1,57)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB3	20	6.38	0.73	6.49
(1,185)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB3	20	6.38	0.73	6.49
(1,228)	1:2:A:LEU:HB2	1:4:A:TRP:HB2	20	6.31	1.67	5.85
(1,54)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB2	20	6.29	0.86	6.34
(1,207)	1:10:A:PRO:HB2	1:12:A:ARG:HA	20	6.26	0.89	6.45
(1,207)	1:10:A:PRO:HB3	1:12:A:ARG:HA	20	6.26	0.89	6.45
(1,302)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:HB2	20	6.24	0.95	6.36
(1,302)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:HB2	20	6.24	0.95	6.36
(1,302)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:HB2	20	6.24	0.95	6.36
(1,49)	1:12:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HG3	20	6.23	0.81	6.19
(1,155)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HD2	20	6.2	1.33	6.43
(1,155)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HD3	20	6.2	1.33	6.43
(1,279)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HD2	20	6.19	1.7	6.13
(1,279)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HD3	20	6.19	1.7	6.13
(1,18)	1:7:A:LYS:H	1:8:A:TRP:HB3	20	6.18	0.73	6.38
(1,291)	1:7:A:LYS:HA	1:9:A:THR:HG21	20	6.17	1.31	6.42
(1,291)	1:7:A:LYS:HA	1:9:A:THR:HG22	20	6.17	1.31	6.42
(1,291)	1:7:A:LYS:HA	1:9:A:THR:HG23	20	6.17	1.31	6.42
(1,39)	1:6:A:TRP:HB3	1:8:A:TRP:H	20	6.17	1.3	6.33
(1,243)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HB3	20	6.15	0.68	6.22
(1,254)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD2	20	6.11	1.0	6.01
(1,254)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD3	20	6.11	1.0	6.01

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,42)	1:6:A:TRP:HB2	1:8:A:TRP:H	20	6.09	1.3	6.02
(1,95)	1:2:A:LEU:HB2	1:6:A:TRP:H	20	6.06	2.25	6.62
(1,245)	1:10:A:PRO:HB2	1:12:A:ARG:HG2	20	6.04	1.85	6.85
(1,245)	1:10:A:PRO:HB3	1:12:A:ARG:HG2	20	6.04	1.85	6.85
(1,83)	1:4:A:TRP:HB3	1:6:A:TRP:H	20	5.92	1.09	5.94
(1,91)	1:4:A:TRP:HB3	1:6:A:TRP:H	20	5.92	1.09	5.94
(1,187)	1:4:A:TRP:HB3	1:6:A:TRP:H	20	5.92	1.09	5.94
(1,154)	1:2:A:LEU:HB3	1:4:A:TRP:HB2	20	5.84	1.89	6.1
(1,178)	1:3:A:PRO:HA	1:4:A:TRP:HB3	20	5.83	0.63	5.78
(1,192)	1:3:A:PRO:HA	1:4:A:TRP:HB3	20	5.83	0.63	5.78
(1,269)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HB2	20	5.81	0.56	5.89
(1,269)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HB3	20	5.81	0.56	5.89
(1,37)	1:7:A:LYS:HE2	1:8:A:TRP:H	20	5.72	0.67	5.77
(1,37)	1:7:A:LYS:HE3	1:8:A:TRP:H	20	5.72	0.67	5.77
(1,163)	1:4:A:TRP:HB2	1:5:A:LYS:HA	20	5.68	0.53	5.7
(1,232)	1:2:A:LEU:HB2	1:6:A:TRP:H	20	5.63	2.25	6.2
(1,290)	1:1:A:ILE:HG21	1:3:A:PRO:HA	20	5.55	1.28	5.9
(1,290)	1:1:A:ILE:HG22	1:3:A:PRO:HA	20	5.55	1.28	5.9
(1,290)	1:1:A:ILE:HG23	1:3:A:PRO:HA	20	5.55	1.28	5.9
(1,233)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HB2	20	5.5	0.64	5.65
(1,233)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HB3	20	5.5	0.64	5.65
(1,229)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HB2	20	5.46	0.58	5.36
(1,229)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HB3	20	5.46	0.58	5.36
(1,189)	1:6:A:TRP:HB3	1:7:A:LYS:HA	20	5.37	0.6	5.34
(1,162)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HA	20	5.36	0.72	5.44
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD11	20	5.36	0.67	5.12
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD12	20	5.36	0.67	5.12
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD13	20	5.36	0.67	5.12
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD21	20	5.36	0.67	5.12
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD22	20	5.36	0.67	5.12
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD23	20	5.36	0.67	5.12
(1,258)	1:2:A:LEU:HB3	1:3:A:PRO:HA	20	5.36	0.37	5.28
(1,240)	1:1:A:ILE:HG21	1:2:A:LEU:HB2	20	5.35	0.61	5.16
(1,240)	1:1:A:ILE:HG22	1:2:A:LEU:HB2	20	5.35	0.61	5.16
(1,240)	1:1:A:ILE:HG23	1:2:A:LEU:HB2	20	5.35	0.61	5.16
(1,191)	1:7:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB3	20	5.32	0.59	5.18
(1,125)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HA	20	5.31	0.67	5.32
(1,88)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HA	20	5.29	0.42	5.32
(1,156)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HG2	20	5.21	1.0	5.3
(1,156)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HG2	20	5.21	1.0	5.3
(1,181)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG2	20	5.15	0.83	5.22
(1,181)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG3	20	5.15	0.83	5.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,296)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG2	20	5.15	0.83	5.22
(1,296)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG3	20	5.15	0.83	5.22
(1,164)	1:3:A:PRO:HA	1:4:A:TRP:HB2	20	5.08	0.53	4.9
(1,47)	1:7:A:LYS:HD2	1:8:A:TRP:H	20	5.01	0.62	5.06
(1,47)	1:7:A:LYS:HD3	1:8:A:TRP:H	20	5.01	0.62	5.06
(1,247)	1:7:A:LYS:HD2	1:8:A:TRP:H	20	5.01	0.62	5.06
(1,247)	1:7:A:LYS:HD3	1:8:A:TRP:H	20	5.01	0.62	5.06
(1,32)	1:12:A:ARG:HG2	1:13:A:ARG:H	20	5.01	0.21	5.0
(1,231)	1:11:A:TRP:HB2	1:13:A:ARG:HG2	20	5.0	1.62	5.06
(1,231)	1:11:A:TRP:HB3	1:13:A:ARG:HG2	20	5.0	1.62	5.06
(1,261)	1:12:A:ARG:HA	1:13:A:ARG:HG3	20	4.98	0.69	4.94
(1,252)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:H	20	4.96	2.02	5.56
(1,120)	1:12:A:ARG:H	1:12:A:ARG:HE	20	4.94	0.99	5.08
(1,177)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HA	20	4.91	0.68	4.88
(1,190)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HA	20	4.91	0.68	4.88
(1,140)	1:9:A:THR:HG21	1:11:A:TRP:H	20	4.81	0.92	5.04
(1,140)	1:9:A:THR:HG22	1:11:A:TRP:H	20	4.81	0.92	5.04
(1,140)	1:9:A:THR:HG23	1:11:A:TRP:H	20	4.81	0.92	5.04
(1,282)	1:9:A:THR:HG21	1:11:A:TRP:H	20	4.81	0.92	5.04
(1,282)	1:9:A:THR:HG22	1:11:A:TRP:H	20	4.81	0.92	5.04
(1,282)	1:9:A:THR:HG23	1:11:A:TRP:H	20	4.81	0.92	5.04
(1,212)	1:10:A:PRO:HB2	1:11:A:TRP:HB2	20	4.8	0.72	4.81
(1,212)	1:10:A:PRO:HB2	1:11:A:TRP:HB3	20	4.8	0.72	4.81
(1,212)	1:10:A:PRO:HB3	1:11:A:TRP:HB2	20	4.8	0.72	4.81
(1,212)	1:10:A:PRO:HB3	1:11:A:TRP:HB3	20	4.8	0.72	4.81
(1,227)	1:7:A:LYS:HB2	1:8:A:TRP:HB2	20	4.69	0.79	4.82
(1,227)	1:7:A:LYS:HB3	1:8:A:TRP:HB2	20	4.69	0.79	4.82
(1,160)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HA	20	4.67	0.35	4.62
(1,160)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HA	20	4.67	0.35	4.62
(1,161)	1:7:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB2	20	4.64	0.36	4.66
(1,193)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE2	20	4.64	0.64	4.58
(1,193)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE3	20	4.64	0.64	4.58
(1,314)	1:2:A:LEU:HD11	1:4:A:TRP:HB2	20	4.57	1.7	3.96
(1,314)	1:2:A:LEU:HD12	1:4:A:TRP:HB2	20	4.57	1.7	3.96
(1,314)	1:2:A:LEU:HD13	1:4:A:TRP:HB2	20	4.57	1.7	3.96
(1,314)	1:2:A:LEU:HD21	1:4:A:TRP:HB2	20	4.57	1.7	3.96
(1,314)	1:2:A:LEU:HD22	1:4:A:TRP:HB2	20	4.57	1.7	3.96
(1,314)	1:2:A:LEU:HD23	1:4:A:TRP:HB2	20	4.57	1.7	3.96
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD11	20	4.47	1.04	5.24
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD12	20	4.47	1.04	5.24
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD13	20	4.47	1.04	5.24
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD21	20	4.47	1.04	5.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD22	20	4.47	1.04	5.24
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD23	20	4.47	1.04	5.24
(1,28)	1:13:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD2	20	4.45	0.49	4.47
(1,28)	1:13:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD3	20	4.45	0.49	4.47
(1,304)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:H	20	4.45	0.73	4.4
(1,304)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:H	20	4.45	0.73	4.4
(1,304)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:H	20	4.45	0.73	4.4
(1,259)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD2	20	3.76	0.74	4.06
(1,259)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD3	20	3.76	0.74	4.06
(1,17)	1:6:A:TRP:HB3	1:7:A:LYS:H	20	3.69	0.8	3.88
(1,41)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:H	20	3.38	0.52	3.49
(1,41)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:H	20	3.38	0.52	3.49
(1,45)	1:7:A:LYS:HB2	1:8:A:TRP:H	20	2.91	0.59	2.88
(1,45)	1:7:A:LYS:HB3	1:8:A:TRP:H	20	2.91	0.59	2.88
(1,224)	1:7:A:LYS:HB2	1:8:A:TRP:H	20	2.91	0.59	2.88
(1,224)	1:7:A:LYS:HB3	1:8:A:TRP:H	20	2.91	0.59	2.88
(1,253)	1:5:A:LYS:HB2	1:6:A:TRP:H	20	2.83	0.72	2.52
(1,253)	1:5:A:LYS:HB3	1:6:A:TRP:H	20	2.83	0.72	2.52
(1,235)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HB2	20	2.72	0.83	2.96
(1,221)	1:7:A:LYS:HB2	1:7:A:LYS:HD2	20	2.39	0.22	2.37
(1,221)	1:7:A:LYS:HB2	1:7:A:LYS:HD3	20	2.39	0.22	2.37
(1,221)	1:7:A:LYS:HB3	1:7:A:LYS:HD2	20	2.39	0.22	2.37
(1,221)	1:7:A:LYS:HB3	1:7:A:LYS:HD3	20	2.39	0.22	2.37
(1,117)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HG2	20	1.73	0.59	1.76
(1,117)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HG3	20	1.73	0.59	1.76
(1,313)	1:2:A:LEU:HD11	1:6:A:TRP:HB2	19	4.12	1.79	4.13
(1,313)	1:2:A:LEU:HD12	1:6:A:TRP:HB2	19	4.12	1.79	4.13
(1,313)	1:2:A:LEU:HD13	1:6:A:TRP:HB2	19	4.12	1.79	4.13
(1,313)	1:2:A:LEU:HD21	1:6:A:TRP:HB2	19	4.12	1.79	4.13
(1,313)	1:2:A:LEU:HD22	1:6:A:TRP:HB2	19	4.12	1.79	4.13
(1,313)	1:2:A:LEU:HD23	1:6:A:TRP:HB2	19	4.12	1.79	4.13
(1,86)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:H	19	2.91	1.07	3.27
(1,188)	1:5:A:LYS:HA	1:6:A:TRP:HB3	19	0.75	0.47	0.6
(1,249)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD2	16	1.43	0.83	1.44
(1,249)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD3	16	1.43	0.83	1.44
(1,129)	1:9:A:THR:HB	1:11:A:TRP:H	14	1.33	0.65	1.1
(1,85)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:H	14	0.32	0.18	0.22
(1,114)	1:2:A:LEU:HB3	1:4:A:TRP:H	13	1.02	0.6	0.92
(1,159)	1:5:A:LYS:HA	1:6:A:TRP:HB2	13	0.86	0.46	1.04
(1,64)	1:13:A:ARG:HA	1:13:A:ARG:HE	13	0.58	0.41	0.36
(1,19)	1:7:A:LYS:H	1:8:A:TRP:H	13	0.38	0.21	0.3
(1,63)	1:13:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HE	12	0.64	0.6	0.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,119)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:ARG:H	12	0.4	0.13	0.41
(1,16)	1:7:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HE2	11	0.5	0.44	0.36
(1,16)	1:7:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HE3	11	0.5	0.44	0.36
(1,27)	1:12:A:ARG:HD2	1:13:A:ARG:H	10	0.96	0.42	0.82
(1,27)	1:12:A:ARG:HD3	1:13:A:ARG:H	10	0.96	0.42	0.82
(1,198)	1:8:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG21	8	0.66	0.31	0.64
(1,198)	1:8:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG22	8	0.66	0.31	0.64
(1,198)	1:8:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG23	8	0.66	0.31	0.64
(1,105)	1:5:A:LYS:HD2	1:6:A:TRP:H	8	0.57	0.33	0.48
(1,105)	1:5:A:LYS:HD3	1:6:A:TRP:H	8	0.57	0.33	0.48
(1,23)	1:7:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HD2	7	0.8	0.41	0.64
(1,23)	1:7:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HD3	7	0.8	0.41	0.64
(1,268)	1:2:A:LEU:HB3	1:4:A:TRP:H	7	0.71	0.48	0.59
(1,43)	1:12:A:ARG:H	1:13:A:ARG:H	6	0.33	0.12	0.34
(1,278)	1:5:A:LYS:HA	1:5:A:LYS:HD2	6	0.29	0.15	0.29
(1,278)	1:5:A:LYS:HA	1:5:A:LYS:HD3	6	0.29	0.15	0.29
(1,31)	1:13:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HG3	5	0.73	0.39	0.73
(1,123)	1:12:A:ARG:HA	1:12:A:ARG:HE	5	0.35	0.19	0.38
(1,272)	1:13:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HG3	4	0.55	0.26	0.48
(1,241)	1:7:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HD2	4	0.54	0.36	0.53
(1,241)	1:7:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HD3	4	0.54	0.36	0.53
(1,183)	1:12:A:ARG:HD2	1:13:A:ARG:H	4	0.49	0.2	0.59
(1,183)	1:12:A:ARG:HD3	1:13:A:ARG:H	4	0.49	0.2	0.59
(1,46)	1:12:A:ARG:H	1:12:A:ARG:HG2	4	0.44	0.21	0.48
(1,26)	1:12:A:ARG:HA	1:13:A:ARG:H	4	0.24	0.06	0.24
(1,104)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:H	4	0.16	0.04	0.16
(1,59)	1:5:A:LYS:H	1:5:A:LYS:HD2	3	0.71	0.22	0.65
(1,59)	1:5:A:LYS:H	1:5:A:LYS:HD3	3	0.71	0.22	0.65
(1,101)	1:5:A:LYS:HG2	1:6:A:TRP:H	3	0.31	0.13	0.38
(1,101)	1:5:A:LYS:HG3	1:6:A:TRP:H	3	0.31	0.13	0.38
(1,246)	1:12:A:ARG:H	1:12:A:ARG:HG2	3	0.23	0.1	0.2
(1,90)	1:6:A:TRP:H	1:6:A:TRP:HB3	3	0.23	0.03	0.24
(1,7)	1:2:A:LEU:H	1:2:A:LEU:HB2	3	0.22	0.03	0.23
(1,82)	1:6:A:TRP:H	1:6:A:TRP:HB3	3	0.2	0.03	0.21
(1,305)	1:2:A:LEU:HD11	1:3:A:PRO:HA	3	0.18	0.03	0.17
(1,305)	1:2:A:LEU:HD12	1:3:A:PRO:HA	3	0.18	0.03	0.17
(1,305)	1:2:A:LEU:HD13	1:3:A:PRO:HA	3	0.18	0.03	0.17
(1,305)	1:2:A:LEU:HD21	1:3:A:PRO:HA	3	0.18	0.03	0.17
(1,305)	1:2:A:LEU:HD22	1:3:A:PRO:HA	3	0.18	0.03	0.17
(1,305)	1:2:A:LEU:HD23	1:3:A:PRO:HA	3	0.18	0.03	0.17
(1,29)	1:13:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HG2	2	0.5	0.05	0.5
(1,6)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:H	2	0.3	0.11	0.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

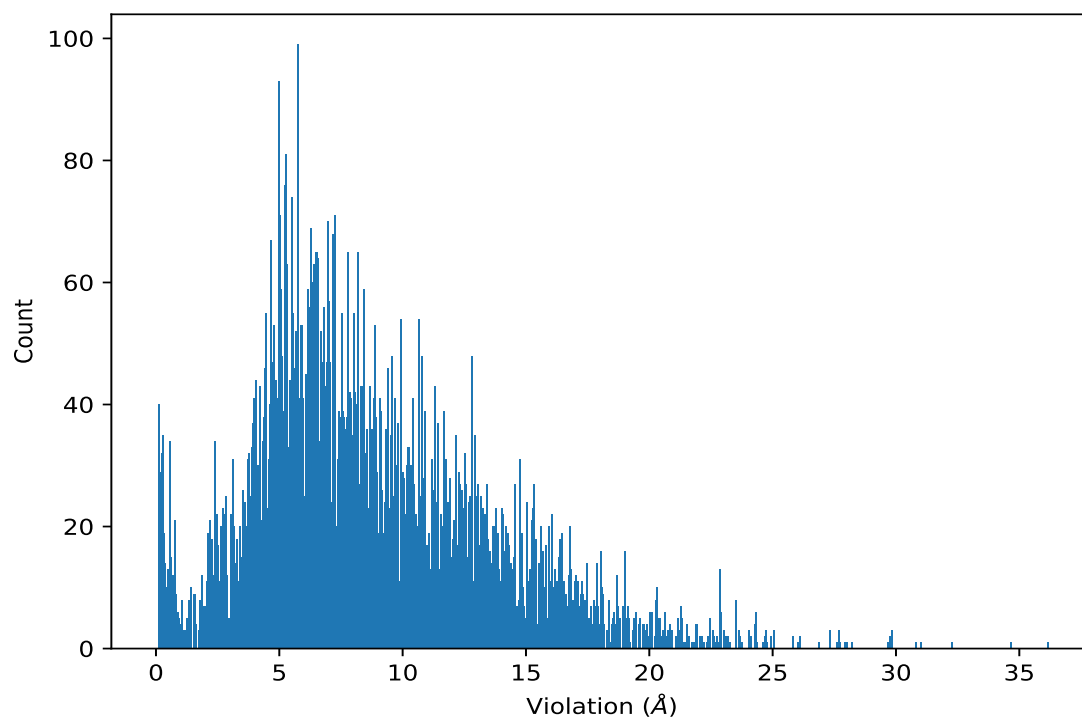
Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)	Median (Å)
(1,1)	1:2:A:LEU:H	1:3:A:PRO:HA	2	0.2	0.06	0.2
(1,36)	1:8:A:TRP:H	1:8:A:TRP:HB3	2	0.11	0.0	0.11

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)
(1,238)	1:1:A:ILE:HB	1:13:A:ARG:HG2	8	36.18
(1,238)	1:1:A:ILE:HB	1:13:A:ARG:HG2	12	34.65

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,238)	1:1:A:ILE:HB	1:13:A:ARG:HG2	20	32.26
(1,238)	1:1:A:ILE:HB	1:13:A:ARG:HG2	13	31.03
(1,4)	1:2:A:LEU:H	1:12:A:ARG:HA	12	30.82
(1,311)	1:1:A:ILE:HD11	1:12:A:ARG:HA	12	29.81
(1,311)	1:1:A:ILE:HD12	1:12:A:ARG:HA	12	29.81
(1,311)	1:1:A:ILE:HD13	1:12:A:ARG:HA	12	29.81
(1,238)	1:1:A:ILE:HB	1:13:A:ARG:HG2	9	29.79
(1,271)	1:4:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	12	29.75
(1,238)	1:1:A:ILE:HB	1:13:A:ARG:HG2	16	29.67
(1,271)	1:4:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	8	28.23
(1,271)	1:4:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	9	28.01
(1,4)	1:2:A:LEU:H	1:12:A:ARG:HA	9	27.94
(1,4)	1:2:A:LEU:H	1:12:A:ARG:HA	20	27.73
(1,143)	1:1:A:ILE:HG21	1:12:A:ARG:HE	19	27.69
(1,143)	1:1:A:ILE:HG22	1:12:A:ARG:HE	19	27.69
(1,143)	1:1:A:ILE:HG23	1:12:A:ARG:HE	19	27.69
(1,4)	1:2:A:LEU:H	1:12:A:ARG:HA	8	27.65
(1,143)	1:1:A:ILE:HG21	1:12:A:ARG:HE	12	27.33
(1,143)	1:1:A:ILE:HG22	1:12:A:ARG:HE	12	27.33
(1,143)	1:1:A:ILE:HG23	1:12:A:ARG:HE	12	27.33
(1,149)	1:4:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	12	26.9
(1,271)	1:4:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	20	26.14
(1,4)	1:2:A:LEU:H	1:12:A:ARG:HA	19	26.11
(1,238)	1:1:A:ILE:HB	1:13:A:ARG:HG2	10	26.01
(1,238)	1:1:A:ILE:HB	1:13:A:ARG:HG2	14	25.84
(1,238)	1:1:A:ILE:HB	1:13:A:ARG:HG2	7	25.8
(1,143)	1:1:A:ILE:HG21	1:12:A:ARG:HE	8	25.09
(1,143)	1:1:A:ILE:HG22	1:12:A:ARG:HE	8	25.09
(1,143)	1:1:A:ILE:HG23	1:12:A:ARG:HE	8	25.09
(1,271)	1:4:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	13	24.93
(1,230)	1:6:A:TRP:HB2	1:13:A:ARG:HG2	8	24.93
(1,238)	1:1:A:ILE:HB	1:13:A:ARG:HG2	6	24.79
(1,311)	1:1:A:ILE:HD11	1:12:A:ARG:HA	8	24.71
(1,311)	1:1:A:ILE:HD12	1:12:A:ARG:HA	8	24.71
(1,311)	1:1:A:ILE:HD13	1:12:A:ARG:HA	8	24.71
(1,255)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	9	24.7
(1,99)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	9	24.7
(1,4)	1:2:A:LEU:H	1:12:A:ARG:HA	16	24.62
(1,149)	1:4:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	13	24.38
(1,311)	1:1:A:ILE:HD11	1:12:A:ARG:HA	16	24.34
(1,311)	1:1:A:ILE:HD12	1:12:A:ARG:HA	16	24.34
(1,311)	1:1:A:ILE:HD13	1:12:A:ARG:HA	16	24.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,311)	1:1:A:ILE:HD11	1:12:A:ARG:HA	13	24.3
(1,311)	1:1:A:ILE:HD12	1:12:A:ARG:HA	13	24.3
(1,311)	1:1:A:ILE:HD13	1:12:A:ARG:HA	13	24.3
(1,311)	1:1:A:ILE:HD11	1:12:A:ARG:HA	20	24.29
(1,311)	1:1:A:ILE:HD12	1:12:A:ARG:HA	20	24.29
(1,311)	1:1:A:ILE:HD13	1:12:A:ARG:HA	20	24.29
(1,4)	1:2:A:LEU:H	1:12:A:ARG:HA	13	24.29
(1,75)	1:5:A:LYS:HG2	1:13:A:ARG:HE	9	24.12
(1,75)	1:5:A:LYS:HG3	1:13:A:ARG:HE	9	24.12
(1,238)	1:1:A:ILE:HB	1:13:A:ARG:HG2	5	24.09
(1,238)	1:1:A:ILE:HB	1:13:A:ARG:HG2	19	24.08
(1,143)	1:1:A:ILE:HG21	1:12:A:ARG:HE	20	24.0
(1,143)	1:1:A:ILE:HG22	1:12:A:ARG:HE	20	24.0
(1,143)	1:1:A:ILE:HG23	1:12:A:ARG:HE	20	24.0
(1,149)	1:4:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	19	23.76
(1,270)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	12	23.69
(1,116)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	12	23.69
(1,271)	1:4:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	16	23.63
(1,255)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	8	23.61
(1,99)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	8	23.61
(1,234)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG2	8	23.53
(1,179)	1:3:A:PRO:HA	1:12:A:ARG:HD2	19	23.53
(1,179)	1:3:A:PRO:HA	1:12:A:ARG:HD3	19	23.53
(1,96)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG2	8	23.53
(1,143)	1:1:A:ILE:HG21	1:12:A:ARG:HE	10	23.51
(1,143)	1:1:A:ILE:HG22	1:12:A:ARG:HE	10	23.51
(1,143)	1:1:A:ILE:HG23	1:12:A:ARG:HE	10	23.51
(1,217)	1:1:A:ILE:HB	1:8:A:TRP:HB2	18	23.5
(1,217)	1:1:A:ILE:HB	1:8:A:TRP:HB2	13	23.29
(1,270)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	9	23.19
(1,116)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	9	23.19
(1,270)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	20	23.12
(1,116)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	20	23.12
(1,238)	1:1:A:ILE:HB	1:13:A:ARG:HG2	4	23.09
(1,4)	1:2:A:LEU:H	1:12:A:ARG:HA	10	23.07
(1,4)	1:2:A:LEU:H	1:12:A:ARG:HA	14	23.04
(1,234)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG2	9	23.01
(1,96)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG2	9	23.01
(1,311)	1:1:A:ILE:HD11	1:12:A:ARG:HA	4	22.92
(1,311)	1:1:A:ILE:HD12	1:12:A:ARG:HA	4	22.92
(1,311)	1:1:A:ILE:HD13	1:12:A:ARG:HA	4	22.92
(1,143)	1:1:A:ILE:HG21	1:12:A:ARG:HE	13	22.92

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,143)	1:1:A:ILE:HG22	1:12:A:ARG:HE	13	22.92
(1,143)	1:1:A:ILE:HG23	1:12:A:ARG:HE	13	22.92
(1,149)	1:4:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	9	22.9
(1,310)	1:2:A:LEU:HD11	1:12:A:ARG:HA	12	22.89
(1,310)	1:2:A:LEU:HD12	1:12:A:ARG:HA	12	22.89
(1,310)	1:2:A:LEU:HD13	1:12:A:ARG:HA	12	22.89
(1,310)	1:2:A:LEU:HD21	1:12:A:ARG:HA	12	22.89
(1,310)	1:2:A:LEU:HD22	1:12:A:ARG:HA	12	22.89
(1,310)	1:2:A:LEU:HD23	1:12:A:ARG:HA	12	22.89
(1,238)	1:1:A:ILE:HB	1:13:A:ARG:HG2	17	22.89
(1,255)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	12	22.87
(1,99)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	12	22.87
(1,311)	1:1:A:ILE:HD11	1:12:A:ARG:HA	19	22.86
(1,311)	1:1:A:ILE:HD12	1:12:A:ARG:HA	19	22.86
(1,311)	1:1:A:ILE:HD13	1:12:A:ARG:HA	19	22.86
(1,271)	1:4:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	14	22.8
(1,270)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	19	22.73
(1,116)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	19	22.73
(1,4)	1:2:A:LEU:H	1:12:A:ARG:HA	5	22.7
(1,179)	1:3:A:PRO:HA	1:12:A:ARG:HD2	12	22.63
(1,179)	1:3:A:PRO:HA	1:12:A:ARG:HD3	12	22.63
(1,311)	1:1:A:ILE:HD11	1:12:A:ARG:HA	10	22.58
(1,311)	1:1:A:ILE:HD12	1:12:A:ARG:HA	10	22.58
(1,311)	1:1:A:ILE:HD13	1:12:A:ARG:HA	10	22.58
(1,179)	1:3:A:PRO:HA	1:12:A:ARG:HD2	10	22.48
(1,179)	1:3:A:PRO:HA	1:12:A:ARG:HD3	10	22.48
(1,143)	1:1:A:ILE:HG21	1:12:A:ARG:HE	9	22.47
(1,143)	1:1:A:ILE:HG22	1:12:A:ARG:HE	9	22.47
(1,143)	1:1:A:ILE:HG23	1:12:A:ARG:HE	9	22.47
(1,149)	1:4:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	18	22.41
(1,179)	1:3:A:PRO:HA	1:12:A:ARG:HD2	9	22.37
(1,179)	1:3:A:PRO:HA	1:12:A:ARG:HD3	9	22.37
(1,4)	1:2:A:LEU:H	1:12:A:ARG:HA	7	22.34
(1,230)	1:6:A:TRP:HB2	1:13:A:ARG:HG2	9	22.23
(1,75)	1:5:A:LYS:HG2	1:13:A:ARG:HE	1	22.13
(1,75)	1:5:A:LYS:HG3	1:13:A:ARG:HE	1	22.13
(1,113)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD2	9	22.07
(1,113)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD3	9	22.07
(1,113)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD2	12	21.95
(1,113)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD3	12	21.95
(1,113)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD2	19	21.91
(1,113)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD3	19	21.91

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,72)	1:7:A:LYS:HE2	1:13:A:ARG:HE	8	21.89
(1,72)	1:7:A:LYS:HE3	1:13:A:ARG:HE	8	21.89
(1,270)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	13	21.86
(1,116)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	13	21.86
(1,124)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HE	12	21.83
(1,271)	1:4:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	10	21.75
(1,217)	1:1:A:ILE:HB	1:8:A:TRP:HB2	8	21.72
(1,179)	1:3:A:PRO:HA	1:12:A:ARG:HD2	13	21.63
(1,179)	1:3:A:PRO:HA	1:12:A:ARG:HD3	13	21.63
(1,4)	1:2:A:LEU:H	1:12:A:ARG:HA	1	21.54
(1,4)	1:2:A:LEU:H	1:12:A:ARG:HA	4	21.54
(1,149)	1:4:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	20	21.52
(1,149)	1:4:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	8	21.5
(1,217)	1:1:A:ILE:HB	1:8:A:TRP:HB2	10	21.48
(1,271)	1:4:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	5	21.41
(1,124)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HE	10	21.36
(1,143)	1:1:A:ILE:HG21	1:12:A:ARG:HE	7	21.34
(1,143)	1:1:A:ILE:HG22	1:12:A:ARG:HE	7	21.34
(1,143)	1:1:A:ILE:HG23	1:12:A:ARG:HE	7	21.34
(1,113)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD2	13	21.31
(1,113)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD3	13	21.31
(1,75)	1:5:A:LYS:HG2	1:13:A:ARG:HE	14	21.27
(1,75)	1:5:A:LYS:HG3	1:13:A:ARG:HE	14	21.27
(1,311)	1:1:A:ILE:HD11	1:12:A:ARG:HA	9	21.26
(1,311)	1:1:A:ILE:HD12	1:12:A:ARG:HA	9	21.26
(1,311)	1:1:A:ILE:HD13	1:12:A:ARG:HA	9	21.26
(1,234)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG2	12	21.25
(1,96)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG2	12	21.25
(1,143)	1:1:A:ILE:HG21	1:12:A:ARG:HE	16	21.23
(1,143)	1:1:A:ILE:HG22	1:12:A:ARG:HE	16	21.23
(1,143)	1:1:A:ILE:HG23	1:12:A:ARG:HE	16	21.23
(1,75)	1:5:A:LYS:HG2	1:13:A:ARG:HE	8	21.2
(1,75)	1:5:A:LYS:HG3	1:13:A:ARG:HE	8	21.2
(1,143)	1:1:A:ILE:HG21	1:12:A:ARG:HE	5	21.17
(1,143)	1:1:A:ILE:HG22	1:12:A:ARG:HE	5	21.17
(1,143)	1:1:A:ILE:HG23	1:12:A:ARG:HE	5	21.17
(1,270)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	8	21.11
(1,116)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	8	21.11
(1,179)	1:3:A:PRO:HA	1:12:A:ARG:HD2	8	21.08
(1,179)	1:3:A:PRO:HA	1:12:A:ARG:HD3	8	21.08
(1,255)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	5	20.95
(1,99)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	5	20.95

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,271)	1:4:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	6	20.94
(1,4)	1:2:A:LEU:H	1:12:A:ARG:HA	18	20.82
(1,311)	1:1:A:ILE:HD11	1:12:A:ARG:HA	14	20.8
(1,311)	1:1:A:ILE:HD12	1:12:A:ARG:HA	14	20.8
(1,311)	1:1:A:ILE:HD13	1:12:A:ARG:HA	14	20.8
(1,311)	1:1:A:ILE:HD11	1:12:A:ARG:HA	7	20.75
(1,311)	1:1:A:ILE:HD12	1:12:A:ARG:HA	7	20.75
(1,311)	1:1:A:ILE:HD13	1:12:A:ARG:HA	7	20.75
(1,255)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	14	20.72
(1,99)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	14	20.72
(1,217)	1:1:A:ILE:HB	1:8:A:TRP:HB2	20	20.69
(1,149)	1:4:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	10	20.67
(1,310)	1:2:A:LEU:HD11	1:12:A:ARG:HA	9	20.62
(1,310)	1:2:A:LEU:HD12	1:12:A:ARG:HA	9	20.62
(1,310)	1:2:A:LEU:HD13	1:12:A:ARG:HA	9	20.62
(1,310)	1:2:A:LEU:HD21	1:12:A:ARG:HA	9	20.62
(1,310)	1:2:A:LEU:HD22	1:12:A:ARG:HA	9	20.62
(1,310)	1:2:A:LEU:HD23	1:12:A:ARG:HA	9	20.62
(1,208)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HA	20	20.55
(1,72)	1:7:A:LYS:HE2	1:13:A:ARG:HE	18	20.55
(1,72)	1:7:A:LYS:HE3	1:13:A:ARG:HE	18	20.55
(1,113)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD2	20	20.53
(1,113)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD3	20	20.53
(1,238)	1:1:A:ILE:HB	1:13:A:ARG:HG2	18	20.46
(1,174)	1:5:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:H	9	20.45
(1,174)	1:5:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:H	9	20.45
(1,58)	1:5:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HD2	9	20.43
(1,58)	1:5:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HD3	9	20.43
(1,4)	1:2:A:LEU:H	1:12:A:ARG:HA	6	20.42
(1,289)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HA	9	20.36
(1,289)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HA	9	20.36
(1,270)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	10	20.36
(1,116)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	10	20.36
(1,217)	1:1:A:ILE:HB	1:8:A:TRP:HB2	12	20.35
(1,273)	1:5:A:LYS:HB2	1:13:A:ARG:H	12	20.33
(1,273)	1:5:A:LYS:HB3	1:13:A:ARG:H	12	20.33
(1,33)	1:5:A:LYS:HB2	1:13:A:ARG:H	12	20.33
(1,33)	1:5:A:LYS:HB3	1:13:A:ARG:H	12	20.33
(1,310)	1:2:A:LEU:HD11	1:12:A:ARG:HA	20	20.31
(1,310)	1:2:A:LEU:HD12	1:12:A:ARG:HA	20	20.31
(1,310)	1:2:A:LEU:HD13	1:12:A:ARG:HA	20	20.31
(1,310)	1:2:A:LEU:HD21	1:12:A:ARG:HA	20	20.31

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,310)	1:2:A:LEU:HD22	1:12:A:ARG:HA	20	20.31
(1,310)	1:2:A:LEU:HD23	1:12:A:ARG:HA	20	20.31
(1,179)	1:3:A:PRO:HA	1:12:A:ARG:HD2	20	20.29
(1,179)	1:3:A:PRO:HA	1:12:A:ARG:HD3	20	20.29
(1,113)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD2	8	20.26
(1,113)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD3	8	20.26
(1,273)	1:5:A:LYS:HB2	1:13:A:ARG:H	9	20.25
(1,273)	1:5:A:LYS:HB3	1:13:A:ARG:H	9	20.25
(1,33)	1:5:A:LYS:HB2	1:13:A:ARG:H	9	20.25
(1,33)	1:5:A:LYS:HB3	1:13:A:ARG:H	9	20.25
(1,72)	1:7:A:LYS:HE2	1:13:A:ARG:HE	7	20.23
(1,72)	1:7:A:LYS:HE3	1:13:A:ARG:HE	7	20.23
(1,143)	1:1:A:ILE:HG21	1:12:A:ARG:HE	4	20.13
(1,143)	1:1:A:ILE:HG22	1:12:A:ARG:HE	4	20.13
(1,143)	1:1:A:ILE:HG23	1:12:A:ARG:HE	4	20.13
(1,143)	1:1:A:ILE:HG21	1:12:A:ARG:HE	18	20.12
(1,143)	1:1:A:ILE:HG22	1:12:A:ARG:HE	18	20.12
(1,143)	1:1:A:ILE:HG23	1:12:A:ARG:HE	18	20.12
(1,124)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HE	19	20.06
(1,72)	1:7:A:LYS:HE2	1:13:A:ARG:HE	20	20.05
(1,72)	1:7:A:LYS:HE3	1:13:A:ARG:HE	20	20.05
(1,271)	1:4:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	7	20.04
(1,127)	1:7:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HE	13	20.04
(1,236)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HB2	20	20.02
(1,236)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HB3	20	20.02
(1,255)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	16	20.0
(1,99)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	16	20.0
(1,234)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG2	5	19.98
(1,96)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG2	5	19.98
(1,217)	1:1:A:ILE:HB	1:8:A:TRP:HB2	17	19.94
(1,217)	1:1:A:ILE:HB	1:8:A:TRP:HB2	14	19.91
(1,75)	1:5:A:LYS:HG2	1:13:A:ARG:HE	5	19.91
(1,75)	1:5:A:LYS:HG3	1:13:A:ARG:HE	5	19.91
(1,124)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HE	13	19.88
(1,75)	1:5:A:LYS:HG2	1:13:A:ARG:HE	20	19.85
(1,75)	1:5:A:LYS:HG3	1:13:A:ARG:HE	20	19.85
(1,174)	1:5:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:H	1	19.79
(1,174)	1:5:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:H	1	19.79
(1,72)	1:7:A:LYS:HE2	1:13:A:ARG:HE	5	19.76
(1,72)	1:7:A:LYS:HE3	1:13:A:ARG:HE	5	19.76
(1,217)	1:1:A:ILE:HB	1:8:A:TRP:HB2	15	19.72
(1,143)	1:1:A:ILE:HG21	1:12:A:ARG:HE	14	19.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,143)	1:1:A:ILE:HG22	1:12:A:ARG:HE	14	19.72
(1,143)	1:1:A:ILE:HG23	1:12:A:ARG:HE	14	19.72
(1,270)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	16	19.64
(1,116)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	16	19.64
(1,124)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HE	9	19.62
(1,72)	1:7:A:LYS:HE2	1:13:A:ARG:HE	6	19.6
(1,72)	1:7:A:LYS:HE3	1:13:A:ARG:HE	6	19.6
(1,230)	1:6:A:TRP:HB2	1:13:A:ARG:HG2	16	19.59
(1,263)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HG2	9	19.58
(1,234)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG2	14	19.55
(1,96)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG2	14	19.55
(1,147)	1:6:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	8	19.49
(1,113)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD2	10	19.48
(1,113)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD3	10	19.48
(1,147)	1:6:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	7	19.47
(1,58)	1:5:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HD2	13	19.46
(1,58)	1:5:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HD3	13	19.46
(1,208)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HA	18	19.45
(1,289)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HA	1	19.4
(1,289)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HA	1	19.4
(1,230)	1:6:A:TRP:HB2	1:13:A:ARG:HG2	1	19.39
(1,75)	1:5:A:LYS:HG2	1:13:A:ARG:HE	12	19.36
(1,75)	1:5:A:LYS:HG3	1:13:A:ARG:HE	12	19.36
(1,256)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	9	19.34
(1,251)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	9	19.34
(1,100)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	9	19.34
(1,271)	1:4:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	19	19.24
(1,208)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HA	16	19.2
(1,311)	1:1:A:ILE:HD11	1:12:A:ARG:HA	18	19.18
(1,311)	1:1:A:ILE:HD12	1:12:A:ARG:HA	18	19.18
(1,311)	1:1:A:ILE:HD13	1:12:A:ARG:HA	18	19.18
(1,208)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HA	13	19.18
(1,217)	1:1:A:ILE:HB	1:8:A:TRP:HB2	6	19.15
(1,230)	1:6:A:TRP:HB2	1:13:A:ARG:HG2	17	19.14
(1,273)	1:5:A:LYS:HB2	1:13:A:ARG:H	1	19.12
(1,273)	1:5:A:LYS:HB3	1:13:A:ARG:H	1	19.12
(1,33)	1:5:A:LYS:HB2	1:13:A:ARG:H	1	19.12
(1,33)	1:5:A:LYS:HB3	1:13:A:ARG:H	1	19.12
(1,230)	1:6:A:TRP:HB2	1:13:A:ARG:HG2	7	19.11
(1,255)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	13	19.08
(1,99)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	13	19.08
(1,174)	1:5:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:H	2	19.05

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,174)	1:5:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:H	2	19.05
(1,124)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HE	4	19.05
(1,176)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HD2	9	19.04
(1,176)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HD3	9	19.04
(1,310)	1:2:A:LEU:HD11	1:12:A:ARG:HA	1	19.02
(1,310)	1:2:A:LEU:HD12	1:12:A:ARG:HA	1	19.02
(1,310)	1:2:A:LEU:HD13	1:12:A:ARG:HA	1	19.02
(1,310)	1:2:A:LEU:HD21	1:12:A:ARG:HA	1	19.02
(1,310)	1:2:A:LEU:HD22	1:12:A:ARG:HA	1	19.02
(1,310)	1:2:A:LEU:HD23	1:12:A:ARG:HA	1	19.02
(1,310)	1:2:A:LEU:HD11	1:12:A:ARG:HA	16	19.01
(1,310)	1:2:A:LEU:HD12	1:12:A:ARG:HA	16	19.01
(1,310)	1:2:A:LEU:HD13	1:12:A:ARG:HA	16	19.01
(1,310)	1:2:A:LEU:HD21	1:12:A:ARG:HA	16	19.01
(1,310)	1:2:A:LEU:HD22	1:12:A:ARG:HA	16	19.01
(1,310)	1:2:A:LEU:HD23	1:12:A:ARG:HA	16	19.01
(1,217)	1:1:A:ILE:HB	1:8:A:TRP:HB2	19	19.01
(1,263)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HG2	10	19.0
(1,149)	1:4:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	5	18.97
(1,310)	1:2:A:LEU:HD11	1:12:A:ARG:HA	13	18.93
(1,310)	1:2:A:LEU:HD12	1:12:A:ARG:HA	13	18.93
(1,310)	1:2:A:LEU:HD13	1:12:A:ARG:HA	13	18.93
(1,310)	1:2:A:LEU:HD21	1:12:A:ARG:HA	13	18.93
(1,310)	1:2:A:LEU:HD22	1:12:A:ARG:HA	13	18.93
(1,310)	1:2:A:LEU:HD23	1:12:A:ARG:HA	13	18.93
(1,238)	1:1:A:ILE:HB	1:13:A:ARG:HG2	1	18.93
(1,216)	1:4:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB2	12	18.83
(1,216)	1:4:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB3	12	18.83
(1,75)	1:5:A:LYS:HG2	1:13:A:ARG:HE	2	18.82
(1,75)	1:5:A:LYS:HG3	1:13:A:ARG:HE	2	18.82
(1,124)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HE	5	18.8
(1,234)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG2	16	18.75
(1,96)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG2	16	18.75
(1,143)	1:1:A:ILE:HG21	1:12:A:ARG:HE	15	18.74
(1,143)	1:1:A:ILE:HG22	1:12:A:ARG:HE	15	18.74
(1,143)	1:1:A:ILE:HG23	1:12:A:ARG:HE	15	18.74
(1,126)	1:5:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:H	14	18.72
(1,113)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD2	4	18.71
(1,113)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD3	4	18.71
(1,230)	1:6:A:TRP:HB2	1:13:A:ARG:HG2	11	18.7
(1,273)	1:5:A:LYS:HB2	1:13:A:ARG:H	14	18.69
(1,273)	1:5:A:LYS:HB3	1:13:A:ARG:H	14	18.69

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,270)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	4	18.69
(1,116)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	4	18.69
(1,33)	1:5:A:LYS:HB2	1:13:A:ARG:H	14	18.69
(1,33)	1:5:A:LYS:HB3	1:13:A:ARG:H	14	18.69
(1,217)	1:1:A:ILE:HB	1:8:A:TRP:HB2	1	18.68
(1,124)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HE	1	18.68
(1,84)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD2	9	18.68
(1,84)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD3	9	18.68
(1,263)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HG2	12	18.67
(1,271)	1:4:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	17	18.66
(1,255)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	1	18.63
(1,99)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	1	18.63
(1,75)	1:5:A:LYS:HG2	1:13:A:ARG:HE	13	18.61
(1,75)	1:5:A:LYS:HG3	1:13:A:ARG:HE	13	18.61
(1,124)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HE	14	18.59
(1,255)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	20	18.57
(1,149)	1:4:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	16	18.57
(1,147)	1:6:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	9	18.57
(1,99)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	20	18.57
(1,149)	1:4:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	4	18.56
(1,238)	1:1:A:ILE:HB	1:13:A:ARG:HG2	3	18.54
(1,236)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HB2	18	18.53
(1,236)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HB3	18	18.53
(1,72)	1:7:A:LYS:HE2	1:13:A:ARG:HE	9	18.53
(1,72)	1:7:A:LYS:HE3	1:13:A:ARG:HE	9	18.53
(1,230)	1:6:A:TRP:HB2	1:13:A:ARG:HG2	5	18.48
(1,179)	1:3:A:PRO:HA	1:12:A:ARG:HD2	4	18.45
(1,179)	1:3:A:PRO:HA	1:12:A:ARG:HD3	4	18.45
(1,147)	1:6:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	16	18.45
(1,15)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HE	13	18.43
(1,234)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG2	13	18.4
(1,96)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG2	13	18.4
(1,255)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	7	18.39
(1,99)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	7	18.39
(1,271)	1:4:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	1	18.38
(1,311)	1:1:A:ILE:HD11	1:12:A:ARG:HA	5	18.36
(1,311)	1:1:A:ILE:HD12	1:12:A:ARG:HA	5	18.36
(1,311)	1:1:A:ILE:HD13	1:12:A:ARG:HA	5	18.36
(1,179)	1:3:A:PRO:HA	1:12:A:ARG:HD2	14	18.32
(1,179)	1:3:A:PRO:HA	1:12:A:ARG:HD3	14	18.32
(1,312)	1:1:A:ILE:HD11	1:7:A:LYS:HA	13	18.25
(1,312)	1:1:A:ILE:HD12	1:7:A:LYS:HA	13	18.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,312)	1:1:A:ILE:HD13	1:7:A:LYS:HA	13	18.25
(1,15)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HE	18	18.18
(1,4)	1:2:A:LEU:H	1:12:A:ARG:HA	15	18.18
(1,166)	1:5:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:HB2	14	18.16
(1,166)	1:5:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:HB3	14	18.16
(1,174)	1:5:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:H	12	18.15
(1,174)	1:5:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:H	12	18.15
(1,289)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HA	12	18.14
(1,289)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HA	12	18.14
(1,194)	1:7:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:HA	8	18.14
(1,194)	1:7:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:HA	8	18.14
(1,58)	1:5:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HD2	1	18.12
(1,58)	1:5:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HD3	1	18.12
(1,217)	1:1:A:ILE:HB	1:8:A:TRP:HB2	16	18.11
(1,315)	1:1:A:ILE:HD11	1:6:A:TRP:HB2	11	18.09
(1,315)	1:1:A:ILE:HD12	1:6:A:TRP:HB2	11	18.09
(1,315)	1:1:A:ILE:HD13	1:6:A:TRP:HB2	11	18.09
(1,311)	1:1:A:ILE:HD11	1:12:A:ARG:HA	1	18.09
(1,311)	1:1:A:ILE:HD12	1:12:A:ARG:HA	1	18.09
(1,311)	1:1:A:ILE:HD13	1:12:A:ARG:HA	1	18.09
(1,58)	1:5:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HD2	12	18.08
(1,58)	1:5:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HD3	12	18.08
(1,230)	1:6:A:TRP:HB2	1:13:A:ARG:HG2	12	18.06
(1,271)	1:4:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	4	18.05
(1,319)	1:1:A:ILE:HD11	1:7:A:LYS:HD2	18	18.04
(1,319)	1:1:A:ILE:HD11	1:7:A:LYS:HD3	18	18.04
(1,319)	1:1:A:ILE:HD12	1:7:A:LYS:HD2	18	18.04
(1,319)	1:1:A:ILE:HD12	1:7:A:LYS:HD3	18	18.04
(1,319)	1:1:A:ILE:HD13	1:7:A:LYS:HD2	18	18.04
(1,319)	1:1:A:ILE:HD13	1:7:A:LYS:HD3	18	18.04
(1,315)	1:1:A:ILE:HD11	1:6:A:TRP:HB2	12	18.04
(1,315)	1:1:A:ILE:HD12	1:6:A:TRP:HB2	12	18.04
(1,315)	1:1:A:ILE:HD13	1:6:A:TRP:HB2	12	18.04
(1,270)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	18	18.04
(1,116)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	18	18.04
(1,143)	1:1:A:ILE:HG21	1:12:A:ARG:HE	1	18.02
(1,143)	1:1:A:ILE:HG22	1:12:A:ARG:HE	1	18.02
(1,143)	1:1:A:ILE:HG23	1:12:A:ARG:HE	1	18.02
(1,174)	1:5:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:H	20	18.0
(1,174)	1:5:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:H	20	18.0
(1,176)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HD2	10	17.99
(1,176)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HD3	10	17.99

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,236)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HB2	13	17.96
(1,236)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HB3	13	17.96
(1,58)	1:5:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HD2	19	17.93
(1,58)	1:5:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HD3	19	17.93
(1,312)	1:1:A:ILE:HD11	1:7:A:LYS:HA	18	17.92
(1,312)	1:1:A:ILE:HD12	1:7:A:LYS:HA	18	17.92
(1,312)	1:1:A:ILE:HD13	1:7:A:LYS:HA	18	17.92
(1,55)	1:5:A:LYS:H	1:11:A:TRP:HB2	14	17.91
(1,55)	1:5:A:LYS:H	1:11:A:TRP:HB3	14	17.91
(1,271)	1:4:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	18	17.9
(1,173)	1:8:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HD2	8	17.9
(1,173)	1:8:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HD3	8	17.9
(1,194)	1:7:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:HA	7	17.87
(1,194)	1:7:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:HA	7	17.87
(1,310)	1:2:A:LEU:HD11	1:12:A:ARG:HA	8	17.86
(1,310)	1:2:A:LEU:HD12	1:12:A:ARG:HA	8	17.86
(1,310)	1:2:A:LEU:HD13	1:12:A:ARG:HA	8	17.86
(1,310)	1:2:A:LEU:HD21	1:12:A:ARG:HA	8	17.86
(1,310)	1:2:A:LEU:HD22	1:12:A:ARG:HA	8	17.86
(1,310)	1:2:A:LEU:HD23	1:12:A:ARG:HA	8	17.86
(1,263)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HG2	20	17.86
(1,255)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	10	17.86
(1,99)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	10	17.86
(1,208)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HA	3	17.83
(1,208)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HA	15	17.82
(1,208)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HA	12	17.81
(1,147)	1:6:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	18	17.81
(1,312)	1:1:A:ILE:HD11	1:7:A:LYS:HA	16	17.8
(1,312)	1:1:A:ILE:HD12	1:7:A:LYS:HA	16	17.8
(1,312)	1:1:A:ILE:HD13	1:7:A:LYS:HA	16	17.8
(1,230)	1:6:A:TRP:HB2	1:13:A:ARG:HG2	18	17.79
(1,230)	1:6:A:TRP:HB2	1:13:A:ARG:HG2	20	17.79
(1,4)	1:2:A:LEU:H	1:12:A:ARG:HA	3	17.79
(1,58)	1:5:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HD2	4	17.78
(1,58)	1:5:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HD3	4	17.78
(1,234)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG2	20	17.77
(1,96)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG2	20	17.77
(1,263)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HG2	1	17.75
(1,263)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HG2	13	17.73
(1,256)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	10	17.72
(1,251)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	10	17.72
(1,100)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	10	17.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,236)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HB2	16	17.67
(1,236)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HB3	16	17.67
(1,208)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HA	11	17.66
(1,124)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HE	8	17.66
(1,263)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HG2	19	17.64
(1,270)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	15	17.62
(1,116)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	15	17.62
(1,208)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HA	8	17.61
(1,217)	1:1:A:ILE:HB	1:8:A:TRP:HB2	4	17.6
(1,179)	1:3:A:PRO:HA	1:12:A:ARG:HD2	1	17.6
(1,179)	1:3:A:PRO:HA	1:12:A:ARG:HD3	1	17.6
(1,4)	1:2:A:LEU:H	1:12:A:ARG:HA	17	17.59
(1,149)	1:4:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	1	17.58
(1,149)	1:4:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	14	17.57
(1,58)	1:5:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HD2	10	17.57
(1,58)	1:5:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HD3	10	17.57
(1,270)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	5	17.49
(1,116)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	5	17.49
(1,315)	1:1:A:ILE:HD11	1:6:A:TRP:HB2	13	17.47
(1,315)	1:1:A:ILE:HD12	1:6:A:TRP:HB2	13	17.47
(1,315)	1:1:A:ILE:HD13	1:6:A:TRP:HB2	13	17.47
(1,310)	1:2:A:LEU:HD11	1:12:A:ARG:HA	18	17.47
(1,310)	1:2:A:LEU:HD12	1:12:A:ARG:HA	18	17.47
(1,310)	1:2:A:LEU:HD13	1:12:A:ARG:HA	18	17.47
(1,310)	1:2:A:LEU:HD21	1:12:A:ARG:HA	18	17.47
(1,310)	1:2:A:LEU:HD22	1:12:A:ARG:HA	18	17.47
(1,310)	1:2:A:LEU:HD23	1:12:A:ARG:HA	18	17.47
(1,255)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	11	17.46
(1,99)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	11	17.46
(1,149)	1:4:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	7	17.45
(1,234)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG2	1	17.43
(1,150)	1:8:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	13	17.43
(1,96)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG2	1	17.43
(1,174)	1:5:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:H	10	17.42
(1,174)	1:5:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:H	10	17.42
(1,236)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HB2	12	17.4
(1,236)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HB3	12	17.4
(1,147)	1:6:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	5	17.36
(1,147)	1:6:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	10	17.36
(1,234)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG2	17	17.35
(1,176)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HD2	13	17.35
(1,176)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HD3	13	17.35

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,96)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG2	17	17.35
(1,13)	1:2:A:LEU:H	1:7:A:LYS:HD2	18	17.34
(1,13)	1:2:A:LEU:H	1:7:A:LYS:HD3	18	17.34
(1,263)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HG2	5	17.33
(1,203)	1:1:A:ILE:HG21	1:7:A:LYS:HE2	3	17.33
(1,203)	1:1:A:ILE:HG21	1:7:A:LYS:HE3	3	17.33
(1,203)	1:1:A:ILE:HG22	1:7:A:LYS:HE2	3	17.33
(1,203)	1:1:A:ILE:HG22	1:7:A:LYS:HE3	3	17.33
(1,203)	1:1:A:ILE:HG23	1:7:A:LYS:HE2	3	17.33
(1,203)	1:1:A:ILE:HG23	1:7:A:LYS:HE3	3	17.33
(1,38)	1:7:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:H	7	17.29
(1,38)	1:7:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:H	7	17.29
(1,13)	1:2:A:LEU:H	1:7:A:LYS:HD2	3	17.29
(1,13)	1:2:A:LEU:H	1:7:A:LYS:HD3	3	17.29
(1,217)	1:1:A:ILE:HB	1:8:A:TRP:HB2	11	17.28
(1,176)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HD2	12	17.28
(1,176)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HD3	12	17.28
(1,124)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HE	18	17.27
(1,234)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG2	7	17.26
(1,96)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG2	7	17.26
(1,147)	1:6:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	1	17.25
(1,55)	1:5:A:LYS:H	1:11:A:TRP:HB2	20	17.23
(1,55)	1:5:A:LYS:H	1:11:A:TRP:HB3	20	17.23
(1,312)	1:1:A:ILE:HD11	1:7:A:LYS:HA	12	17.22
(1,312)	1:1:A:ILE:HD12	1:7:A:LYS:HA	12	17.22
(1,312)	1:1:A:ILE:HD13	1:7:A:LYS:HA	12	17.22
(1,176)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HD2	19	17.22
(1,176)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HD3	19	17.22
(1,176)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HD2	1	17.21
(1,176)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HD3	1	17.21
(1,270)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	14	17.18
(1,263)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HG2	4	17.18
(1,216)	1:4:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB2	9	17.18
(1,216)	1:4:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB3	9	17.18
(1,176)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HD2	4	17.18
(1,176)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HD3	4	17.18
(1,116)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	14	17.18
(1,310)	1:2:A:LEU:HD11	1:12:A:ARG:HA	5	17.15
(1,310)	1:2:A:LEU:HD12	1:12:A:ARG:HA	5	17.15
(1,310)	1:2:A:LEU:HD13	1:12:A:ARG:HA	5	17.15
(1,310)	1:2:A:LEU:HD21	1:12:A:ARG:HA	5	17.15
(1,310)	1:2:A:LEU:HD22	1:12:A:ARG:HA	5	17.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,310)	1:2:A:LEU:HD23	1:12:A:ARG:HA	5	17.15
(1,113)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD2	18	17.15
(1,113)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD3	18	17.15
(1,15)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HE	8	17.12
(1,264)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:HA	13	17.11
(1,264)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:HA	13	17.11
(1,179)	1:3:A:PRO:HA	1:12:A:ARG:HD2	15	17.08
(1,179)	1:3:A:PRO:HA	1:12:A:ARG:HD3	15	17.08
(1,75)	1:5:A:LYS:HG2	1:13:A:ARG:HE	6	17.05
(1,75)	1:5:A:LYS:HG3	1:13:A:ARG:HE	6	17.05
(1,3)	1:2:A:LEU:H	1:7:A:LYS:HA	15	17.04
(1,3)	1:2:A:LEU:H	1:7:A:LYS:HA	18	17.04
(1,208)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HA	10	17.03
(1,139)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HE	10	17.02
(1,139)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HE	10	17.02
(1,75)	1:5:A:LYS:HG2	1:13:A:ARG:HE	16	17.02
(1,75)	1:5:A:LYS:HG3	1:13:A:ARG:HE	16	17.02
(1,270)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	1	17.01
(1,208)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HA	17	17.01
(1,116)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	1	17.01
(1,72)	1:7:A:LYS:HE2	1:13:A:ARG:HE	12	17.01
(1,72)	1:7:A:LYS:HE3	1:13:A:ARG:HE	12	17.01
(1,127)	1:7:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HE	7	16.99
(1,311)	1:1:A:ILE:HD11	1:12:A:ARG:HA	17	16.98
(1,311)	1:1:A:ILE:HD12	1:12:A:ARG:HA	17	16.98
(1,311)	1:1:A:ILE:HD13	1:12:A:ARG:HA	17	16.98
(1,58)	1:5:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HD2	20	16.98
(1,58)	1:5:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HD3	20	16.98
(1,312)	1:1:A:ILE:HD11	1:7:A:LYS:HA	11	16.96
(1,312)	1:1:A:ILE:HD12	1:7:A:LYS:HA	11	16.96
(1,312)	1:1:A:ILE:HD13	1:7:A:LYS:HA	11	16.96
(1,289)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HA	10	16.96
(1,289)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HA	10	16.96
(1,15)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HE	7	16.93
(1,256)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	5	16.92
(1,251)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	5	16.92
(1,236)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HB2	8	16.92
(1,236)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HB3	8	16.92
(1,217)	1:1:A:ILE:HB	1:8:A:TRP:HB2	3	16.92
(1,100)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	5	16.92
(1,3)	1:2:A:LEU:H	1:7:A:LYS:HA	20	16.92
(1,234)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG2	11	16.87

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,96)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG2	11	16.87
(1,3)	1:2:A:LEU:H	1:7:A:LYS:HA	16	16.84
(1,203)	1:1:A:ILE:HG21	1:7:A:LYS:HE2	18	16.83
(1,203)	1:1:A:ILE:HG21	1:7:A:LYS:HE3	18	16.83
(1,203)	1:1:A:ILE:HG22	1:7:A:LYS:HE2	18	16.83
(1,203)	1:1:A:ILE:HG22	1:7:A:LYS:HE3	18	16.83
(1,203)	1:1:A:ILE:HG23	1:7:A:LYS:HE2	18	16.83
(1,203)	1:1:A:ILE:HG23	1:7:A:LYS:HE3	18	16.83
(1,122)	1:8:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HE	13	16.83
(1,208)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HA	19	16.82
(1,236)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HB2	19	16.81
(1,236)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HB3	19	16.81
(1,147)	1:6:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	4	16.8
(1,134)	1:8:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HE	19	16.8
(1,256)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	16	16.79
(1,251)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	16	16.79
(1,179)	1:3:A:PRO:HA	1:12:A:ARG:HD2	18	16.79
(1,179)	1:3:A:PRO:HA	1:12:A:ARG:HD3	18	16.79
(1,100)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	16	16.79
(1,256)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	8	16.78
(1,251)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	8	16.78
(1,100)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	8	16.78
(1,273)	1:5:A:LYS:HB2	1:13:A:ARG:H	16	16.77
(1,273)	1:5:A:LYS:HB3	1:13:A:ARG:H	16	16.77
(1,84)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD2	10	16.77
(1,84)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD3	10	16.77
(1,33)	1:5:A:LYS:HB2	1:13:A:ARG:H	16	16.77
(1,33)	1:5:A:LYS:HB3	1:13:A:ARG:H	16	16.77
(1,311)	1:1:A:ILE:HD11	1:12:A:ARG:HA	6	16.76
(1,311)	1:1:A:ILE:HD12	1:12:A:ARG:HA	6	16.76
(1,311)	1:1:A:ILE:HD13	1:12:A:ARG:HA	6	16.76
(1,264)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:HA	7	16.76
(1,264)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:HA	7	16.76
(1,230)	1:6:A:TRP:HB2	1:13:A:ARG:HG2	4	16.75
(1,113)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD2	1	16.74
(1,113)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD3	1	16.74
(1,84)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD2	8	16.73
(1,84)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD3	8	16.73
(1,55)	1:5:A:LYS:H	1:11:A:TRP:HB2	9	16.72
(1,55)	1:5:A:LYS:H	1:11:A:TRP:HB3	9	16.72
(1,15)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HE	5	16.72
(1,265)	1:2:A:LEU:HB3	1:7:A:LYS:HA	15	16.71

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,264)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:HA	8	16.71
(1,264)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:HA	8	16.71
(1,127)	1:7:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HE	3	16.71
(1,3)	1:2:A:LEU:H	1:7:A:LYS:HA	3	16.71
(1,15)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HE	19	16.69
(1,273)	1:5:A:LYS:HB2	1:13:A:ARG:H	8	16.68
(1,273)	1:5:A:LYS:HB3	1:13:A:ARG:H	8	16.68
(1,33)	1:5:A:LYS:HB2	1:13:A:ARG:H	8	16.68
(1,33)	1:5:A:LYS:HB3	1:13:A:ARG:H	8	16.68
(1,255)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	4	16.66
(1,99)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	4	16.66
(1,255)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	17	16.63
(1,234)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG2	10	16.63
(1,99)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	17	16.63
(1,96)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG2	10	16.63
(1,230)	1:6:A:TRP:HB2	1:13:A:ARG:HG2	14	16.62
(1,113)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD2	15	16.62
(1,113)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD3	15	16.62
(1,271)	1:4:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	2	16.6
(1,263)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HG2	8	16.6
(1,275)	1:5:A:LYS:HB2	1:11:A:TRP:H	14	16.57
(1,275)	1:5:A:LYS:HB3	1:11:A:TRP:H	14	16.57
(1,136)	1:5:A:LYS:HB2	1:11:A:TRP:H	14	16.57
(1,136)	1:5:A:LYS:HB3	1:11:A:TRP:H	14	16.57
(1,222)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:HB2	13	16.54
(1,222)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:HB3	13	16.54
(1,222)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:HB2	13	16.54
(1,222)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:HB3	13	16.54
(1,273)	1:5:A:LYS:HB2	1:13:A:ARG:H	10	16.52
(1,273)	1:5:A:LYS:HB3	1:13:A:ARG:H	10	16.52
(1,33)	1:5:A:LYS:HB2	1:13:A:ARG:H	10	16.52
(1,33)	1:5:A:LYS:HB3	1:13:A:ARG:H	10	16.52
(1,143)	1:1:A:ILE:HG21	1:12:A:ARG:HE	6	16.51
(1,143)	1:1:A:ILE:HG22	1:12:A:ARG:HE	6	16.51
(1,143)	1:1:A:ILE:HG23	1:12:A:ARG:HE	6	16.51
(1,203)	1:1:A:ILE:HG21	1:7:A:LYS:HE2	19	16.48
(1,203)	1:1:A:ILE:HG21	1:7:A:LYS:HE3	19	16.48
(1,203)	1:1:A:ILE:HG22	1:7:A:LYS:HE2	19	16.48
(1,203)	1:1:A:ILE:HG22	1:7:A:LYS:HE3	19	16.48
(1,203)	1:1:A:ILE:HG23	1:7:A:LYS:HE2	19	16.48
(1,203)	1:1:A:ILE:HG23	1:7:A:LYS:HE3	19	16.48
(1,299)	1:1:A:ILE:HG21	1:6:A:TRP:HB3	3	16.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,299)	1:1:A:ILE:HG22	1:6:A:TRP:HB3	3	16.47
(1,299)	1:1:A:ILE:HG23	1:6:A:TRP:HB3	3	16.47
(1,202)	1:1:A:ILE:HG21	1:6:A:TRP:HB3	3	16.47
(1,202)	1:1:A:ILE:HG22	1:6:A:TRP:HB3	3	16.47
(1,202)	1:1:A:ILE:HG23	1:6:A:TRP:HB3	3	16.47
(1,264)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:HA	18	16.46
(1,264)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:HA	18	16.46
(1,55)	1:5:A:LYS:H	1:11:A:TRP:HB2	12	16.46
(1,55)	1:5:A:LYS:H	1:11:A:TRP:HB3	12	16.46
(1,173)	1:8:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HD2	5	16.45
(1,173)	1:8:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HD3	5	16.45
(1,127)	1:7:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HE	12	16.45
(1,236)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HB2	3	16.43
(1,236)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HB3	3	16.43
(1,150)	1:8:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	19	16.41
(1,255)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	2	16.4
(1,166)	1:5:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:HB2	12	16.4
(1,166)	1:5:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:HB3	12	16.4
(1,99)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	2	16.4
(1,127)	1:7:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HE	10	16.39
(1,289)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HA	5	16.38
(1,289)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HA	5	16.38
(1,149)	1:4:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	15	16.38
(1,176)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HD2	8	16.36
(1,176)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HD3	8	16.36
(1,147)	1:6:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	11	16.36
(1,72)	1:7:A:LYS:HE2	1:13:A:ARG:HE	13	16.36
(1,72)	1:7:A:LYS:HE3	1:13:A:ARG:HE	13	16.36
(1,312)	1:1:A:ILE:HD11	1:7:A:LYS:HA	10	16.35
(1,312)	1:1:A:ILE:HD12	1:7:A:LYS:HA	10	16.35
(1,312)	1:1:A:ILE:HD13	1:7:A:LYS:HA	10	16.35
(1,173)	1:8:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HD2	18	16.35
(1,173)	1:8:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HD3	18	16.35
(1,310)	1:2:A:LEU:HD11	1:12:A:ARG:HA	10	16.34
(1,310)	1:2:A:LEU:HD12	1:12:A:ARG:HA	10	16.34
(1,310)	1:2:A:LEU:HD13	1:12:A:ARG:HA	10	16.34
(1,310)	1:2:A:LEU:HD21	1:12:A:ARG:HA	10	16.34
(1,310)	1:2:A:LEU:HD22	1:12:A:ARG:HA	10	16.34
(1,310)	1:2:A:LEU:HD23	1:12:A:ARG:HA	10	16.34
(1,124)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HE	20	16.34
(1,319)	1:1:A:ILE:HD11	1:7:A:LYS:HD2	16	16.32
(1,319)	1:1:A:ILE:HD11	1:7:A:LYS:HD3	16	16.32

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,319)	1:1:A:ILE:HD12	1:7:A:LYS:HD2	16	16.32
(1,319)	1:1:A:ILE:HD12	1:7:A:LYS:HD3	16	16.32
(1,319)	1:1:A:ILE:HD13	1:7:A:LYS:HD2	16	16.32
(1,319)	1:1:A:ILE:HD13	1:7:A:LYS:HD3	16	16.32
(1,281)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HE	10	16.31
(1,281)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HE	10	16.31
(1,273)	1:5:A:LYS:HB2	1:13:A:ARG:H	20	16.27
(1,273)	1:5:A:LYS:HB3	1:13:A:ARG:H	20	16.27
(1,263)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HG2	14	16.27
(1,33)	1:5:A:LYS:HB2	1:13:A:ARG:H	20	16.27
(1,33)	1:5:A:LYS:HB3	1:13:A:ARG:H	20	16.27
(1,174)	1:5:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:H	5	16.26
(1,174)	1:5:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:H	5	16.26
(1,216)	1:4:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB2	14	16.25
(1,216)	1:4:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB3	14	16.25
(1,216)	1:4:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB2	20	16.25
(1,216)	1:4:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB3	20	16.25
(1,126)	1:5:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:H	12	16.22
(1,72)	1:7:A:LYS:HE2	1:13:A:ARG:HE	11	16.2
(1,72)	1:7:A:LYS:HE3	1:13:A:ARG:HE	11	16.2
(1,58)	1:5:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HD2	8	16.18
(1,58)	1:5:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HD3	8	16.18
(1,24)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HG2	13	16.17
(1,311)	1:1:A:ILE:HD11	1:12:A:ARG:HA	3	16.16
(1,311)	1:1:A:ILE:HD12	1:12:A:ARG:HA	3	16.16
(1,311)	1:1:A:ILE:HD13	1:12:A:ARG:HA	3	16.16
(1,310)	1:2:A:LEU:HD11	1:12:A:ARG:HA	14	16.16
(1,310)	1:2:A:LEU:HD12	1:12:A:ARG:HA	14	16.16
(1,310)	1:2:A:LEU:HD13	1:12:A:ARG:HA	14	16.16
(1,310)	1:2:A:LEU:HD21	1:12:A:ARG:HA	14	16.16
(1,310)	1:2:A:LEU:HD22	1:12:A:ARG:HA	14	16.16
(1,310)	1:2:A:LEU:HD23	1:12:A:ARG:HA	14	16.16
(1,208)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HA	6	16.16
(1,234)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG2	4	16.15
(1,174)	1:5:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:H	13	16.15
(1,174)	1:5:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:H	13	16.15
(1,96)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG2	4	16.15
(1,256)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	12	16.14
(1,251)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	12	16.14
(1,100)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	12	16.14
(1,15)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HE	4	16.14
(1,166)	1:5:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:HB2	2	16.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,166)	1:5:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:HB3	2	16.12
(1,289)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HA	13	16.09
(1,289)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HA	13	16.09
(1,265)	1:2:A:LEU:HB3	1:7:A:LYS:HA	3	16.09
(1,176)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HD2	20	16.09
(1,176)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HD3	20	16.09
(1,81)	1:6:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HB2	14	16.09
(1,81)	1:6:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HB3	14	16.09
(1,248)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:H	7	16.08
(1,248)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:H	7	16.08
(1,55)	1:5:A:LYS:H	1:11:A:TRP:HB2	2	16.08
(1,55)	1:5:A:LYS:H	1:11:A:TRP:HB3	2	16.08
(1,48)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:H	7	16.08
(1,48)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:H	7	16.08
(1,222)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:HB2	7	16.07
(1,222)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:HB3	7	16.07
(1,222)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:HB2	7	16.07
(1,222)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:HB3	7	16.07
(1,194)	1:7:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:HA	12	16.07
(1,194)	1:7:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:HA	12	16.07
(1,217)	1:1:A:ILE:HB	1:8:A:TRP:HB2	2	16.06
(1,147)	1:6:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	12	16.06
(1,127)	1:7:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HE	8	16.06
(1,174)	1:5:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:H	19	16.03
(1,174)	1:5:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:H	19	16.03
(1,75)	1:5:A:LYS:HG2	1:13:A:ARG:HE	10	16.01
(1,75)	1:5:A:LYS:HG3	1:13:A:ARG:HE	10	16.01
(1,256)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	20	16.0
(1,251)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	20	16.0
(1,100)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	20	16.0
(1,255)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	18	15.99
(1,179)	1:3:A:PRO:HA	1:12:A:ARG:HD2	5	15.99
(1,179)	1:3:A:PRO:HA	1:12:A:ARG:HD3	5	15.99
(1,99)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	18	15.99
(1,315)	1:1:A:ILE:HD11	1:6:A:TRP:HB2	1	15.97
(1,315)	1:1:A:ILE:HD12	1:6:A:TRP:HB2	1	15.97
(1,315)	1:1:A:ILE:HD13	1:6:A:TRP:HB2	1	15.97
(1,256)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	13	15.97
(1,251)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	13	15.97
(1,127)	1:7:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HE	19	15.97
(1,100)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	13	15.97
(1,174)	1:5:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:H	14	15.95

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,174)	1:5:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:H	14	15.95
(1,234)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG2	18	15.94
(1,96)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG2	18	15.94
(1,310)	1:2:A:LEU:HD11	1:12:A:ARG:HA	6	15.92
(1,310)	1:2:A:LEU:HD12	1:12:A:ARG:HA	6	15.92
(1,310)	1:2:A:LEU:HD13	1:12:A:ARG:HA	6	15.92
(1,310)	1:2:A:LEU:HD21	1:12:A:ARG:HA	6	15.92
(1,310)	1:2:A:LEU:HD22	1:12:A:ARG:HA	6	15.92
(1,310)	1:2:A:LEU:HD23	1:12:A:ARG:HA	6	15.92
(1,216)	1:4:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB2	18	15.92
(1,216)	1:4:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB3	18	15.92
(1,150)	1:8:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	3	15.92
(1,113)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD2	16	15.92
(1,113)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD3	16	15.92
(1,256)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	1	15.9
(1,251)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	1	15.9
(1,100)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	1	15.9
(1,20)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:H	8	15.9
(1,3)	1:2:A:LEU:H	1:7:A:LYS:HA	13	15.9
(1,312)	1:1:A:ILE:HD11	1:7:A:LYS:HA	20	15.89
(1,312)	1:1:A:ILE:HD12	1:7:A:LYS:HA	20	15.89
(1,312)	1:1:A:ILE:HD13	1:7:A:LYS:HA	20	15.89
(1,208)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HA	14	15.89
(1,127)	1:7:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HE	5	15.89
(1,319)	1:1:A:ILE:HD11	1:7:A:LYS:HD2	13	15.85
(1,319)	1:1:A:ILE:HD11	1:7:A:LYS:HD3	13	15.85
(1,319)	1:1:A:ILE:HD12	1:7:A:LYS:HD2	13	15.85
(1,319)	1:1:A:ILE:HD12	1:7:A:LYS:HD3	13	15.85
(1,319)	1:1:A:ILE:HD13	1:7:A:LYS:HD2	13	15.85
(1,319)	1:1:A:ILE:HD13	1:7:A:LYS:HD3	13	15.85
(1,15)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HE	10	15.85
(1,3)	1:2:A:LEU:H	1:7:A:LYS:HA	12	15.85
(1,299)	1:1:A:ILE:HG21	1:6:A:TRP:HB3	20	15.84
(1,299)	1:1:A:ILE:HG22	1:6:A:TRP:HB3	20	15.84
(1,299)	1:1:A:ILE:HG23	1:6:A:TRP:HB3	20	15.84
(1,202)	1:1:A:ILE:HG21	1:6:A:TRP:HB3	20	15.84
(1,202)	1:1:A:ILE:HG22	1:6:A:TRP:HB3	20	15.84
(1,202)	1:1:A:ILE:HG23	1:6:A:TRP:HB3	20	15.84
(1,13)	1:2:A:LEU:H	1:7:A:LYS:HD2	16	15.81
(1,13)	1:2:A:LEU:H	1:7:A:LYS:HD3	16	15.81
(1,134)	1:8:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HE	18	15.8
(1,289)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HA	8	15.79

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,289)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HA	8	15.79
(1,238)	1:1:A:ILE:HB	1:13:A:ARG:HG2	15	15.79
(1,150)	1:8:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	18	15.79
(1,216)	1:4:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB2	13	15.78
(1,216)	1:4:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB3	13	15.78
(1,173)	1:8:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HD2	9	15.78
(1,173)	1:8:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HD3	9	15.78
(1,265)	1:2:A:LEU:HB3	1:7:A:LYS:HA	16	15.76
(1,147)	1:6:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	13	15.76
(1,122)	1:8:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HE	10	15.74
(1,289)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HA	20	15.73
(1,289)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HA	20	15.73
(1,265)	1:2:A:LEU:HB3	1:7:A:LYS:HA	6	15.73
(1,265)	1:2:A:LEU:HB3	1:7:A:LYS:HA	20	15.73
(1,234)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG2	2	15.73
(1,134)	1:8:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HE	13	15.73
(1,96)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG2	2	15.73
(1,127)	1:7:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HE	18	15.72
(1,319)	1:1:A:ILE:HD11	1:7:A:LYS:HD2	11	15.69
(1,319)	1:1:A:ILE:HD11	1:7:A:LYS:HD3	11	15.69
(1,319)	1:1:A:ILE:HD12	1:7:A:LYS:HD2	11	15.69
(1,319)	1:1:A:ILE:HD12	1:7:A:LYS:HD3	11	15.69
(1,319)	1:1:A:ILE:HD13	1:7:A:LYS:HD2	11	15.69
(1,319)	1:1:A:ILE:HD13	1:7:A:LYS:HD3	11	15.69
(1,315)	1:1:A:ILE:HD11	1:6:A:TRP:HB2	18	15.69
(1,315)	1:1:A:ILE:HD12	1:6:A:TRP:HB2	18	15.69
(1,315)	1:1:A:ILE:HD13	1:6:A:TRP:HB2	18	15.69
(1,24)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HG2	8	15.69
(1,84)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD2	13	15.68
(1,84)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD3	13	15.68
(1,38)	1:7:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:H	8	15.66
(1,38)	1:7:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:H	8	15.66
(1,289)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HA	2	15.65
(1,289)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HA	2	15.65
(1,315)	1:1:A:ILE:HD11	1:6:A:TRP:HB2	16	15.64
(1,315)	1:1:A:ILE:HD12	1:6:A:TRP:HB2	16	15.64
(1,315)	1:1:A:ILE:HD13	1:6:A:TRP:HB2	16	15.64
(1,310)	1:2:A:LEU:HD11	1:12:A:ARG:HA	19	15.62
(1,310)	1:2:A:LEU:HD12	1:12:A:ARG:HA	19	15.62
(1,310)	1:2:A:LEU:HD13	1:12:A:ARG:HA	19	15.62
(1,310)	1:2:A:LEU:HD21	1:12:A:ARG:HA	19	15.62
(1,310)	1:2:A:LEU:HD22	1:12:A:ARG:HA	19	15.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,310)	1:2:A:LEU:HD23	1:12:A:ARG:HA	19	15.62
(1,222)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:HB2	18	15.62
(1,222)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:HB3	18	15.62
(1,222)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:HB2	18	15.62
(1,222)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:HB3	18	15.62
(1,24)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HG2	5	15.62
(1,273)	1:5:A:LYS:HB2	1:13:A:ARG:H	13	15.61
(1,273)	1:5:A:LYS:HB3	1:13:A:ARG:H	13	15.61
(1,194)	1:7:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:HA	18	15.61
(1,194)	1:7:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:HA	18	15.61
(1,33)	1:5:A:LYS:HB2	1:13:A:ARG:H	13	15.61
(1,33)	1:5:A:LYS:HB3	1:13:A:ARG:H	13	15.61
(1,166)	1:5:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:HB2	20	15.6
(1,166)	1:5:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:HB3	20	15.6
(1,38)	1:7:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:H	6	15.6
(1,38)	1:7:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:H	6	15.6
(1,15)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HE	12	15.6
(1,194)	1:7:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:HA	13	15.58
(1,194)	1:7:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:HA	13	15.58
(1,179)	1:3:A:PRO:HA	1:12:A:ARG:HD2	16	15.56
(1,179)	1:3:A:PRO:HA	1:12:A:ARG:HD3	16	15.56
(1,150)	1:8:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	10	15.56
(1,75)	1:5:A:LYS:HG2	1:13:A:ARG:HE	11	15.53
(1,75)	1:5:A:LYS:HG3	1:13:A:ARG:HE	11	15.53
(1,22)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HB2	8	15.53
(1,22)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HB3	8	15.53
(1,283)	1:5:A:LYS:HG2	1:11:A:TRP:H	2	15.52
(1,283)	1:5:A:LYS:HG3	1:11:A:TRP:H	2	15.52
(1,147)	1:6:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	19	15.52
(1,142)	1:5:A:LYS:HG2	1:11:A:TRP:H	2	15.52
(1,142)	1:5:A:LYS:HG3	1:11:A:TRP:H	2	15.52
(1,126)	1:5:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:H	9	15.51
(1,248)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:H	13	15.5
(1,248)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:H	13	15.5
(1,48)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:H	13	15.5
(1,48)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:H	13	15.5
(1,166)	1:5:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:HB2	9	15.47
(1,166)	1:5:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:HB3	9	15.47
(1,84)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD2	1	15.46
(1,84)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD3	1	15.46
(1,270)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	7	15.45
(1,236)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HB2	15	15.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,236)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HB3	15	15.45
(1,116)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	7	15.45
(1,55)	1:5:A:LYS:H	1:11:A:TRP:HB2	13	15.44
(1,55)	1:5:A:LYS:H	1:11:A:TRP:HB3	13	15.44
(1,242)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HD2	18	15.43
(1,242)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HD3	18	15.43
(1,209)	1:5:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB2	14	15.42
(1,209)	1:5:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB3	14	15.42
(1,319)	1:1:A:ILE:HD11	1:7:A:LYS:HD2	12	15.41
(1,319)	1:1:A:ILE:HD11	1:7:A:LYS:HD3	12	15.41
(1,319)	1:1:A:ILE:HD12	1:7:A:LYS:HD2	12	15.41
(1,319)	1:1:A:ILE:HD12	1:7:A:LYS:HD3	12	15.41
(1,319)	1:1:A:ILE:HD13	1:7:A:LYS:HD2	12	15.41
(1,319)	1:1:A:ILE:HD13	1:7:A:LYS:HD3	12	15.41
(1,84)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD2	4	15.41
(1,84)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD3	4	15.41
(1,263)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HG2	16	15.39
(1,131)	1:7:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:HE	13	15.36
(1,131)	1:7:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:HE	13	15.36
(1,312)	1:1:A:ILE:HD11	1:7:A:LYS:HA	14	15.35
(1,312)	1:1:A:ILE:HD12	1:7:A:LYS:HA	14	15.35
(1,312)	1:1:A:ILE:HD13	1:7:A:LYS:HA	14	15.35
(1,256)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	19	15.35
(1,251)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	19	15.35
(1,100)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	19	15.35
(1,283)	1:5:A:LYS:HG2	1:11:A:TRP:H	14	15.34
(1,283)	1:5:A:LYS:HG3	1:11:A:TRP:H	14	15.34
(1,142)	1:5:A:LYS:HG2	1:11:A:TRP:H	14	15.34
(1,142)	1:5:A:LYS:HG3	1:11:A:TRP:H	14	15.34
(1,134)	1:8:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HE	10	15.34
(1,283)	1:5:A:LYS:HG2	1:11:A:TRP:H	9	15.33
(1,283)	1:5:A:LYS:HG3	1:11:A:TRP:H	9	15.33
(1,142)	1:5:A:LYS:HG2	1:11:A:TRP:H	9	15.33
(1,142)	1:5:A:LYS:HG3	1:11:A:TRP:H	9	15.33
(1,319)	1:1:A:ILE:HD11	1:7:A:LYS:HD2	3	15.32
(1,319)	1:1:A:ILE:HD11	1:7:A:LYS:HD3	3	15.32
(1,319)	1:1:A:ILE:HD12	1:7:A:LYS:HD2	3	15.32
(1,319)	1:1:A:ILE:HD12	1:7:A:LYS:HD3	3	15.32
(1,319)	1:1:A:ILE:HD13	1:7:A:LYS:HD2	3	15.32
(1,319)	1:1:A:ILE:HD13	1:7:A:LYS:HD3	3	15.32
(1,315)	1:1:A:ILE:HD11	1:6:A:TRP:HB2	4	15.32
(1,315)	1:1:A:ILE:HD12	1:6:A:TRP:HB2	4	15.32

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,315)	1:1:A:ILE:HD13	1:6:A:TRP:HB2	4	15.32
(1,238)	1:1:A:ILE:HB	1:13:A:ARG:HG2	2	15.32
(1,173)	1:8:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HD2	12	15.31
(1,173)	1:8:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HD3	12	15.31
(1,113)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD2	14	15.29
(1,113)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD3	14	15.29
(1,310)	1:2:A:LEU:HD11	1:12:A:ARG:HA	7	15.28
(1,310)	1:2:A:LEU:HD12	1:12:A:ARG:HA	7	15.28
(1,310)	1:2:A:LEU:HD13	1:12:A:ARG:HA	7	15.28
(1,310)	1:2:A:LEU:HD21	1:12:A:ARG:HA	7	15.28
(1,310)	1:2:A:LEU:HD22	1:12:A:ARG:HA	7	15.28
(1,310)	1:2:A:LEU:HD23	1:12:A:ARG:HA	7	15.28
(1,273)	1:5:A:LYS:HB2	1:13:A:ARG:H	2	15.28
(1,273)	1:5:A:LYS:HB3	1:13:A:ARG:H	2	15.28
(1,33)	1:5:A:LYS:HB2	1:13:A:ARG:H	2	15.28
(1,33)	1:5:A:LYS:HB3	1:13:A:ARG:H	2	15.28
(1,113)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD2	5	15.27
(1,113)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD3	5	15.27
(1,122)	1:8:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HE	7	15.26
(1,299)	1:1:A:ILE:HG21	1:6:A:TRP:HB3	19	15.25
(1,299)	1:1:A:ILE:HG22	1:6:A:TRP:HB3	19	15.25
(1,299)	1:1:A:ILE:HG23	1:6:A:TRP:HB3	19	15.25
(1,202)	1:1:A:ILE:HG21	1:6:A:TRP:HB3	19	15.25
(1,202)	1:1:A:ILE:HG22	1:6:A:TRP:HB3	19	15.25
(1,202)	1:1:A:ILE:HG23	1:6:A:TRP:HB3	19	15.25
(1,22)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HB2	7	15.25
(1,22)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HB3	7	15.25
(1,72)	1:7:A:LYS:HE2	1:13:A:ARG:HE	1	15.24
(1,72)	1:7:A:LYS:HE3	1:13:A:ARG:HE	1	15.24
(1,310)	1:2:A:LEU:HD11	1:12:A:ARG:HA	4	15.23
(1,310)	1:2:A:LEU:HD12	1:12:A:ARG:HA	4	15.23
(1,310)	1:2:A:LEU:HD13	1:12:A:ARG:HA	4	15.23
(1,310)	1:2:A:LEU:HD21	1:12:A:ARG:HA	4	15.23
(1,310)	1:2:A:LEU:HD22	1:12:A:ARG:HA	4	15.23
(1,310)	1:2:A:LEU:HD23	1:12:A:ARG:HA	4	15.23
(1,126)	1:5:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:H	20	15.23
(1,124)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HE	16	15.22
(1,22)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HB2	9	15.22
(1,22)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HB3	9	15.22
(1,312)	1:1:A:ILE:HD11	1:7:A:LYS:HA	3	15.21
(1,312)	1:1:A:ILE:HD12	1:7:A:LYS:HA	3	15.21
(1,312)	1:1:A:ILE:HD13	1:7:A:LYS:HA	3	15.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,289)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HA	14	15.21
(1,289)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HA	14	15.21
(1,230)	1:6:A:TRP:HB2	1:13:A:ARG:HG2	13	15.21
(1,216)	1:4:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB2	8	15.21
(1,216)	1:4:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB3	8	15.21
(1,122)	1:8:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HE	12	15.21
(1,122)	1:8:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HE	19	15.2
(1,236)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HB2	11	15.19
(1,236)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HB3	11	15.19
(1,22)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HB2	18	15.18
(1,22)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HB3	18	15.18
(1,179)	1:3:A:PRO:HA	1:12:A:ARG:HD2	7	15.16
(1,179)	1:3:A:PRO:HA	1:12:A:ARG:HD3	7	15.16
(1,147)	1:6:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	17	15.16
(1,256)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	4	15.15
(1,251)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	4	15.15
(1,139)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HE	1	15.15
(1,139)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HE	1	15.15
(1,100)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	4	15.15
(1,84)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD2	19	15.14
(1,84)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD3	19	15.14
(1,256)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	7	15.13
(1,251)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	7	15.13
(1,131)	1:7:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:HE	7	15.13
(1,131)	1:7:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:HE	7	15.13
(1,100)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	7	15.13
(1,75)	1:5:A:LYS:HG2	1:13:A:ARG:HE	7	15.12
(1,75)	1:5:A:LYS:HG3	1:13:A:ARG:HE	7	15.12
(1,146)	1:6:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:H	8	15.11
(1,194)	1:7:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:HA	20	15.09
(1,194)	1:7:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:HA	20	15.09
(1,55)	1:5:A:LYS:H	1:11:A:TRP:HB2	16	15.09
(1,55)	1:5:A:LYS:H	1:11:A:TRP:HB3	16	15.09
(1,216)	1:4:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB2	17	15.08
(1,216)	1:4:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB3	17	15.08
(1,143)	1:1:A:ILE:HG21	1:12:A:ARG:HE	3	15.08
(1,143)	1:1:A:ILE:HG22	1:12:A:ARG:HE	3	15.08
(1,143)	1:1:A:ILE:HG23	1:12:A:ARG:HE	3	15.08
(1,58)	1:5:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HD2	18	15.07
(1,58)	1:5:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HD3	18	15.07
(1,312)	1:1:A:ILE:HD11	1:7:A:LYS:HA	19	15.04
(1,312)	1:1:A:ILE:HD12	1:7:A:LYS:HA	19	15.04

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,312)	1:1:A:ILE:HD13	1:7:A:LYS:HA	19	15.04
(1,283)	1:5:A:LYS:HG2	1:11:A:TRP:H	1	15.04
(1,283)	1:5:A:LYS:HG3	1:11:A:TRP:H	1	15.04
(1,142)	1:5:A:LYS:HG2	1:11:A:TRP:H	1	15.04
(1,142)	1:5:A:LYS:HG3	1:11:A:TRP:H	1	15.04
(1,84)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD2	12	15.04
(1,84)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD3	12	15.04
(1,236)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HB2	10	15.03
(1,236)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HB3	10	15.03
(1,139)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HE	9	15.03
(1,139)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HE	9	15.03
(1,147)	1:6:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	20	15.02
(1,3)	1:2:A:LEU:H	1:7:A:LYS:HA	6	15.02
(1,264)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:HA	9	15.01
(1,264)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:HA	9	15.01
(1,248)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:H	18	15.01
(1,248)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:H	18	15.01
(1,48)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:H	18	15.01
(1,48)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:H	18	15.01
(1,22)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HB2	20	15.01
(1,22)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HB3	20	15.01
(1,146)	1:6:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:H	17	15.0
(1,126)	1:5:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:H	2	14.98
(1,264)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:HA	20	14.96
(1,264)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:HA	20	14.96
(1,72)	1:7:A:LYS:HE2	1:13:A:ARG:HE	4	14.96
(1,72)	1:7:A:LYS:HE3	1:13:A:ARG:HE	4	14.96
(1,15)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HE	16	14.95
(1,134)	1:8:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HE	3	14.94
(1,58)	1:5:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HD2	16	14.94
(1,58)	1:5:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HD3	16	14.94
(1,139)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HE	12	14.93
(1,139)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HE	12	14.93
(1,24)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HG2	9	14.91
(1,248)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:H	6	14.88
(1,248)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:H	6	14.88
(1,176)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HD2	5	14.88
(1,176)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HD3	5	14.88
(1,48)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:H	6	14.88
(1,48)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:H	6	14.88
(1,22)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HB2	16	14.87
(1,22)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HB3	16	14.87

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,20)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:H	20	14.86
(1,3)	1:2:A:LEU:H	1:7:A:LYS:HA	11	14.86
(1,315)	1:1:A:ILE:HD11	1:6:A:TRP:HB2	14	14.85
(1,315)	1:1:A:ILE:HD12	1:6:A:TRP:HB2	14	14.85
(1,315)	1:1:A:ILE:HD13	1:6:A:TRP:HB2	14	14.85
(1,58)	1:5:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HD2	14	14.84
(1,58)	1:5:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HD3	14	14.84
(1,273)	1:5:A:LYS:HB2	1:13:A:ARG:H	5	14.83
(1,273)	1:5:A:LYS:HB3	1:13:A:ARG:H	5	14.83
(1,33)	1:5:A:LYS:HB2	1:13:A:ARG:H	5	14.83
(1,33)	1:5:A:LYS:HB3	1:13:A:ARG:H	5	14.83
(1,315)	1:1:A:ILE:HD11	1:6:A:TRP:HB2	20	14.81
(1,315)	1:1:A:ILE:HD12	1:6:A:TRP:HB2	20	14.81
(1,315)	1:1:A:ILE:HD13	1:6:A:TRP:HB2	20	14.81
(1,81)	1:6:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HB2	9	14.81
(1,81)	1:6:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HB3	9	14.81
(1,194)	1:7:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:HA	6	14.8
(1,194)	1:7:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:HA	6	14.8
(1,127)	1:7:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HE	16	14.8
(1,13)	1:2:A:LEU:H	1:7:A:LYS:HD2	19	14.8
(1,13)	1:2:A:LEU:H	1:7:A:LYS:HD3	19	14.8
(1,234)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG2	6	14.79
(1,150)	1:8:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	7	14.79
(1,135)	1:5:A:LYS:HB2	1:12:A:ARG:HE	10	14.79
(1,135)	1:5:A:LYS:HB3	1:12:A:ARG:HE	10	14.79
(1,96)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG2	6	14.79
(1,35)	1:7:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:H	7	14.79
(1,35)	1:7:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:H	7	14.79
(1,20)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:H	7	14.79
(1,3)	1:2:A:LEU:H	1:7:A:LYS:HA	19	14.79
(1,312)	1:1:A:ILE:HD11	1:7:A:LYS:HA	17	14.78
(1,312)	1:1:A:ILE:HD12	1:7:A:LYS:HA	17	14.78
(1,312)	1:1:A:ILE:HD13	1:7:A:LYS:HA	17	14.78
(1,299)	1:1:A:ILE:HG21	1:6:A:TRP:HB3	5	14.78
(1,299)	1:1:A:ILE:HG22	1:6:A:TRP:HB3	5	14.78
(1,299)	1:1:A:ILE:HG23	1:6:A:TRP:HB3	5	14.78
(1,271)	1:4:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	11	14.78
(1,202)	1:1:A:ILE:HG21	1:6:A:TRP:HB3	5	14.78
(1,202)	1:1:A:ILE:HG22	1:6:A:TRP:HB3	5	14.78
(1,202)	1:1:A:ILE:HG23	1:6:A:TRP:HB3	5	14.78
(1,319)	1:1:A:ILE:HD11	1:7:A:LYS:HD2	19	14.77
(1,319)	1:1:A:ILE:HD11	1:7:A:LYS:HD3	19	14.77

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,319)	1:1:A:ILE:HD12	1:7:A:LYS:HD2	19	14.77
(1,319)	1:1:A:ILE:HD12	1:7:A:LYS:HD3	19	14.77
(1,319)	1:1:A:ILE:HD13	1:7:A:LYS:HD2	19	14.77
(1,319)	1:1:A:ILE:HD13	1:7:A:LYS:HD3	19	14.77
(1,289)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HA	19	14.77
(1,289)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HA	19	14.77
(1,173)	1:8:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HD2	13	14.77
(1,173)	1:8:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HD3	13	14.77
(1,3)	1:2:A:LEU:H	1:7:A:LYS:HA	10	14.77
(1,24)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HG2	16	14.76
(1,255)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	6	14.74
(1,146)	1:6:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:H	7	14.74
(1,99)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	6	14.74
(1,13)	1:2:A:LEU:H	1:7:A:LYS:HD2	20	14.74
(1,13)	1:2:A:LEU:H	1:7:A:LYS:HD3	20	14.74
(1,20)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:H	16	14.73
(1,265)	1:2:A:LEU:HB3	1:7:A:LYS:HA	18	14.71
(1,124)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HE	7	14.71
(1,150)	1:8:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	16	14.7
(1,146)	1:6:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:H	11	14.7
(1,150)	1:8:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	12	14.68
(1,24)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HG2	7	14.68
(1,263)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HG2	2	14.67
(1,84)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD2	20	14.65
(1,84)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD3	20	14.65
(1,108)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE2	18	14.64
(1,108)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE3	18	14.64
(1,24)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HG2	18	14.64
(1,173)	1:8:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HD2	1	14.61
(1,173)	1:8:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HD3	1	14.61
(1,55)	1:5:A:LYS:H	1:11:A:TRP:HB2	4	14.61
(1,55)	1:5:A:LYS:H	1:11:A:TRP:HB3	4	14.61
(1,299)	1:1:A:ILE:HG21	1:6:A:TRP:HB3	16	14.6
(1,299)	1:1:A:ILE:HG22	1:6:A:TRP:HB3	16	14.6
(1,299)	1:1:A:ILE:HG23	1:6:A:TRP:HB3	16	14.6
(1,202)	1:1:A:ILE:HG21	1:6:A:TRP:HB3	16	14.6
(1,202)	1:1:A:ILE:HG22	1:6:A:TRP:HB3	16	14.6
(1,202)	1:1:A:ILE:HG23	1:6:A:TRP:HB3	16	14.6
(1,135)	1:5:A:LYS:HB2	1:12:A:ARG:HE	12	14.6
(1,135)	1:5:A:LYS:HB3	1:12:A:ARG:HE	12	14.6
(1,81)	1:6:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HB2	2	14.6
(1,81)	1:6:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HB3	2	14.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,22)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HB2	13	14.6
(1,22)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HB3	13	14.6
(1,312)	1:1:A:ILE:HD11	1:7:A:LYS:HA	15	14.58
(1,312)	1:1:A:ILE:HD12	1:7:A:LYS:HA	15	14.58
(1,312)	1:1:A:ILE:HD13	1:7:A:LYS:HA	15	14.58
(1,275)	1:5:A:LYS:HB2	1:11:A:TRP:H	1	14.57
(1,275)	1:5:A:LYS:HB3	1:11:A:TRP:H	1	14.57
(1,136)	1:5:A:LYS:HB2	1:11:A:TRP:H	1	14.57
(1,136)	1:5:A:LYS:HB3	1:11:A:TRP:H	1	14.57
(1,256)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	14	14.56
(1,251)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	14	14.56
(1,100)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	14	14.56
(1,265)	1:2:A:LEU:HB3	1:7:A:LYS:HA	13	14.55
(1,58)	1:5:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HD2	15	14.55
(1,58)	1:5:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HD3	15	14.55
(1,55)	1:5:A:LYS:H	1:11:A:TRP:HB2	8	14.55
(1,55)	1:5:A:LYS:H	1:11:A:TRP:HB3	8	14.55
(1,203)	1:1:A:ILE:HG21	1:7:A:LYS:HE2	20	14.54
(1,203)	1:1:A:ILE:HG21	1:7:A:LYS:HE3	20	14.54
(1,203)	1:1:A:ILE:HG22	1:7:A:LYS:HE2	20	14.54
(1,203)	1:1:A:ILE:HG22	1:7:A:LYS:HE3	20	14.54
(1,203)	1:1:A:ILE:HG23	1:7:A:LYS:HE2	20	14.54
(1,203)	1:1:A:ILE:HG23	1:7:A:LYS:HE3	20	14.54
(1,173)	1:8:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HD2	6	14.53
(1,173)	1:8:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HD3	6	14.53
(1,176)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HD2	14	14.51
(1,176)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HD3	14	14.51
(1,315)	1:1:A:ILE:HD11	1:6:A:TRP:HB2	10	14.5
(1,315)	1:1:A:ILE:HD12	1:6:A:TRP:HB2	10	14.5
(1,315)	1:1:A:ILE:HD13	1:6:A:TRP:HB2	10	14.5
(1,20)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:H	5	14.5
(1,15)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HE	3	14.5
(1,22)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HB2	5	14.48
(1,22)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HB3	5	14.48
(1,15)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HE	9	14.48
(1,315)	1:1:A:ILE:HD11	1:6:A:TRP:HB2	3	14.47
(1,315)	1:1:A:ILE:HD12	1:6:A:TRP:HB2	3	14.47
(1,315)	1:1:A:ILE:HD13	1:6:A:TRP:HB2	3	14.47
(1,134)	1:8:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HE	16	14.47
(1,209)	1:5:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB2	9	14.46
(1,209)	1:5:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB3	9	14.46
(1,173)	1:8:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HD2	16	14.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,173)	1:8:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HD3	16	14.46
(1,139)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HE	13	14.46
(1,139)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HE	13	14.46
(1,75)	1:5:A:LYS:HG2	1:13:A:ARG:HE	17	14.45
(1,75)	1:5:A:LYS:HG3	1:13:A:ARG:HE	17	14.45
(1,20)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:H	9	14.45
(1,281)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HE	1	14.44
(1,281)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HE	1	14.44
(1,166)	1:5:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:HB2	4	14.44
(1,166)	1:5:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:HB3	4	14.44
(1,211)	1:1:A:ILE:HB	1:6:A:TRP:HB2	11	14.43
(1,55)	1:5:A:LYS:H	1:11:A:TRP:HB2	19	14.42
(1,55)	1:5:A:LYS:H	1:11:A:TRP:HB3	19	14.42
(1,149)	1:4:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	17	14.39
(1,24)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HG2	4	14.39
(1,55)	1:5:A:LYS:H	1:11:A:TRP:HB2	1	14.38
(1,55)	1:5:A:LYS:H	1:11:A:TRP:HB3	1	14.38
(1,55)	1:5:A:LYS:H	1:11:A:TRP:HB2	17	14.38
(1,55)	1:5:A:LYS:H	1:11:A:TRP:HB3	17	14.38
(1,203)	1:1:A:ILE:HG21	1:7:A:LYS:HE2	16	14.37
(1,203)	1:1:A:ILE:HG21	1:7:A:LYS:HE3	16	14.37
(1,203)	1:1:A:ILE:HG22	1:7:A:LYS:HE2	16	14.37
(1,203)	1:1:A:ILE:HG22	1:7:A:LYS:HE3	16	14.37
(1,203)	1:1:A:ILE:HG23	1:7:A:LYS:HE2	16	14.37
(1,203)	1:1:A:ILE:HG23	1:7:A:LYS:HE3	16	14.37
(1,24)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HG2	19	14.37
(1,217)	1:1:A:ILE:HB	1:8:A:TRP:HB2	9	14.36
(1,81)	1:6:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HB2	12	14.35
(1,81)	1:6:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HB3	12	14.35
(1,58)	1:5:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HD2	3	14.34
(1,58)	1:5:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HD3	3	14.34
(1,281)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HE	9	14.32
(1,281)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HE	9	14.32
(1,194)	1:7:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:HA	5	14.32
(1,194)	1:7:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:HA	5	14.32
(1,124)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HE	2	14.32
(1,55)	1:5:A:LYS:H	1:11:A:TRP:HB2	10	14.32
(1,55)	1:5:A:LYS:H	1:11:A:TRP:HB3	10	14.32
(1,264)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:HA	6	14.31
(1,264)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:HA	6	14.31
(1,248)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:H	8	14.31
(1,248)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:H	8	14.31

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,48)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:H	8	14.31
(1,48)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:H	8	14.31
(1,230)	1:6:A:TRP:HB2	1:13:A:ARG:HG2	2	14.29
(1,209)	1:5:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB2	12	14.29
(1,209)	1:5:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB3	12	14.29
(1,38)	1:7:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:H	18	14.29
(1,38)	1:7:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:H	18	14.29
(1,236)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HB2	6	14.28
(1,236)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HB3	6	14.28
(1,225)	1:7:A:LYS:HB2	1:12:A:ARG:H	7	14.28
(1,225)	1:7:A:LYS:HB3	1:12:A:ARG:H	7	14.28
(1,265)	1:2:A:LEU:HB3	1:7:A:LYS:HA	11	14.27
(1,135)	1:5:A:LYS:HB2	1:12:A:ARG:HE	13	14.27
(1,135)	1:5:A:LYS:HB3	1:12:A:ARG:HE	13	14.27
(1,126)	1:5:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:H	13	14.27
(1,3)	1:2:A:LEU:H	1:7:A:LYS:HA	17	14.27
(1,312)	1:1:A:ILE:HD11	1:7:A:LYS:HA	6	14.26
(1,312)	1:1:A:ILE:HD12	1:7:A:LYS:HA	6	14.26
(1,312)	1:1:A:ILE:HD13	1:7:A:LYS:HA	6	14.26
(1,265)	1:2:A:LEU:HB3	1:7:A:LYS:HA	17	14.25
(1,238)	1:1:A:ILE:HB	1:13:A:ARG:HG2	11	14.25
(1,208)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HA	4	14.24
(1,38)	1:7:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:H	12	14.24
(1,38)	1:7:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:H	12	14.24
(1,24)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HG2	20	14.24
(1,84)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD2	5	14.23
(1,84)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD3	5	14.23
(1,13)	1:2:A:LEU:H	1:7:A:LYS:HD2	11	14.23
(1,13)	1:2:A:LEU:H	1:7:A:LYS:HD3	11	14.23
(1,281)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HE	12	14.22
(1,281)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HE	12	14.22
(1,264)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:HA	3	14.22
(1,264)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:HA	3	14.22
(1,214)	1:6:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB2	8	14.22
(1,214)	1:6:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB3	8	14.22
(1,146)	1:6:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:H	9	14.22
(1,38)	1:7:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:H	11	14.2
(1,38)	1:7:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:H	11	14.2
(1,264)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:HA	12	14.19
(1,264)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:HA	12	14.19
(1,208)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HA	1	14.19
(1,203)	1:1:A:ILE:HG21	1:7:A:LYS:HE2	5	14.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,203)	1:1:A:ILE:HG21	1:7:A:LYS:HE3	5	14.19
(1,203)	1:1:A:ILE:HG22	1:7:A:LYS:HE2	5	14.19
(1,203)	1:1:A:ILE:HG22	1:7:A:LYS:HE3	5	14.19
(1,203)	1:1:A:ILE:HG23	1:7:A:LYS:HE2	5	14.19
(1,203)	1:1:A:ILE:HG23	1:7:A:LYS:HE3	5	14.19
(1,166)	1:5:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:HB2	19	14.18
(1,166)	1:5:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:HB3	19	14.18
(1,179)	1:3:A:PRO:HA	1:12:A:ARG:HD2	3	14.16
(1,179)	1:3:A:PRO:HA	1:12:A:ARG:HD3	3	14.16
(1,122)	1:8:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HE	18	14.16
(1,230)	1:6:A:TRP:HB2	1:13:A:ARG:HG2	10	14.15
(1,208)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HA	7	14.15
(1,176)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HD2	2	14.15
(1,176)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HD3	2	14.15
(1,211)	1:1:A:ILE:HB	1:6:A:TRP:HB2	12	14.14
(1,149)	1:4:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	6	14.14
(1,146)	1:6:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:H	1	14.14
(1,3)	1:2:A:LEU:H	1:7:A:LYS:HA	14	14.14
(1,222)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:HB2	8	14.13
(1,222)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:HB3	8	14.13
(1,222)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:HB2	8	14.13
(1,222)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:HB3	8	14.13
(1,179)	1:3:A:PRO:HA	1:12:A:ARG:HD2	6	14.13
(1,179)	1:3:A:PRO:HA	1:12:A:ARG:HD3	6	14.13
(1,312)	1:1:A:ILE:HD11	1:7:A:LYS:HA	4	14.12
(1,312)	1:1:A:ILE:HD12	1:7:A:LYS:HA	4	14.12
(1,312)	1:1:A:ILE:HD13	1:7:A:LYS:HA	4	14.12
(1,102)	1:1:A:ILE:HG21	1:6:A:TRP:H	3	14.11
(1,102)	1:1:A:ILE:HG22	1:6:A:TRP:H	3	14.11
(1,102)	1:1:A:ILE:HG23	1:6:A:TRP:H	3	14.11
(1,38)	1:7:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:H	20	14.1
(1,38)	1:7:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:H	20	14.1
(1,126)	1:5:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:H	1	14.09
(1,38)	1:7:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:H	13	14.09
(1,38)	1:7:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:H	13	14.09
(1,35)	1:7:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:H	13	14.09
(1,35)	1:7:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:H	13	14.09
(1,310)	1:2:A:LEU:HD11	1:12:A:ARG:HA	3	14.08
(1,310)	1:2:A:LEU:HD12	1:12:A:ARG:HA	3	14.08
(1,310)	1:2:A:LEU:HD13	1:12:A:ARG:HA	3	14.08
(1,310)	1:2:A:LEU:HD21	1:12:A:ARG:HA	3	14.08
(1,310)	1:2:A:LEU:HD22	1:12:A:ARG:HA	3	14.08

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,310)	1:2:A:LEU:HD23	1:12:A:ARG:HA	3	14.08
(1,171)	1:8:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD2	13	14.07
(1,171)	1:8:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD3	13	14.07
(1,147)	1:6:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	14	14.07
(1,113)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD2	6	14.07
(1,113)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD3	6	14.07
(1,166)	1:5:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:HB2	10	14.05
(1,166)	1:5:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:HB3	10	14.05
(1,132)	1:7:A:LYS:HE2	1:11:A:TRP:H	7	14.05
(1,132)	1:7:A:LYS:HE3	1:11:A:TRP:H	7	14.05
(1,299)	1:1:A:ILE:HG21	1:6:A:TRP:HB3	18	14.04
(1,299)	1:1:A:ILE:HG22	1:6:A:TRP:HB3	18	14.04
(1,299)	1:1:A:ILE:HG23	1:6:A:TRP:HB3	18	14.04
(1,242)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HD2	3	14.04
(1,242)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HD3	3	14.04
(1,202)	1:1:A:ILE:HG21	1:6:A:TRP:HB3	18	14.04
(1,202)	1:1:A:ILE:HG22	1:6:A:TRP:HB3	18	14.04
(1,202)	1:1:A:ILE:HG23	1:6:A:TRP:HB3	18	14.04
(1,13)	1:2:A:LEU:H	1:7:A:LYS:HD2	12	14.04
(1,13)	1:2:A:LEU:H	1:7:A:LYS:HD3	12	14.04
(1,275)	1:5:A:LYS:HB2	1:11:A:TRP:H	12	14.03
(1,275)	1:5:A:LYS:HB3	1:11:A:TRP:H	12	14.03
(1,136)	1:5:A:LYS:HB2	1:11:A:TRP:H	12	14.03
(1,136)	1:5:A:LYS:HB3	1:11:A:TRP:H	12	14.03
(1,283)	1:5:A:LYS:HG2	1:11:A:TRP:H	10	14.02
(1,283)	1:5:A:LYS:HG3	1:11:A:TRP:H	10	14.02
(1,194)	1:7:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:HA	4	14.02
(1,194)	1:7:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:HA	4	14.02
(1,142)	1:5:A:LYS:HG2	1:11:A:TRP:H	10	14.02
(1,142)	1:5:A:LYS:HG3	1:11:A:TRP:H	10	14.02
(1,264)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:HA	5	14.0
(1,264)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:HA	5	14.0
(1,134)	1:8:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HE	7	14.0
(1,270)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	6	13.99
(1,116)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	6	13.99
(1,208)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HA	2	13.98
(1,122)	1:8:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HE	3	13.98
(1,289)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HA	16	13.97
(1,289)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HA	16	13.97
(1,134)	1:8:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HE	17	13.97
(1,72)	1:7:A:LYS:HE2	1:13:A:ARG:HE	2	13.97
(1,72)	1:7:A:LYS:HE3	1:13:A:ARG:HE	2	13.97

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,274)	1:5:A:LYS:HB2	1:12:A:ARG:HE	10	13.96
(1,274)	1:5:A:LYS:HB3	1:12:A:ARG:HE	10	13.96
(1,216)	1:4:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB2	16	13.95
(1,216)	1:4:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB3	16	13.95
(1,158)	1:7:A:LYS:HD2	1:11:A:TRP:HB2	13	13.94
(1,158)	1:7:A:LYS:HD2	1:11:A:TRP:HB3	13	13.94
(1,158)	1:7:A:LYS:HD3	1:11:A:TRP:HB2	13	13.94
(1,158)	1:7:A:LYS:HD3	1:11:A:TRP:HB3	13	13.94
(1,150)	1:8:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	14	13.94
(1,135)	1:5:A:LYS:HB2	1:12:A:ARG:HE	1	13.94
(1,135)	1:5:A:LYS:HB3	1:12:A:ARG:HE	1	13.94
(1,127)	1:7:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HE	17	13.93
(1,3)	1:2:A:LEU:H	1:7:A:LYS:HA	8	13.92
(1,236)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HB2	5	13.91
(1,236)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HB3	5	13.91
(1,248)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:H	20	13.89
(1,248)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:H	20	13.89
(1,127)	1:7:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HE	9	13.89
(1,48)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:H	20	13.89
(1,48)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:H	20	13.89
(1,319)	1:1:A:ILE:HD11	1:7:A:LYS:HD2	20	13.88
(1,319)	1:1:A:ILE:HD11	1:7:A:LYS:HD3	20	13.88
(1,319)	1:1:A:ILE:HD12	1:7:A:LYS:HD2	20	13.88
(1,319)	1:1:A:ILE:HD12	1:7:A:LYS:HD3	20	13.88
(1,319)	1:1:A:ILE:HD13	1:7:A:LYS:HD2	20	13.88
(1,319)	1:1:A:ILE:HD13	1:7:A:LYS:HD3	20	13.88
(1,127)	1:7:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HE	1	13.87
(1,20)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:H	18	13.87
(1,299)	1:1:A:ILE:HG21	1:6:A:TRP:HB3	15	13.86
(1,299)	1:1:A:ILE:HG22	1:6:A:TRP:HB3	15	13.86
(1,299)	1:1:A:ILE:HG23	1:6:A:TRP:HB3	15	13.86
(1,202)	1:1:A:ILE:HG21	1:6:A:TRP:HB3	15	13.86
(1,202)	1:1:A:ILE:HG22	1:6:A:TRP:HB3	15	13.86
(1,202)	1:1:A:ILE:HG23	1:6:A:TRP:HB3	15	13.86
(1,263)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HG2	18	13.85
(1,166)	1:5:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:HB2	8	13.85
(1,166)	1:5:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:HB3	8	13.85
(1,126)	1:5:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:H	8	13.83
(1,81)	1:6:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HB2	20	13.83
(1,81)	1:6:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HB3	20	13.83
(1,299)	1:1:A:ILE:HG21	1:6:A:TRP:HB3	12	13.82
(1,299)	1:1:A:ILE:HG22	1:6:A:TRP:HB3	12	13.82

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,299)	1:1:A:ILE:HG23	1:6:A:TRP:HB3	12	13.82
(1,265)	1:2:A:LEU:HB3	1:7:A:LYS:HA	12	13.82
(1,202)	1:1:A:ILE:HG21	1:6:A:TRP:HB3	12	13.82
(1,202)	1:1:A:ILE:HG22	1:6:A:TRP:HB3	12	13.82
(1,202)	1:1:A:ILE:HG23	1:6:A:TRP:HB3	12	13.82
(1,217)	1:1:A:ILE:HB	1:8:A:TRP:HB2	5	13.81
(1,146)	1:6:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:H	16	13.81
(1,74)	1:9:A:THR:HG21	1:13:A:ARG:HE	8	13.81
(1,74)	1:9:A:THR:HG22	1:13:A:ARG:HE	8	13.81
(1,74)	1:9:A:THR:HG23	1:13:A:ARG:HE	8	13.81
(1,211)	1:1:A:ILE:HB	1:6:A:TRP:HB2	20	13.8
(1,126)	1:5:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:H	5	13.78
(1,274)	1:5:A:LYS:HB2	1:12:A:ARG:HE	12	13.77
(1,274)	1:5:A:LYS:HB3	1:12:A:ARG:HE	12	13.77
(1,131)	1:7:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:HE	8	13.77
(1,131)	1:7:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:HE	8	13.77
(1,13)	1:2:A:LEU:H	1:7:A:LYS:HD2	5	13.77
(1,13)	1:2:A:LEU:H	1:7:A:LYS:HD3	5	13.77
(1,312)	1:1:A:ILE:HD11	1:7:A:LYS:HA	7	13.76
(1,312)	1:1:A:ILE:HD12	1:7:A:LYS:HA	7	13.76
(1,312)	1:1:A:ILE:HD13	1:7:A:LYS:HA	7	13.76
(1,312)	1:1:A:ILE:HD11	1:7:A:LYS:HA	8	13.76
(1,312)	1:1:A:ILE:HD12	1:7:A:LYS:HA	8	13.76
(1,312)	1:1:A:ILE:HD13	1:7:A:LYS:HA	8	13.76
(1,130)	1:9:A:THR:HB	1:12:A:ARG:HE	13	13.76
(1,281)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HE	13	13.75
(1,281)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HE	13	13.75
(1,275)	1:5:A:LYS:HB2	1:11:A:TRP:H	2	13.75
(1,275)	1:5:A:LYS:HB3	1:11:A:TRP:H	2	13.75
(1,242)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HD2	20	13.75
(1,242)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HD3	20	13.75
(1,211)	1:1:A:ILE:HB	1:6:A:TRP:HB2	13	13.75
(1,136)	1:5:A:LYS:HB2	1:11:A:TRP:H	2	13.75
(1,136)	1:5:A:LYS:HB3	1:11:A:TRP:H	2	13.75
(1,131)	1:7:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:HE	12	13.74
(1,131)	1:7:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:HE	12	13.74
(1,81)	1:6:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HB2	11	13.74
(1,81)	1:6:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HB3	11	13.74
(1,299)	1:1:A:ILE:HG21	1:6:A:TRP:HB3	11	13.73
(1,299)	1:1:A:ILE:HG22	1:6:A:TRP:HB3	11	13.73
(1,299)	1:1:A:ILE:HG23	1:6:A:TRP:HB3	11	13.73
(1,202)	1:1:A:ILE:HG21	1:6:A:TRP:HB3	11	13.73

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,202)	1:1:A:ILE:HG22	1:6:A:TRP:HB3	11	13.73
(1,202)	1:1:A:ILE:HG23	1:6:A:TRP:HB3	11	13.73
(1,15)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HE	1	13.73
(1,236)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HB2	17	13.72
(1,236)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HB3	17	13.72
(1,173)	1:8:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HD2	20	13.72
(1,173)	1:8:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HD3	20	13.72
(1,102)	1:1:A:ILE:HG21	1:6:A:TRP:H	20	13.72
(1,102)	1:1:A:ILE:HG22	1:6:A:TRP:H	20	13.72
(1,102)	1:1:A:ILE:HG23	1:6:A:TRP:H	20	13.72
(1,150)	1:8:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	17	13.71
(1,147)	1:6:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	2	13.71
(1,222)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:HB2	20	13.7
(1,222)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:HB3	20	13.7
(1,222)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:HB2	20	13.7
(1,222)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:HB3	20	13.7
(1,264)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:HA	4	13.68
(1,264)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:HA	4	13.68
(1,171)	1:8:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD2	19	13.68
(1,171)	1:8:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD3	19	13.68
(1,84)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD2	16	13.68
(1,84)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD3	16	13.68
(1,20)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:H	2	13.68
(1,283)	1:5:A:LYS:HG2	1:11:A:TRP:H	12	13.65
(1,283)	1:5:A:LYS:HG3	1:11:A:TRP:H	12	13.65
(1,142)	1:5:A:LYS:HG2	1:11:A:TRP:H	12	13.65
(1,142)	1:5:A:LYS:HG3	1:11:A:TRP:H	12	13.65
(1,126)	1:5:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:H	4	13.65
(1,81)	1:6:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HB2	8	13.65
(1,81)	1:6:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HB3	8	13.65
(1,35)	1:7:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:H	8	13.65
(1,35)	1:7:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:H	8	13.65
(1,24)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HG2	10	13.63
(1,35)	1:7:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:H	9	13.62
(1,35)	1:7:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:H	9	13.62
(1,242)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HD2	16	13.61
(1,242)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HD3	16	13.61
(1,222)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:HB2	9	13.61
(1,222)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:HB3	9	13.61
(1,222)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:HB2	9	13.61
(1,222)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:HB3	9	13.61
(1,102)	1:1:A:ILE:HG21	1:6:A:TRP:H	16	13.61

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,102)	1:1:A:ILE:HG22	1:6:A:TRP:H	16	13.61
(1,102)	1:1:A:ILE:HG23	1:6:A:TRP:H	16	13.61
(1,22)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HB2	1	13.61
(1,22)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HB3	1	13.61
(1,38)	1:7:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:H	2	13.6
(1,38)	1:7:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:H	2	13.6
(1,273)	1:5:A:LYS:HB2	1:13:A:ARG:H	7	13.59
(1,273)	1:5:A:LYS:HB3	1:13:A:ARG:H	7	13.59
(1,81)	1:6:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HB2	17	13.59
(1,81)	1:6:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HB3	17	13.59
(1,33)	1:5:A:LYS:HB2	1:13:A:ARG:H	7	13.59
(1,33)	1:5:A:LYS:HB3	1:13:A:ARG:H	7	13.59
(1,176)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HD2	18	13.58
(1,176)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HD3	18	13.58
(1,122)	1:8:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HE	8	13.57
(1,217)	1:1:A:ILE:HB	1:8:A:TRP:HB2	7	13.56
(1,270)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	17	13.54
(1,256)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	2	13.54
(1,251)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	2	13.54
(1,116)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	17	13.54
(1,100)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	2	13.54
(1,122)	1:8:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HE	4	13.53
(1,94)	1:6:A:TRP:H	1:10:A:PRO:HB2	9	13.53
(1,94)	1:6:A:TRP:H	1:10:A:PRO:HB3	9	13.53
(1,81)	1:6:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HB2	5	13.53
(1,81)	1:6:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HB3	5	13.53
(1,166)	1:5:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:HB2	1	13.52
(1,166)	1:5:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:HB3	1	13.52
(1,13)	1:2:A:LEU:H	1:7:A:LYS:HD2	13	13.51
(1,13)	1:2:A:LEU:H	1:7:A:LYS:HD3	13	13.51
(1,173)	1:8:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HD2	4	13.5
(1,173)	1:8:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HD3	4	13.5
(1,307)	1:1:A:ILE:HD11	1:5:A:LYS:HA	12	13.49
(1,307)	1:1:A:ILE:HD12	1:5:A:LYS:HA	12	13.49
(1,307)	1:1:A:ILE:HD13	1:5:A:LYS:HA	12	13.49
(1,171)	1:8:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD2	10	13.49
(1,171)	1:8:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD3	10	13.49
(1,58)	1:5:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HD2	5	13.49
(1,58)	1:5:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HD3	5	13.49
(1,230)	1:6:A:TRP:HB2	1:13:A:ARG:HG2	6	13.47
(1,173)	1:8:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HD2	14	13.47
(1,173)	1:8:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HD3	14	13.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,113)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD2	3	13.47
(1,113)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD3	3	13.47
(1,132)	1:7:A:LYS:HE2	1:11:A:TRP:H	8	13.46
(1,132)	1:7:A:LYS:HE3	1:11:A:TRP:H	8	13.46
(1,113)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD2	7	13.46
(1,113)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD3	7	13.46
(1,13)	1:2:A:LEU:H	1:7:A:LYS:HD2	6	13.46
(1,13)	1:2:A:LEU:H	1:7:A:LYS:HD3	6	13.46
(1,273)	1:5:A:LYS:HB2	1:13:A:ARG:H	17	13.45
(1,273)	1:5:A:LYS:HB3	1:13:A:ARG:H	17	13.45
(1,75)	1:5:A:LYS:HG2	1:13:A:ARG:HE	15	13.45
(1,75)	1:5:A:LYS:HG3	1:13:A:ARG:HE	15	13.45
(1,33)	1:5:A:LYS:HB2	1:13:A:ARG:H	17	13.45
(1,33)	1:5:A:LYS:HB3	1:13:A:ARG:H	17	13.45
(1,307)	1:1:A:ILE:HD11	1:5:A:LYS:HA	11	13.44
(1,307)	1:1:A:ILE:HD12	1:5:A:LYS:HA	11	13.44
(1,307)	1:1:A:ILE:HD13	1:5:A:LYS:HA	11	13.44
(1,274)	1:5:A:LYS:HB2	1:12:A:ARG:HE	13	13.44
(1,274)	1:5:A:LYS:HB3	1:12:A:ARG:HE	13	13.44
(1,35)	1:7:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:H	18	13.42
(1,35)	1:7:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:H	18	13.42
(1,283)	1:5:A:LYS:HG2	1:11:A:TRP:H	13	13.41
(1,283)	1:5:A:LYS:HG3	1:11:A:TRP:H	13	13.41
(1,216)	1:4:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB2	7	13.41
(1,216)	1:4:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB3	7	13.41
(1,149)	1:4:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	11	13.41
(1,142)	1:5:A:LYS:HG2	1:11:A:TRP:H	13	13.41
(1,142)	1:5:A:LYS:HG3	1:11:A:TRP:H	13	13.41
(1,15)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HE	20	13.41
(1,174)	1:5:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:H	4	13.4
(1,174)	1:5:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:H	4	13.4
(1,166)	1:5:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:HB2	13	13.4
(1,166)	1:5:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:HB3	13	13.4
(1,84)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD2	7	13.4
(1,84)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD3	7	13.4
(1,203)	1:1:A:ILE:HG21	1:7:A:LYS:HE2	9	13.38
(1,203)	1:1:A:ILE:HG21	1:7:A:LYS:HE3	9	13.38
(1,203)	1:1:A:ILE:HG22	1:7:A:LYS:HE2	9	13.38
(1,203)	1:1:A:ILE:HG22	1:7:A:LYS:HE3	9	13.38
(1,203)	1:1:A:ILE:HG23	1:7:A:LYS:HE2	9	13.38
(1,203)	1:1:A:ILE:HG23	1:7:A:LYS:HE3	9	13.38
(1,122)	1:8:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HE	16	13.38

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,256)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	11	13.36
(1,251)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	11	13.36
(1,100)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	11	13.36
(1,289)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HA	4	13.35
(1,289)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HA	4	13.35
(1,127)	1:7:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HE	4	13.35
(1,319)	1:1:A:ILE:HD11	1:7:A:LYS:HD2	5	13.33
(1,319)	1:1:A:ILE:HD11	1:7:A:LYS:HD3	5	13.33
(1,319)	1:1:A:ILE:HD12	1:7:A:LYS:HD2	5	13.33
(1,319)	1:1:A:ILE:HD12	1:7:A:LYS:HD3	5	13.33
(1,319)	1:1:A:ILE:HD13	1:7:A:LYS:HD2	5	13.33
(1,319)	1:1:A:ILE:HD13	1:7:A:LYS:HD3	5	13.33
(1,295)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD2	9	13.33
(1,295)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD3	9	13.33
(1,295)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD2	9	13.33
(1,295)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD3	9	13.33
(1,236)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HB2	14	13.33
(1,236)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HB3	14	13.33
(1,127)	1:7:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HE	14	13.33
(1,126)	1:5:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:H	10	13.33
(1,311)	1:1:A:ILE:HD11	1:12:A:ARG:HA	15	13.32
(1,311)	1:1:A:ILE:HD12	1:12:A:ARG:HA	15	13.32
(1,311)	1:1:A:ILE:HD13	1:12:A:ARG:HA	15	13.32
(1,139)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HE	5	13.3
(1,139)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HE	5	13.3
(1,275)	1:5:A:LYS:HB2	1:11:A:TRP:H	9	13.29
(1,275)	1:5:A:LYS:HB3	1:11:A:TRP:H	9	13.29
(1,136)	1:5:A:LYS:HB2	1:11:A:TRP:H	9	13.29
(1,136)	1:5:A:LYS:HB3	1:11:A:TRP:H	9	13.29
(1,307)	1:1:A:ILE:HD11	1:5:A:LYS:HA	13	13.28
(1,307)	1:1:A:ILE:HD12	1:5:A:LYS:HA	13	13.28
(1,307)	1:1:A:ILE:HD13	1:5:A:LYS:HA	13	13.28
(1,248)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:H	9	13.28
(1,248)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:H	9	13.28
(1,84)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD2	2	13.28
(1,84)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD3	2	13.28
(1,48)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:H	9	13.28
(1,48)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:H	9	13.28
(1,72)	1:7:A:LYS:HE2	1:13:A:ARG:HE	14	13.27
(1,72)	1:7:A:LYS:HE3	1:13:A:ARG:HE	14	13.27
(1,203)	1:1:A:ILE:HG21	1:7:A:LYS:HE2	11	13.26
(1,203)	1:1:A:ILE:HG21	1:7:A:LYS:HE3	11	13.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,203)	1:1:A:ILE:HG22	1:7:A:LYS:HE2	11	13.26
(1,203)	1:1:A:ILE:HG22	1:7:A:LYS:HE3	11	13.26
(1,203)	1:1:A:ILE:HG23	1:7:A:LYS:HE2	11	13.26
(1,203)	1:1:A:ILE:HG23	1:7:A:LYS:HE3	11	13.26
(1,166)	1:5:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:HB2	5	13.25
(1,166)	1:5:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:HB3	5	13.25
(1,307)	1:1:A:ILE:HD11	1:5:A:LYS:HA	16	13.23
(1,307)	1:1:A:ILE:HD12	1:5:A:LYS:HA	16	13.23
(1,307)	1:1:A:ILE:HD13	1:5:A:LYS:HA	16	13.23
(1,307)	1:1:A:ILE:HD11	1:5:A:LYS:HA	7	13.22
(1,307)	1:1:A:ILE:HD12	1:5:A:LYS:HA	7	13.22
(1,307)	1:1:A:ILE:HD13	1:5:A:LYS:HA	7	13.22
(1,134)	1:8:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HE	14	13.22
(1,115)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD2	18	13.22
(1,115)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD3	18	13.22
(1,58)	1:5:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HD2	2	13.22
(1,58)	1:5:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HD3	2	13.22
(1,24)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HG2	3	13.22
(1,194)	1:7:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:HA	9	13.21
(1,194)	1:7:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:HA	9	13.21
(1,158)	1:7:A:LYS:HD2	1:11:A:TRP:HB2	7	13.2
(1,158)	1:7:A:LYS:HD2	1:11:A:TRP:HB3	7	13.2
(1,158)	1:7:A:LYS:HD3	1:11:A:TRP:HB2	7	13.2
(1,158)	1:7:A:LYS:HD3	1:11:A:TRP:HB3	7	13.2
(1,135)	1:5:A:LYS:HB2	1:12:A:ARG:HE	19	13.2
(1,135)	1:5:A:LYS:HB3	1:12:A:ARG:HE	19	13.2
(1,22)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HB2	12	13.19
(1,22)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HB3	12	13.19
(1,222)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:HB2	6	13.18
(1,222)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:HB3	6	13.18
(1,222)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:HB2	6	13.18
(1,222)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:HB3	6	13.18
(1,134)	1:8:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HE	12	13.18
(1,214)	1:6:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB2	17	13.17
(1,214)	1:6:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB3	17	13.17
(1,256)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	18	13.16
(1,251)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	18	13.16
(1,171)	1:8:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD2	3	13.16
(1,171)	1:8:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD3	3	13.16
(1,149)	1:4:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	3	13.16
(1,100)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	18	13.16
(1,273)	1:5:A:LYS:HB2	1:13:A:ARG:H	19	13.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,273)	1:5:A:LYS:HB3	1:13:A:ARG:H	19	13.15
(1,33)	1:5:A:LYS:HB2	1:13:A:ARG:H	19	13.15
(1,33)	1:5:A:LYS:HB3	1:13:A:ARG:H	19	13.15
(1,222)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:HB2	12	13.14
(1,222)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:HB3	12	13.14
(1,222)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:HB2	12	13.14
(1,222)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:HB3	12	13.14
(1,84)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD2	14	13.14
(1,84)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD3	14	13.14
(1,194)	1:7:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:HA	3	13.13
(1,194)	1:7:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:HA	3	13.13
(1,139)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HE	19	13.13
(1,139)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HE	19	13.13
(1,20)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:H	6	13.12
(1,274)	1:5:A:LYS:HB2	1:12:A:ARG:HE	1	13.11
(1,274)	1:5:A:LYS:HB3	1:12:A:ARG:HE	1	13.11
(1,194)	1:7:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:HA	1	13.11
(1,194)	1:7:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:HA	1	13.11
(1,131)	1:7:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:HE	18	13.11
(1,131)	1:7:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:HE	18	13.11
(1,283)	1:5:A:LYS:HG2	1:11:A:TRP:H	20	13.1
(1,283)	1:5:A:LYS:HG3	1:11:A:TRP:H	20	13.1
(1,165)	1:3:A:PRO:HA	1:6:A:TRP:HB2	14	13.1
(1,142)	1:5:A:LYS:HG2	1:11:A:TRP:H	20	13.1
(1,142)	1:5:A:LYS:HG3	1:11:A:TRP:H	20	13.1
(1,20)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:H	11	13.1
(1,319)	1:1:A:ILE:HD11	1:7:A:LYS:HD2	10	13.09
(1,319)	1:1:A:ILE:HD11	1:7:A:LYS:HD3	10	13.09
(1,319)	1:1:A:ILE:HD12	1:7:A:LYS:HD2	10	13.09
(1,319)	1:1:A:ILE:HD12	1:7:A:LYS:HD3	10	13.09
(1,319)	1:1:A:ILE:HD13	1:7:A:LYS:HD2	10	13.09
(1,319)	1:1:A:ILE:HD13	1:7:A:LYS:HD3	10	13.09
(1,128)	1:7:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:H	5	13.08
(1,94)	1:6:A:TRP:H	1:10:A:PRO:HB2	14	13.08
(1,94)	1:6:A:TRP:H	1:10:A:PRO:HB3	14	13.08
(1,20)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:H	19	13.08
(1,158)	1:7:A:LYS:HD2	1:11:A:TRP:HB2	6	13.07
(1,158)	1:7:A:LYS:HD2	1:11:A:TRP:HB3	6	13.07
(1,158)	1:7:A:LYS:HD3	1:11:A:TRP:HB2	6	13.07
(1,158)	1:7:A:LYS:HD3	1:11:A:TRP:HB3	6	13.07
(1,81)	1:6:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HB2	16	13.07
(1,81)	1:6:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HB3	16	13.07

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,214)	1:6:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB2	16	13.06
(1,214)	1:6:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB3	16	13.06
(1,236)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HB2	9	13.05
(1,236)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HB3	9	13.05
(1,146)	1:6:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:H	20	13.05
(1,208)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HA	5	13.04
(1,150)	1:8:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	15	13.04
(1,166)	1:5:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:HB2	11	13.03
(1,166)	1:5:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:HB3	11	13.03
(1,315)	1:1:A:ILE:HD11	1:6:A:TRP:HB2	19	13.02
(1,315)	1:1:A:ILE:HD12	1:6:A:TRP:HB2	19	13.02
(1,315)	1:1:A:ILE:HD13	1:6:A:TRP:HB2	19	13.02
(1,124)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HE	11	13.01
(1,196)	1:3:A:PRO:HA	1:6:A:TRP:HB3	19	13.0
(1,84)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD2	18	13.0
(1,84)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD3	18	13.0
(1,209)	1:5:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB2	1	12.99
(1,209)	1:5:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB3	1	12.99
(1,72)	1:7:A:LYS:HE2	1:13:A:ARG:HE	16	12.99
(1,72)	1:7:A:LYS:HE3	1:13:A:ARG:HE	16	12.99
(1,310)	1:2:A:LEU:HD11	1:12:A:ARG:HA	15	12.98
(1,310)	1:2:A:LEU:HD12	1:12:A:ARG:HA	15	12.98
(1,310)	1:2:A:LEU:HD13	1:12:A:ARG:HA	15	12.98
(1,310)	1:2:A:LEU:HD21	1:12:A:ARG:HA	15	12.98
(1,310)	1:2:A:LEU:HD22	1:12:A:ARG:HA	15	12.98
(1,310)	1:2:A:LEU:HD23	1:12:A:ARG:HA	15	12.98
(1,225)	1:7:A:LYS:HB2	1:12:A:ARG:H	6	12.98
(1,225)	1:7:A:LYS:HB3	1:12:A:ARG:H	6	12.98
(1,225)	1:7:A:LYS:HB2	1:12:A:ARG:H	13	12.98
(1,225)	1:7:A:LYS:HB3	1:12:A:ARG:H	13	12.98
(1,216)	1:4:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB2	2	12.98
(1,216)	1:4:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB3	2	12.98
(1,35)	1:7:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:H	6	12.98
(1,35)	1:7:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:H	6	12.98
(1,146)	1:6:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:H	5	12.97
(1,310)	1:2:A:LEU:HD11	1:12:A:ARG:HA	17	12.96
(1,310)	1:2:A:LEU:HD12	1:12:A:ARG:HA	17	12.96
(1,310)	1:2:A:LEU:HD13	1:12:A:ARG:HA	17	12.96
(1,310)	1:2:A:LEU:HD21	1:12:A:ARG:HA	17	12.96
(1,310)	1:2:A:LEU:HD22	1:12:A:ARG:HA	17	12.96
(1,310)	1:2:A:LEU:HD23	1:12:A:ARG:HA	17	12.96
(1,214)	1:6:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB2	9	12.95

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,214)	1:6:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB3	9	12.95
(1,197)	1:5:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB3	10	12.95
(1,180)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD2	9	12.95
(1,180)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD3	9	12.95
(1,180)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD2	9	12.95
(1,180)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD3	9	12.95
(1,126)	1:5:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:H	19	12.95
(1,102)	1:1:A:ILE:HG21	1:6:A:TRP:H	19	12.95
(1,102)	1:1:A:ILE:HG22	1:6:A:TRP:H	19	12.95
(1,102)	1:1:A:ILE:HG23	1:6:A:TRP:H	19	12.95
(1,312)	1:1:A:ILE:HD11	1:7:A:LYS:HA	1	12.94
(1,312)	1:1:A:ILE:HD12	1:7:A:LYS:HA	1	12.94
(1,312)	1:1:A:ILE:HD13	1:7:A:LYS:HA	1	12.94
(1,289)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HA	3	12.94
(1,289)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HA	3	12.94
(1,132)	1:7:A:LYS:HE2	1:11:A:TRP:H	20	12.94
(1,132)	1:7:A:LYS:HE3	1:11:A:TRP:H	20	12.94
(1,113)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD2	17	12.94
(1,113)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD3	17	12.94
(1,102)	1:1:A:ILE:HG21	1:6:A:TRP:H	6	12.94
(1,102)	1:1:A:ILE:HG22	1:6:A:TRP:H	6	12.94
(1,102)	1:1:A:ILE:HG23	1:6:A:TRP:H	6	12.94
(1,102)	1:1:A:ILE:HG21	1:6:A:TRP:H	15	12.94
(1,102)	1:1:A:ILE:HG22	1:6:A:TRP:H	15	12.94
(1,102)	1:1:A:ILE:HG23	1:6:A:TRP:H	15	12.94
(1,171)	1:8:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD2	8	12.93
(1,171)	1:8:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD3	8	12.93
(1,127)	1:7:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HE	11	12.92
(1,22)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HB2	2	12.92
(1,22)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HB3	2	12.92
(1,20)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:H	1	12.91
(1,265)	1:2:A:LEU:HB3	1:7:A:LYS:HA	19	12.9
(1,135)	1:5:A:LYS:HB2	1:12:A:ARG:HE	14	12.9
(1,135)	1:5:A:LYS:HB3	1:12:A:ARG:HE	14	12.9
(1,250)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:H	3	12.89
(1,134)	1:8:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HE	4	12.89
(1,98)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:H	3	12.89
(1,286)	1:1:A:ILE:HG21	1:5:A:LYS:HA	7	12.88
(1,286)	1:1:A:ILE:HG22	1:5:A:LYS:HA	7	12.88
(1,286)	1:1:A:ILE:HG23	1:5:A:LYS:HA	7	12.88
(1,248)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:H	3	12.88
(1,248)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:H	3	12.88

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,48)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:H	3	12.88
(1,48)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:H	3	12.88
(1,147)	1:6:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	3	12.86
(1,122)	1:8:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HE	17	12.85
(1,115)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD2	3	12.85
(1,115)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD3	3	12.85
(1,24)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HG2	1	12.85
(1,307)	1:1:A:ILE:HD11	1:5:A:LYS:HA	4	12.84
(1,307)	1:1:A:ILE:HD12	1:5:A:LYS:HA	4	12.84
(1,307)	1:1:A:ILE:HD13	1:5:A:LYS:HA	4	12.84
(1,248)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:H	15	12.84
(1,248)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:H	15	12.84
(1,158)	1:7:A:LYS:HD2	1:11:A:TRP:HB2	18	12.84
(1,158)	1:7:A:LYS:HD2	1:11:A:TRP:HB3	18	12.84
(1,158)	1:7:A:LYS:HD3	1:11:A:TRP:HB2	18	12.84
(1,158)	1:7:A:LYS:HD3	1:11:A:TRP:HB3	18	12.84
(1,146)	1:6:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:H	14	12.84
(1,48)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:H	15	12.84
(1,48)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:H	15	12.84
(1,15)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HE	17	12.83
(1,299)	1:1:A:ILE:HG21	1:6:A:TRP:HB3	6	12.82
(1,299)	1:1:A:ILE:HG22	1:6:A:TRP:HB3	6	12.82
(1,299)	1:1:A:ILE:HG23	1:6:A:TRP:HB3	6	12.82
(1,295)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD2	10	12.82
(1,295)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD3	10	12.82
(1,295)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD2	10	12.82
(1,295)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD3	10	12.82
(1,275)	1:5:A:LYS:HB2	1:11:A:TRP:H	13	12.82
(1,275)	1:5:A:LYS:HB3	1:11:A:TRP:H	13	12.82
(1,209)	1:5:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB2	8	12.82
(1,209)	1:5:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB3	8	12.82
(1,202)	1:1:A:ILE:HG21	1:6:A:TRP:HB3	6	12.82
(1,202)	1:1:A:ILE:HG22	1:6:A:TRP:HB3	6	12.82
(1,202)	1:1:A:ILE:HG23	1:6:A:TRP:HB3	6	12.82
(1,136)	1:5:A:LYS:HB2	1:11:A:TRP:H	13	12.82
(1,136)	1:5:A:LYS:HB3	1:11:A:TRP:H	13	12.82
(1,132)	1:7:A:LYS:HE2	1:11:A:TRP:H	6	12.82
(1,132)	1:7:A:LYS:HE3	1:11:A:TRP:H	6	12.82
(1,94)	1:6:A:TRP:H	1:10:A:PRO:HB2	8	12.82
(1,94)	1:6:A:TRP:H	1:10:A:PRO:HB3	8	12.82
(1,55)	1:5:A:LYS:H	1:11:A:TRP:HB2	15	12.82
(1,55)	1:5:A:LYS:H	1:11:A:TRP:HB3	15	12.82

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,312)	1:1:A:ILE:HD11	1:7:A:LYS:HA	2	12.81
(1,312)	1:1:A:ILE:HD12	1:7:A:LYS:HA	2	12.81
(1,312)	1:1:A:ILE:HD13	1:7:A:LYS:HA	2	12.81
(1,222)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:HB2	3	12.81
(1,222)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:HB3	3	12.81
(1,222)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:HB2	3	12.81
(1,222)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:HB3	3	12.81
(1,174)	1:5:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:H	3	12.81
(1,174)	1:5:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:H	3	12.81
(1,271)	1:4:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	3	12.79
(1,214)	1:6:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB2	7	12.79
(1,214)	1:6:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB3	7	12.79
(1,81)	1:6:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HB2	4	12.79
(1,81)	1:6:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HB3	4	12.79
(1,55)	1:5:A:LYS:H	1:11:A:TRP:HB2	6	12.79
(1,55)	1:5:A:LYS:H	1:11:A:TRP:HB3	6	12.79
(1,135)	1:5:A:LYS:HB2	1:12:A:ARG:HE	9	12.78
(1,135)	1:5:A:LYS:HB3	1:12:A:ARG:HE	9	12.78
(1,122)	1:8:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HE	14	12.78
(1,203)	1:1:A:ILE:HG21	1:7:A:LYS:HE2	13	12.76
(1,203)	1:1:A:ILE:HG21	1:7:A:LYS:HE3	13	12.76
(1,203)	1:1:A:ILE:HG22	1:7:A:LYS:HE2	13	12.76
(1,203)	1:1:A:ILE:HG22	1:7:A:LYS:HE3	13	12.76
(1,203)	1:1:A:ILE:HG23	1:7:A:LYS:HE2	13	12.76
(1,203)	1:1:A:ILE:HG23	1:7:A:LYS:HE3	13	12.76
(1,122)	1:8:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HE	5	12.76
(1,20)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:H	13	12.76
(1,299)	1:1:A:ILE:HG21	1:6:A:TRP:HB3	1	12.75
(1,299)	1:1:A:ILE:HG22	1:6:A:TRP:HB3	1	12.75
(1,299)	1:1:A:ILE:HG23	1:6:A:TRP:HB3	1	12.75
(1,202)	1:1:A:ILE:HG21	1:6:A:TRP:HB3	1	12.75
(1,202)	1:1:A:ILE:HG22	1:6:A:TRP:HB3	1	12.75
(1,202)	1:1:A:ILE:HG23	1:6:A:TRP:HB3	1	12.75
(1,165)	1:3:A:PRO:HA	1:6:A:TRP:HB2	10	12.75
(1,130)	1:9:A:THR:HB	1:12:A:ARG:HE	18	12.74
(1,108)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE2	3	12.74
(1,108)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE3	3	12.74
(1,75)	1:5:A:LYS:HG2	1:13:A:ARG:HE	4	12.74
(1,75)	1:5:A:LYS:HG3	1:13:A:ARG:HE	4	12.74
(1,286)	1:1:A:ILE:HG21	1:5:A:LYS:HA	16	12.73
(1,286)	1:1:A:ILE:HG22	1:5:A:LYS:HA	16	12.73
(1,286)	1:1:A:ILE:HG23	1:5:A:LYS:HA	16	12.73

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,263)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HG2	15	12.73
(1,270)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	3	12.72
(1,248)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:H	2	12.72
(1,248)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:H	2	12.72
(1,222)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:HB2	15	12.72
(1,222)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:HB3	15	12.72
(1,222)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:HB2	15	12.72
(1,222)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:HB3	15	12.72
(1,116)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	3	12.72
(1,48)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:H	2	12.72
(1,48)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:H	2	12.72
(1,173)	1:8:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HD2	11	12.71
(1,173)	1:8:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HD3	11	12.71
(1,74)	1:9:A:THR:HG21	1:13:A:ARG:HE	9	12.71
(1,74)	1:9:A:THR:HG22	1:13:A:ARG:HE	9	12.71
(1,74)	1:9:A:THR:HG23	1:13:A:ARG:HE	9	12.71
(1,24)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HG2	15	12.71
(1,211)	1:1:A:ILE:HB	1:6:A:TRP:HB2	18	12.69
(1,173)	1:8:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HD2	7	12.69
(1,173)	1:8:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HD3	7	12.69
(1,132)	1:7:A:LYS:HE2	1:11:A:TRP:H	13	12.69
(1,132)	1:7:A:LYS:HE3	1:11:A:TRP:H	13	12.69
(1,132)	1:7:A:LYS:HE2	1:11:A:TRP:H	18	12.69
(1,132)	1:7:A:LYS:HE3	1:11:A:TRP:H	18	12.69
(1,196)	1:3:A:PRO:HA	1:6:A:TRP:HB3	20	12.68
(1,173)	1:8:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HD2	17	12.67
(1,173)	1:8:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HD3	17	12.67
(1,13)	1:2:A:LEU:H	1:7:A:LYS:HD2	8	12.67
(1,13)	1:2:A:LEU:H	1:7:A:LYS:HD3	8	12.67
(1,38)	1:7:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:H	5	12.66
(1,38)	1:7:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:H	5	12.66
(1,319)	1:1:A:ILE:HD11	1:7:A:LYS:HD2	6	12.65
(1,319)	1:1:A:ILE:HD11	1:7:A:LYS:HD3	6	12.65
(1,319)	1:1:A:ILE:HD12	1:7:A:LYS:HD2	6	12.65
(1,319)	1:1:A:ILE:HD12	1:7:A:LYS:HD3	6	12.65
(1,319)	1:1:A:ILE:HD13	1:7:A:LYS:HD2	6	12.65
(1,319)	1:1:A:ILE:HD13	1:7:A:LYS:HD3	6	12.65
(1,84)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD2	3	12.65
(1,84)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD3	3	12.65
(1,35)	1:7:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:H	15	12.65
(1,35)	1:7:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:H	15	12.65
(1,275)	1:5:A:LYS:HB2	1:11:A:TRP:H	20	12.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,275)	1:5:A:LYS:HB3	1:11:A:TRP:H	20	12.64
(1,136)	1:5:A:LYS:HB2	1:11:A:TRP:H	20	12.64
(1,136)	1:5:A:LYS:HB3	1:11:A:TRP:H	20	12.64
(1,319)	1:1:A:ILE:HD11	1:7:A:LYS:HD2	8	12.63
(1,319)	1:1:A:ILE:HD11	1:7:A:LYS:HD3	8	12.63
(1,319)	1:1:A:ILE:HD12	1:7:A:LYS:HD2	8	12.63
(1,319)	1:1:A:ILE:HD12	1:7:A:LYS:HD3	8	12.63
(1,319)	1:1:A:ILE:HD13	1:7:A:LYS:HD2	8	12.63
(1,319)	1:1:A:ILE:HD13	1:7:A:LYS:HD3	8	12.63
(1,20)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:H	12	12.62
(1,172)	1:5:A:LYS:HE2	1:8:A:TRP:H	9	12.61
(1,172)	1:5:A:LYS:HE3	1:8:A:TRP:H	9	12.61
(1,171)	1:8:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD2	4	12.61
(1,171)	1:8:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD3	4	12.61
(1,150)	1:8:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	1	12.6
(1,281)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HE	5	12.59
(1,281)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HE	5	12.59
(1,242)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HD2	11	12.59
(1,242)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HD3	11	12.59
(1,315)	1:1:A:ILE:HD11	1:6:A:TRP:HB2	15	12.58
(1,315)	1:1:A:ILE:HD12	1:6:A:TRP:HB2	15	12.58
(1,315)	1:1:A:ILE:HD13	1:6:A:TRP:HB2	15	12.58
(1,74)	1:9:A:THR:HG21	1:13:A:ARG:HE	5	12.57
(1,74)	1:9:A:THR:HG22	1:13:A:ARG:HE	5	12.57
(1,74)	1:9:A:THR:HG23	1:13:A:ARG:HE	5	12.57
(1,271)	1:4:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	15	12.56
(1,242)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HD2	13	12.56
(1,242)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HD3	13	12.56
(1,203)	1:1:A:ILE:HG21	1:7:A:LYS:HE2	8	12.56
(1,203)	1:1:A:ILE:HG21	1:7:A:LYS:HE3	8	12.56
(1,203)	1:1:A:ILE:HG22	1:7:A:LYS:HE2	8	12.56
(1,203)	1:1:A:ILE:HG22	1:7:A:LYS:HE3	8	12.56
(1,203)	1:1:A:ILE:HG23	1:7:A:LYS:HE2	8	12.56
(1,203)	1:1:A:ILE:HG23	1:7:A:LYS:HE3	8	12.56
(1,295)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD2	1	12.55
(1,295)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD3	1	12.55
(1,295)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD2	1	12.55
(1,295)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD3	1	12.55
(1,102)	1:1:A:ILE:HG21	1:6:A:TRP:H	5	12.55
(1,102)	1:1:A:ILE:HG22	1:6:A:TRP:H	5	12.55
(1,102)	1:1:A:ILE:HG23	1:6:A:TRP:H	5	12.55
(1,158)	1:7:A:LYS:HD2	1:11:A:TRP:HB2	8	12.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,158)	1:7:A:LYS:HD2	1:11:A:TRP:HB3	8	12.54
(1,158)	1:7:A:LYS:HD3	1:11:A:TRP:HB2	8	12.54
(1,158)	1:7:A:LYS:HD3	1:11:A:TRP:HB3	8	12.54
(1,143)	1:1:A:ILE:HG21	1:12:A:ARG:HE	17	12.54
(1,143)	1:1:A:ILE:HG22	1:12:A:ARG:HE	17	12.54
(1,143)	1:1:A:ILE:HG23	1:12:A:ARG:HE	17	12.54
(1,203)	1:1:A:ILE:HG21	1:7:A:LYS:HE2	6	12.53
(1,203)	1:1:A:ILE:HG21	1:7:A:LYS:HE3	6	12.53
(1,203)	1:1:A:ILE:HG22	1:7:A:LYS:HE2	6	12.53
(1,203)	1:1:A:ILE:HG22	1:7:A:LYS:HE3	6	12.53
(1,203)	1:1:A:ILE:HG23	1:7:A:LYS:HE2	6	12.53
(1,203)	1:1:A:ILE:HG23	1:7:A:LYS:HE3	6	12.53
(1,166)	1:5:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:HB2	16	12.53
(1,166)	1:5:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:HB3	16	12.53
(1,81)	1:6:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HB2	10	12.53
(1,81)	1:6:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HB3	10	12.53
(1,174)	1:5:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:H	15	12.52
(1,174)	1:5:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:H	15	12.52
(1,81)	1:6:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HB2	7	12.52
(1,81)	1:6:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HB3	7	12.52
(1,196)	1:3:A:PRO:HA	1:6:A:TRP:HB3	18	12.51
(1,3)	1:2:A:LEU:H	1:7:A:LYS:HA	7	12.51
(1,309)	1:2:A:LEU:HD11	1:7:A:LYS:HA	18	12.5
(1,309)	1:2:A:LEU:HD12	1:7:A:LYS:HA	18	12.5
(1,309)	1:2:A:LEU:HD13	1:7:A:LYS:HA	18	12.5
(1,309)	1:2:A:LEU:HD21	1:7:A:LYS:HA	18	12.5
(1,309)	1:2:A:LEU:HD22	1:7:A:LYS:HA	18	12.5
(1,309)	1:2:A:LEU:HD23	1:7:A:LYS:HA	18	12.5
(1,211)	1:1:A:ILE:HB	1:6:A:TRP:HB2	16	12.5
(1,171)	1:8:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD2	9	12.5
(1,171)	1:8:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD3	9	12.5
(1,165)	1:3:A:PRO:HA	1:6:A:TRP:HB2	12	12.49
(1,128)	1:7:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:H	14	12.49
(1,307)	1:1:A:ILE:HD11	1:5:A:LYS:HA	1	12.48
(1,307)	1:1:A:ILE:HD12	1:5:A:LYS:HA	1	12.48
(1,307)	1:1:A:ILE:HD13	1:5:A:LYS:HA	1	12.48
(1,242)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HD2	19	12.48
(1,242)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HD3	19	12.48
(1,174)	1:5:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:H	16	12.48
(1,174)	1:5:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:H	16	12.48
(1,165)	1:3:A:PRO:HA	1:6:A:TRP:HB2	11	12.48
(1,299)	1:1:A:ILE:HG21	1:6:A:TRP:HB3	13	12.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,299)	1:1:A:ILE:HG22	1:6:A:TRP:HB3	13	12.47
(1,299)	1:1:A:ILE:HG23	1:6:A:TRP:HB3	13	12.47
(1,216)	1:4:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB2	5	12.47
(1,216)	1:4:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB3	5	12.47
(1,208)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HA	9	12.47
(1,202)	1:1:A:ILE:HG21	1:6:A:TRP:HB3	13	12.47
(1,202)	1:1:A:ILE:HG22	1:6:A:TRP:HB3	13	12.47
(1,202)	1:1:A:ILE:HG23	1:6:A:TRP:HB3	13	12.47
(1,150)	1:8:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	11	12.47
(1,75)	1:5:A:LYS:HG2	1:13:A:ARG:HE	3	12.47
(1,75)	1:5:A:LYS:HG3	1:13:A:ARG:HE	3	12.47
(1,20)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:H	4	12.47
(1,248)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:H	12	12.45
(1,248)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:H	12	12.45
(1,134)	1:8:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HE	2	12.45
(1,48)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:H	12	12.45
(1,48)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:H	12	12.45
(1,180)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD2	10	12.44
(1,180)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD3	10	12.44
(1,180)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD2	10	12.44
(1,180)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD3	10	12.44
(1,15)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HE	14	12.44
(1,315)	1:1:A:ILE:HD11	1:6:A:TRP:HB2	5	12.42
(1,315)	1:1:A:ILE:HD12	1:6:A:TRP:HB2	5	12.42
(1,315)	1:1:A:ILE:HD13	1:6:A:TRP:HB2	5	12.42
(1,281)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HE	19	12.42
(1,281)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HE	19	12.42
(1,216)	1:4:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB2	1	12.42
(1,216)	1:4:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB3	1	12.42
(1,197)	1:5:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB3	2	12.41
(1,176)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HD2	16	12.41
(1,176)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HD3	16	12.41
(1,3)	1:2:A:LEU:H	1:7:A:LYS:HA	9	12.41
(1,158)	1:7:A:LYS:HD2	1:11:A:TRP:HB2	5	12.4
(1,158)	1:7:A:LYS:HD2	1:11:A:TRP:HB3	5	12.4
(1,158)	1:7:A:LYS:HD3	1:11:A:TRP:HB2	5	12.4
(1,158)	1:7:A:LYS:HD3	1:11:A:TRP:HB3	5	12.4
(1,150)	1:8:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	4	12.4
(1,225)	1:7:A:LYS:HB2	1:12:A:ARG:H	18	12.39
(1,225)	1:7:A:LYS:HB3	1:12:A:ARG:H	18	12.39
(1,22)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HB2	4	12.39
(1,22)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HB3	4	12.39

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,248)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:H	11	12.38
(1,248)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:H	11	12.38
(1,158)	1:7:A:LYS:HD2	1:11:A:TRP:HB2	20	12.38
(1,158)	1:7:A:LYS:HD2	1:11:A:TRP:HB3	20	12.38
(1,158)	1:7:A:LYS:HD3	1:11:A:TRP:HB2	20	12.38
(1,158)	1:7:A:LYS:HD3	1:11:A:TRP:HB3	20	12.38
(1,48)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:H	11	12.38
(1,48)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:H	11	12.38
(1,22)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HB2	17	12.38
(1,22)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HB3	17	12.38
(1,274)	1:5:A:LYS:HB2	1:12:A:ARG:HE	19	12.37
(1,274)	1:5:A:LYS:HB3	1:12:A:ARG:HE	19	12.37
(1,299)	1:1:A:ILE:HG21	1:6:A:TRP:HB3	14	12.34
(1,299)	1:1:A:ILE:HG22	1:6:A:TRP:HB3	14	12.34
(1,299)	1:1:A:ILE:HG23	1:6:A:TRP:HB3	14	12.34
(1,202)	1:1:A:ILE:HG21	1:6:A:TRP:HB3	14	12.34
(1,202)	1:1:A:ILE:HG22	1:6:A:TRP:HB3	14	12.34
(1,202)	1:1:A:ILE:HG23	1:6:A:TRP:HB3	14	12.34
(1,194)	1:7:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:HA	11	12.34
(1,194)	1:7:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:HA	11	12.34
(1,15)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HE	2	12.34
(1,209)	1:5:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB2	5	12.33
(1,209)	1:5:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB3	5	12.33
(1,209)	1:5:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB2	13	12.33
(1,209)	1:5:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB3	13	12.33
(1,236)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HB2	1	12.32
(1,236)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HB3	1	12.32
(1,150)	1:8:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	2	12.32
(1,81)	1:6:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HB2	1	12.32
(1,81)	1:6:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HB3	1	12.32
(1,13)	1:2:A:LEU:H	1:7:A:LYS:HD2	9	12.32
(1,13)	1:2:A:LEU:H	1:7:A:LYS:HD3	9	12.32
(1,132)	1:7:A:LYS:HE2	1:11:A:TRP:H	5	12.31
(1,132)	1:7:A:LYS:HE3	1:11:A:TRP:H	5	12.31
(1,84)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD2	17	12.31
(1,84)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD3	17	12.31
(1,24)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HG2	12	12.31
(1,22)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HB2	11	12.3
(1,22)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HB3	11	12.3
(1,196)	1:3:A:PRO:HA	1:6:A:TRP:HB3	14	12.29
(1,176)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HD2	3	12.29
(1,176)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HD3	3	12.29

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,250)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:H	15	12.28
(1,98)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:H	15	12.28
(1,286)	1:1:A:ILE:HG21	1:5:A:LYS:HA	3	12.27
(1,286)	1:1:A:ILE:HG22	1:5:A:LYS:HA	3	12.27
(1,286)	1:1:A:ILE:HG23	1:5:A:LYS:HA	3	12.27
(1,265)	1:2:A:LEU:HB3	1:7:A:LYS:HA	10	12.27
(1,176)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HD2	15	12.27
(1,176)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HD3	15	12.27
(1,165)	1:3:A:PRO:HA	1:6:A:TRP:HB2	19	12.27
(1,122)	1:8:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HE	9	12.27
(1,132)	1:7:A:LYS:HE2	1:11:A:TRP:H	2	12.26
(1,132)	1:7:A:LYS:HE3	1:11:A:TRP:H	2	12.26
(1,122)	1:8:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HE	1	12.26
(1,75)	1:5:A:LYS:HG2	1:13:A:ARG:HE	18	12.26
(1,75)	1:5:A:LYS:HG3	1:13:A:ARG:HE	18	12.26
(1,319)	1:1:A:ILE:HD11	1:7:A:LYS:HD2	14	12.25
(1,319)	1:1:A:ILE:HD11	1:7:A:LYS:HD3	14	12.25
(1,319)	1:1:A:ILE:HD12	1:7:A:LYS:HD2	14	12.25
(1,319)	1:1:A:ILE:HD12	1:7:A:LYS:HD3	14	12.25
(1,319)	1:1:A:ILE:HD13	1:7:A:LYS:HD2	14	12.25
(1,319)	1:1:A:ILE:HD13	1:7:A:LYS:HD3	14	12.25
(1,225)	1:7:A:LYS:HB2	1:12:A:ARG:H	15	12.25
(1,225)	1:7:A:LYS:HB3	1:12:A:ARG:H	15	12.25
(1,134)	1:8:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HE	8	12.25
(1,81)	1:6:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HB2	19	12.25
(1,81)	1:6:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HB3	19	12.25
(1,273)	1:5:A:LYS:HB2	1:13:A:ARG:H	4	12.24
(1,273)	1:5:A:LYS:HB3	1:13:A:ARG:H	4	12.24
(1,33)	1:5:A:LYS:HB2	1:13:A:ARG:H	4	12.24
(1,33)	1:5:A:LYS:HB3	1:13:A:ARG:H	4	12.24
(1,15)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HE	11	12.24
(1,307)	1:1:A:ILE:HD11	1:5:A:LYS:HA	17	12.23
(1,307)	1:1:A:ILE:HD12	1:5:A:LYS:HA	17	12.23
(1,307)	1:1:A:ILE:HD13	1:5:A:LYS:HA	17	12.23
(1,263)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HG2	11	12.23
(1,139)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HE	14	12.22
(1,139)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HE	14	12.22
(1,132)	1:7:A:LYS:HE2	1:11:A:TRP:H	11	12.22
(1,132)	1:7:A:LYS:HE3	1:11:A:TRP:H	11	12.22
(1,3)	1:2:A:LEU:H	1:7:A:LYS:HA	1	12.22
(1,256)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	17	12.21
(1,251)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	17	12.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,100)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	17	12.21
(1,275)	1:5:A:LYS:HB2	1:11:A:TRP:H	10	12.19
(1,275)	1:5:A:LYS:HB3	1:11:A:TRP:H	10	12.19
(1,273)	1:5:A:LYS:HB2	1:13:A:ARG:H	6	12.19
(1,273)	1:5:A:LYS:HB3	1:13:A:ARG:H	6	12.19
(1,214)	1:6:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB2	1	12.19
(1,214)	1:6:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB3	1	12.19
(1,136)	1:5:A:LYS:HB2	1:11:A:TRP:H	10	12.19
(1,136)	1:5:A:LYS:HB3	1:11:A:TRP:H	10	12.19
(1,33)	1:5:A:LYS:HB2	1:13:A:ARG:H	6	12.19
(1,33)	1:5:A:LYS:HB3	1:13:A:ARG:H	6	12.19
(1,134)	1:8:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HE	15	12.18
(1,124)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HE	3	12.18
(1,270)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	2	12.17
(1,180)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD2	1	12.17
(1,180)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD3	1	12.17
(1,180)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD2	1	12.17
(1,180)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD3	1	12.17
(1,130)	1:9:A:THR:HB	1:12:A:ARG:HE	7	12.17
(1,116)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	2	12.17
(1,108)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE2	11	12.17
(1,108)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE3	11	12.17
(1,93)	1:1:A:ILE:HB	1:6:A:TRP:H	20	12.17
(1,13)	1:2:A:LEU:H	1:7:A:LYS:HD2	14	12.17
(1,13)	1:2:A:LEU:H	1:7:A:LYS:HD3	14	12.17
(1,309)	1:2:A:LEU:HD11	1:7:A:LYS:HA	12	12.16
(1,309)	1:2:A:LEU:HD12	1:7:A:LYS:HA	12	12.16
(1,309)	1:2:A:LEU:HD13	1:7:A:LYS:HA	12	12.16
(1,309)	1:2:A:LEU:HD21	1:7:A:LYS:HA	12	12.16
(1,309)	1:2:A:LEU:HD22	1:7:A:LYS:HA	12	12.16
(1,309)	1:2:A:LEU:HD23	1:7:A:LYS:HA	12	12.16
(1,307)	1:1:A:ILE:HD11	1:5:A:LYS:HA	18	12.16
(1,307)	1:1:A:ILE:HD12	1:5:A:LYS:HA	18	12.16
(1,307)	1:1:A:ILE:HD13	1:5:A:LYS:HA	18	12.16
(1,166)	1:5:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:HB2	17	12.15
(1,166)	1:5:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:HB3	17	12.15
(1,13)	1:2:A:LEU:H	1:7:A:LYS:HD2	15	12.13
(1,13)	1:2:A:LEU:H	1:7:A:LYS:HD3	15	12.13
(1,214)	1:6:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB2	11	12.12
(1,214)	1:6:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB3	11	12.12
(1,236)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HB2	7	12.1
(1,236)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HB3	7	12.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,216)	1:4:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB2	6	12.09
(1,216)	1:4:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB3	6	12.09
(1,128)	1:7:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:H	13	12.09
(1,94)	1:6:A:TRP:H	1:10:A:PRO:HB2	5	12.08
(1,94)	1:6:A:TRP:H	1:10:A:PRO:HB3	5	12.08
(1,274)	1:5:A:LYS:HB2	1:12:A:ARG:HE	14	12.07
(1,274)	1:5:A:LYS:HB3	1:12:A:ARG:HE	14	12.07
(1,211)	1:1:A:ILE:HB	1:6:A:TRP:HB2	1	12.07
(1,22)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HB2	19	12.07
(1,22)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HB3	19	12.07
(1,283)	1:5:A:LYS:HG2	1:11:A:TRP:H	5	12.06
(1,283)	1:5:A:LYS:HG3	1:11:A:TRP:H	5	12.06
(1,263)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HG2	7	12.06
(1,142)	1:5:A:LYS:HG2	1:11:A:TRP:H	5	12.06
(1,142)	1:5:A:LYS:HG3	1:11:A:TRP:H	5	12.06
(1,248)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:H	5	12.05
(1,248)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:H	5	12.05
(1,48)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:H	5	12.05
(1,48)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:H	5	12.05
(1,74)	1:9:A:THR:HG21	1:13:A:ARG:HE	7	12.04
(1,74)	1:9:A:THR:HG22	1:13:A:ARG:HE	7	12.04
(1,74)	1:9:A:THR:HG23	1:13:A:ARG:HE	7	12.04
(1,35)	1:7:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:H	12	12.04
(1,35)	1:7:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:H	12	12.04
(1,58)	1:5:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HD2	17	12.03
(1,58)	1:5:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HD3	17	12.03
(1,35)	1:7:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:H	5	12.03
(1,35)	1:7:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:H	5	12.03
(1,20)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:H	17	12.02
(1,315)	1:1:A:ILE:HD11	1:6:A:TRP:HB2	2	12.01
(1,315)	1:1:A:ILE:HD12	1:6:A:TRP:HB2	2	12.01
(1,315)	1:1:A:ILE:HD13	1:6:A:TRP:HB2	2	12.01
(1,94)	1:6:A:TRP:H	1:10:A:PRO:HB2	12	12.01
(1,94)	1:6:A:TRP:H	1:10:A:PRO:HB3	12	12.01
(1,146)	1:6:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:H	4	12.0
(1,35)	1:7:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:H	20	12.0
(1,35)	1:7:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:H	20	12.0
(1,250)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:H	4	11.98
(1,98)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:H	4	11.98
(1,55)	1:5:A:LYS:H	1:11:A:TRP:HB2	5	11.98
(1,55)	1:5:A:LYS:H	1:11:A:TRP:HB3	5	11.98
(1,264)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:HA	15	11.97

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,264)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:HA	15	11.97
(1,171)	1:8:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD2	15	11.97
(1,171)	1:8:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD3	15	11.97
(1,24)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HG2	2	11.97
(1,158)	1:7:A:LYS:HD2	1:11:A:TRP:HB2	2	11.96
(1,158)	1:7:A:LYS:HD2	1:11:A:TRP:HB3	2	11.96
(1,158)	1:7:A:LYS:HD3	1:11:A:TRP:HB2	2	11.96
(1,158)	1:7:A:LYS:HD3	1:11:A:TRP:HB3	2	11.96
(1,38)	1:7:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:H	3	11.96
(1,38)	1:7:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:H	3	11.96
(1,274)	1:5:A:LYS:HB2	1:12:A:ARG:HE	9	11.95
(1,274)	1:5:A:LYS:HB3	1:12:A:ARG:HE	9	11.95
(1,126)	1:5:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:H	11	11.95
(1,250)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:H	6	11.94
(1,222)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:HB2	4	11.94
(1,222)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:HB3	4	11.94
(1,222)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:HB2	4	11.94
(1,222)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:HB3	4	11.94
(1,98)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:H	6	11.94
(1,264)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:HA	19	11.92
(1,264)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:HA	19	11.92
(1,225)	1:7:A:LYS:HB2	1:12:A:ARG:H	11	11.92
(1,225)	1:7:A:LYS:HB3	1:12:A:ARG:H	11	11.92
(1,146)	1:6:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:H	2	11.92
(1,38)	1:7:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:H	1	11.92
(1,38)	1:7:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:H	1	11.92
(1,196)	1:3:A:PRO:HA	1:6:A:TRP:HB3	3	11.91
(1,179)	1:3:A:PRO:HA	1:12:A:ARG:HD2	17	11.91
(1,179)	1:3:A:PRO:HA	1:12:A:ARG:HD3	17	11.91
(1,167)	1:5:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB2	10	11.91
(1,74)	1:9:A:THR:HG21	1:13:A:ARG:HE	18	11.91
(1,74)	1:9:A:THR:HG22	1:13:A:ARG:HE	18	11.91
(1,74)	1:9:A:THR:HG23	1:13:A:ARG:HE	18	11.91
(1,256)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	3	11.9
(1,251)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	3	11.9
(1,100)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	3	11.9
(1,72)	1:7:A:LYS:HE2	1:13:A:ARG:HE	17	11.9
(1,72)	1:7:A:LYS:HE3	1:13:A:ARG:HE	17	11.9
(1,216)	1:4:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB2	19	11.89
(1,216)	1:4:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB3	19	11.89
(1,203)	1:1:A:ILE:HG21	1:7:A:LYS:HE2	15	11.89
(1,203)	1:1:A:ILE:HG21	1:7:A:LYS:HE3	15	11.89

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,203)	1:1:A:ILE:HG22	1:7:A:LYS:HE2	15	11.89
(1,203)	1:1:A:ILE:HG22	1:7:A:LYS:HE3	15	11.89
(1,203)	1:1:A:ILE:HG23	1:7:A:LYS:HE2	15	11.89
(1,203)	1:1:A:ILE:HG23	1:7:A:LYS:HE3	15	11.89
(1,250)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:H	13	11.88
(1,130)	1:9:A:THR:HB	1:12:A:ARG:HE	19	11.88
(1,98)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:H	13	11.88
(1,265)	1:2:A:LEU:HB3	1:7:A:LYS:HA	1	11.87
(1,130)	1:9:A:THR:HB	1:12:A:ARG:HE	12	11.87
(1,150)	1:8:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	5	11.86
(1,286)	1:1:A:ILE:HG21	1:5:A:LYS:HA	20	11.85
(1,286)	1:1:A:ILE:HG22	1:5:A:LYS:HA	20	11.85
(1,286)	1:1:A:ILE:HG23	1:5:A:LYS:HA	20	11.85
(1,225)	1:7:A:LYS:HB2	1:12:A:ARG:H	8	11.85
(1,225)	1:7:A:LYS:HB3	1:12:A:ARG:H	8	11.85
(1,74)	1:9:A:THR:HG21	1:13:A:ARG:HE	13	11.84
(1,74)	1:9:A:THR:HG22	1:13:A:ARG:HE	13	11.84
(1,74)	1:9:A:THR:HG23	1:13:A:ARG:HE	13	11.84
(1,24)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HG2	11	11.84
(1,284)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HE	19	11.83
(1,284)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HE	19	11.83
(1,284)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HE	19	11.83
(1,141)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HE	19	11.83
(1,141)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HE	19	11.83
(1,141)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HE	19	11.83
(1,38)	1:7:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:H	15	11.83
(1,38)	1:7:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:H	15	11.83
(1,172)	1:5:A:LYS:HE2	1:8:A:TRP:H	2	11.81
(1,172)	1:5:A:LYS:HE3	1:8:A:TRP:H	2	11.81
(1,126)	1:5:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:H	16	11.81
(1,242)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HD2	12	11.8
(1,242)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HD3	12	11.8
(1,58)	1:5:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HD2	6	11.8
(1,58)	1:5:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HD3	6	11.8
(1,299)	1:1:A:ILE:HG21	1:6:A:TRP:HB3	10	11.79
(1,299)	1:1:A:ILE:HG22	1:6:A:TRP:HB3	10	11.79
(1,299)	1:1:A:ILE:HG23	1:6:A:TRP:HB3	10	11.79
(1,202)	1:1:A:ILE:HG21	1:6:A:TRP:HB3	10	11.79
(1,202)	1:1:A:ILE:HG22	1:6:A:TRP:HB3	10	11.79
(1,202)	1:1:A:ILE:HG23	1:6:A:TRP:HB3	10	11.79
(1,22)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HB2	3	11.79
(1,22)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HB3	3	11.79

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,167)	1:5:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB2	2	11.78
(1,165)	1:3:A:PRO:HA	1:6:A:TRP:HB2	20	11.78
(1,61)	1:1:A:ILE:HG21	1:5:A:LYS:H	3	11.78
(1,61)	1:1:A:ILE:HG22	1:5:A:LYS:H	3	11.78
(1,61)	1:1:A:ILE:HG23	1:5:A:LYS:H	3	11.78
(1,309)	1:2:A:LEU:HD11	1:7:A:LYS:HA	15	11.77
(1,309)	1:2:A:LEU:HD12	1:7:A:LYS:HA	15	11.77
(1,309)	1:2:A:LEU:HD13	1:7:A:LYS:HA	15	11.77
(1,309)	1:2:A:LEU:HD21	1:7:A:LYS:HA	15	11.77
(1,309)	1:2:A:LEU:HD22	1:7:A:LYS:HA	15	11.77
(1,309)	1:2:A:LEU:HD23	1:7:A:LYS:HA	15	11.77
(1,165)	1:3:A:PRO:HA	1:6:A:TRP:HB2	13	11.76
(1,38)	1:7:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:H	4	11.76
(1,38)	1:7:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:H	4	11.76
(1,22)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HB2	10	11.76
(1,22)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HB3	10	11.76
(1,20)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:H	14	11.76
(1,171)	1:8:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD2	2	11.75
(1,171)	1:8:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD3	2	11.75
(1,122)	1:8:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HE	11	11.75
(1,102)	1:1:A:ILE:HG21	1:6:A:TRP:H	12	11.75
(1,102)	1:1:A:ILE:HG22	1:6:A:TRP:H	12	11.75
(1,102)	1:1:A:ILE:HG23	1:6:A:TRP:H	12	11.75
(1,131)	1:7:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:HE	3	11.74
(1,131)	1:7:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:HE	3	11.74
(1,13)	1:2:A:LEU:H	1:7:A:LYS:HD2	10	11.74
(1,13)	1:2:A:LEU:H	1:7:A:LYS:HD3	10	11.74
(1,130)	1:9:A:THR:HB	1:12:A:ARG:HE	5	11.73
(1,74)	1:9:A:THR:HG21	1:13:A:ARG:HE	1	11.73
(1,74)	1:9:A:THR:HG22	1:13:A:ARG:HE	1	11.73
(1,74)	1:9:A:THR:HG23	1:13:A:ARG:HE	1	11.73
(1,35)	1:7:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:H	11	11.73
(1,35)	1:7:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:H	11	11.73
(1,265)	1:2:A:LEU:HB3	1:7:A:LYS:HA	8	11.72
(1,226)	1:2:A:LEU:HB2	1:6:A:TRP:HB2	15	11.72
(1,194)	1:7:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:HA	2	11.72
(1,194)	1:7:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:HA	2	11.72
(1,173)	1:8:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HD2	15	11.72
(1,173)	1:8:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HD3	15	11.72
(1,214)	1:6:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB2	5	11.7
(1,214)	1:6:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB3	5	11.7
(1,209)	1:5:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB2	2	11.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,209)	1:5:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB3	2	11.7
(1,196)	1:3:A:PRO:HA	1:6:A:TRP:HB3	11	11.7
(1,24)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HG2	17	11.7
(1,225)	1:7:A:LYS:HB2	1:12:A:ARG:H	5	11.69
(1,225)	1:7:A:LYS:HB3	1:12:A:ARG:H	5	11.69
(1,196)	1:3:A:PRO:HA	1:6:A:TRP:HB3	12	11.69
(1,102)	1:1:A:ILE:HG21	1:6:A:TRP:H	11	11.69
(1,102)	1:1:A:ILE:HG22	1:6:A:TRP:H	11	11.69
(1,102)	1:1:A:ILE:HG23	1:6:A:TRP:H	11	11.69
(1,299)	1:1:A:ILE:HG21	1:6:A:TRP:HB3	8	11.68
(1,299)	1:1:A:ILE:HG22	1:6:A:TRP:HB3	8	11.68
(1,299)	1:1:A:ILE:HG23	1:6:A:TRP:HB3	8	11.68
(1,202)	1:1:A:ILE:HG21	1:6:A:TRP:HB3	8	11.68
(1,202)	1:1:A:ILE:HG22	1:6:A:TRP:HB3	8	11.68
(1,202)	1:1:A:ILE:HG23	1:6:A:TRP:HB3	8	11.68
(1,309)	1:2:A:LEU:HD11	1:7:A:LYS:HA	6	11.67
(1,309)	1:2:A:LEU:HD12	1:7:A:LYS:HA	6	11.67
(1,309)	1:2:A:LEU:HD13	1:7:A:LYS:HA	6	11.67
(1,309)	1:2:A:LEU:HD21	1:7:A:LYS:HA	6	11.67
(1,309)	1:2:A:LEU:HD22	1:7:A:LYS:HA	6	11.67
(1,309)	1:2:A:LEU:HD23	1:7:A:LYS:HA	6	11.67
(1,130)	1:9:A:THR:HB	1:12:A:ARG:HE	3	11.67
(1,127)	1:7:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HE	2	11.67
(1,299)	1:1:A:ILE:HG21	1:6:A:TRP:HB3	4	11.66
(1,299)	1:1:A:ILE:HG22	1:6:A:TRP:HB3	4	11.66
(1,299)	1:1:A:ILE:HG23	1:6:A:TRP:HB3	4	11.66
(1,284)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HE	12	11.66
(1,284)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HE	12	11.66
(1,284)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HE	12	11.66
(1,202)	1:1:A:ILE:HG21	1:6:A:TRP:HB3	4	11.66
(1,202)	1:1:A:ILE:HG22	1:6:A:TRP:HB3	4	11.66
(1,202)	1:1:A:ILE:HG23	1:6:A:TRP:HB3	4	11.66
(1,141)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HE	12	11.66
(1,141)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HE	12	11.66
(1,141)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HE	12	11.66
(1,128)	1:7:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:H	8	11.65
(1,289)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HA	6	11.63
(1,289)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HA	6	11.63
(1,203)	1:1:A:ILE:HG21	1:7:A:LYS:HE2	14	11.63
(1,203)	1:1:A:ILE:HG21	1:7:A:LYS:HE3	14	11.63
(1,203)	1:1:A:ILE:HG22	1:7:A:LYS:HE2	14	11.63
(1,203)	1:1:A:ILE:HG22	1:7:A:LYS:HE3	14	11.63

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,203)	1:1:A:ILE:HG23	1:7:A:LYS:HE2	14	11.63
(1,203)	1:1:A:ILE:HG23	1:7:A:LYS:HE3	14	11.63
(1,130)	1:9:A:THR:HB	1:12:A:ARG:HE	10	11.63
(1,102)	1:1:A:ILE:HG21	1:6:A:TRP:H	18	11.62
(1,102)	1:1:A:ILE:HG22	1:6:A:TRP:H	18	11.62
(1,102)	1:1:A:ILE:HG23	1:6:A:TRP:H	18	11.62
(1,72)	1:7:A:LYS:HE2	1:13:A:ARG:HE	15	11.62
(1,72)	1:7:A:LYS:HE3	1:13:A:ARG:HE	15	11.62
(1,265)	1:2:A:LEU:HB3	1:7:A:LYS:HA	14	11.61
(1,209)	1:5:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB2	20	11.61
(1,209)	1:5:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB3	20	11.61
(1,165)	1:3:A:PRO:HA	1:6:A:TRP:HB2	18	11.61
(1,38)	1:7:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:H	9	11.61
(1,38)	1:7:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:H	9	11.61
(1,74)	1:9:A:THR:HG21	1:13:A:ARG:HE	4	11.6
(1,74)	1:9:A:THR:HG22	1:13:A:ARG:HE	4	11.6
(1,74)	1:9:A:THR:HG23	1:13:A:ARG:HE	4	11.6
(1,242)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HD2	8	11.59
(1,242)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HD3	8	11.59
(1,196)	1:3:A:PRO:HA	1:6:A:TRP:HB3	10	11.59
(1,81)	1:6:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HB2	13	11.57
(1,81)	1:6:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HB3	13	11.57
(1,61)	1:1:A:ILE:HG21	1:5:A:LYS:H	19	11.57
(1,61)	1:1:A:ILE:HG22	1:5:A:LYS:H	19	11.57
(1,61)	1:1:A:ILE:HG23	1:5:A:LYS:H	19	11.57
(1,203)	1:1:A:ILE:HG21	1:7:A:LYS:HE2	12	11.56
(1,203)	1:1:A:ILE:HG21	1:7:A:LYS:HE3	12	11.56
(1,203)	1:1:A:ILE:HG22	1:7:A:LYS:HE2	12	11.56
(1,203)	1:1:A:ILE:HG22	1:7:A:LYS:HE3	12	11.56
(1,203)	1:1:A:ILE:HG23	1:7:A:LYS:HE2	12	11.56
(1,203)	1:1:A:ILE:HG23	1:7:A:LYS:HE3	12	11.56
(1,248)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:H	4	11.55
(1,248)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:H	4	11.55
(1,226)	1:2:A:LEU:HB2	1:6:A:TRP:HB2	13	11.55
(1,48)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:H	4	11.55
(1,48)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:H	4	11.55
(1,146)	1:6:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:H	18	11.54
(1,122)	1:8:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HE	2	11.54
(1,103)	1:6:A:TRP:H	1:9:A:THR:HG21	10	11.53
(1,103)	1:6:A:TRP:H	1:9:A:THR:HG22	10	11.53
(1,103)	1:6:A:TRP:H	1:9:A:THR:HG23	10	11.53
(1,165)	1:3:A:PRO:HA	1:6:A:TRP:HB2	15	11.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,281)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HE	14	11.51
(1,281)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HE	14	11.51
(1,225)	1:7:A:LYS:HB2	1:12:A:ARG:H	9	11.51
(1,225)	1:7:A:LYS:HB3	1:12:A:ARG:H	9	11.51
(1,171)	1:8:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD2	12	11.5
(1,171)	1:8:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD3	12	11.5
(1,150)	1:8:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	9	11.5
(1,22)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HB2	6	11.49
(1,22)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HB3	6	11.49
(1,3)	1:2:A:LEU:H	1:7:A:LYS:HA	5	11.48
(1,115)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD2	11	11.47
(1,115)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD3	11	11.47
(1,38)	1:7:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:H	16	11.47
(1,38)	1:7:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:H	16	11.47
(1,311)	1:1:A:ILE:HD11	1:12:A:ARG:HA	2	11.46
(1,311)	1:1:A:ILE:HD12	1:12:A:ARG:HA	2	11.46
(1,311)	1:1:A:ILE:HD13	1:12:A:ARG:HA	2	11.46
(1,289)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HA	15	11.46
(1,289)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HA	15	11.46
(1,289)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HA	7	11.45
(1,289)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HA	7	11.45
(1,124)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HE	15	11.45
(1,108)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE2	19	11.45
(1,108)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE3	19	11.45
(1,94)	1:6:A:TRP:H	1:10:A:PRO:HB2	17	11.45
(1,94)	1:6:A:TRP:H	1:10:A:PRO:HB3	17	11.45
(1,3)	1:2:A:LEU:H	1:7:A:LYS:HA	4	11.45
(1,312)	1:1:A:ILE:HD11	1:7:A:LYS:HA	5	11.43
(1,312)	1:1:A:ILE:HD12	1:7:A:LYS:HA	5	11.43
(1,312)	1:1:A:ILE:HD13	1:7:A:LYS:HA	5	11.43
(1,284)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HE	13	11.43
(1,284)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HE	13	11.43
(1,284)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HE	13	11.43
(1,197)	1:5:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB3	9	11.43
(1,141)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HE	13	11.43
(1,141)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HE	13	11.43
(1,141)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HE	13	11.43
(1,197)	1:5:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB3	14	11.42
(1,179)	1:3:A:PRO:HA	1:12:A:ARG:HD2	2	11.42
(1,179)	1:3:A:PRO:HA	1:12:A:ARG:HD3	2	11.42
(1,153)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:HB2	15	11.42
(1,149)	1:4:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	2	11.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,61)	1:1:A:ILE:HG21	1:5:A:LYS:H	16	11.42
(1,61)	1:1:A:ILE:HG22	1:5:A:LYS:H	16	11.42
(1,61)	1:1:A:ILE:HG23	1:5:A:LYS:H	16	11.42
(1,35)	1:7:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:H	4	11.42
(1,35)	1:7:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:H	4	11.42
(1,222)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:HB2	2	11.41
(1,222)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:HB3	2	11.41
(1,222)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:HB2	2	11.41
(1,222)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:HB3	2	11.41
(1,174)	1:5:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:H	8	11.41
(1,174)	1:5:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:H	8	11.41
(1,211)	1:1:A:ILE:HB	1:6:A:TRP:HB2	3	11.4
(1,35)	1:7:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:H	16	11.4
(1,35)	1:7:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:H	16	11.4
(1,255)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	19	11.38
(1,234)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG2	19	11.38
(1,203)	1:1:A:ILE:HG21	1:7:A:LYS:HE2	10	11.38
(1,203)	1:1:A:ILE:HG21	1:7:A:LYS:HE3	10	11.38
(1,203)	1:1:A:ILE:HG22	1:7:A:LYS:HE2	10	11.38
(1,203)	1:1:A:ILE:HG22	1:7:A:LYS:HE3	10	11.38
(1,203)	1:1:A:ILE:HG23	1:7:A:LYS:HE2	10	11.38
(1,203)	1:1:A:ILE:HG23	1:7:A:LYS:HE3	10	11.38
(1,174)	1:5:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:H	17	11.38
(1,174)	1:5:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:H	17	11.38
(1,99)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	19	11.38
(1,96)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG2	19	11.38
(1,263)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HG2	3	11.37
(1,309)	1:2:A:LEU:HD11	1:7:A:LYS:HA	16	11.36
(1,309)	1:2:A:LEU:HD12	1:7:A:LYS:HA	16	11.36
(1,309)	1:2:A:LEU:HD13	1:7:A:LYS:HA	16	11.36
(1,309)	1:2:A:LEU:HD21	1:7:A:LYS:HA	16	11.36
(1,309)	1:2:A:LEU:HD22	1:7:A:LYS:HA	16	11.36
(1,309)	1:2:A:LEU:HD23	1:7:A:LYS:HA	16	11.36
(1,197)	1:5:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB3	12	11.36
(1,171)	1:8:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD2	17	11.36
(1,171)	1:8:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD3	17	11.36
(1,9)	1:2:A:LEU:H	1:5:A:LYS:HG2	17	11.36
(1,9)	1:2:A:LEU:H	1:5:A:LYS:HG3	17	11.36
(1,265)	1:2:A:LEU:HB3	1:7:A:LYS:HA	9	11.35
(1,4)	1:2:A:LEU:H	1:12:A:ARG:HA	11	11.35
(1,309)	1:2:A:LEU:HD11	1:7:A:LYS:HA	20	11.34
(1,309)	1:2:A:LEU:HD12	1:7:A:LYS:HA	20	11.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,309)	1:2:A:LEU:HD13	1:7:A:LYS:HA	20	11.34
(1,309)	1:2:A:LEU:HD21	1:7:A:LYS:HA	20	11.34
(1,309)	1:2:A:LEU:HD22	1:7:A:LYS:HA	20	11.34
(1,309)	1:2:A:LEU:HD23	1:7:A:LYS:HA	20	11.34
(1,273)	1:5:A:LYS:HB2	1:13:A:ARG:H	11	11.34
(1,273)	1:5:A:LYS:HB3	1:13:A:ARG:H	11	11.34
(1,213)	1:1:A:ILE:HB	1:4:A:TRP:HB2	1	11.34
(1,102)	1:1:A:ILE:HG21	1:6:A:TRP:H	13	11.34
(1,102)	1:1:A:ILE:HG22	1:6:A:TRP:H	13	11.34
(1,102)	1:1:A:ILE:HG23	1:6:A:TRP:H	13	11.34
(1,33)	1:5:A:LYS:HB2	1:13:A:ARG:H	11	11.34
(1,33)	1:5:A:LYS:HB3	1:13:A:ARG:H	11	11.34
(1,315)	1:1:A:ILE:HD11	1:6:A:TRP:HB2	17	11.33
(1,315)	1:1:A:ILE:HD12	1:6:A:TRP:HB2	17	11.33
(1,315)	1:1:A:ILE:HD13	1:6:A:TRP:HB2	17	11.33
(1,167)	1:5:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB2	6	11.33
(1,94)	1:6:A:TRP:H	1:10:A:PRO:HB2	1	11.33
(1,94)	1:6:A:TRP:H	1:10:A:PRO:HB3	1	11.33
(1,289)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HA	11	11.32
(1,289)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HA	11	11.32
(1,265)	1:2:A:LEU:HB3	1:7:A:LYS:HA	7	11.32
(1,222)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:HB2	5	11.32
(1,222)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:HB3	5	11.32
(1,222)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:HB2	5	11.32
(1,222)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:HB3	5	11.32
(1,307)	1:1:A:ILE:HD11	1:5:A:LYS:HA	20	11.31
(1,307)	1:1:A:ILE:HD12	1:5:A:LYS:HA	20	11.31
(1,307)	1:1:A:ILE:HD13	1:5:A:LYS:HA	20	11.31
(1,132)	1:7:A:LYS:HE2	1:11:A:TRP:H	12	11.31
(1,132)	1:7:A:LYS:HE3	1:11:A:TRP:H	12	11.31
(1,94)	1:6:A:TRP:H	1:10:A:PRO:HB2	7	11.31
(1,94)	1:6:A:TRP:H	1:10:A:PRO:HB3	7	11.31
(1,286)	1:1:A:ILE:HG21	1:5:A:LYS:HA	6	11.3
(1,286)	1:1:A:ILE:HG22	1:5:A:LYS:HA	6	11.3
(1,286)	1:1:A:ILE:HG23	1:5:A:LYS:HA	6	11.3
(1,286)	1:1:A:ILE:HG21	1:5:A:LYS:HA	9	11.3
(1,286)	1:1:A:ILE:HG22	1:5:A:LYS:HA	9	11.3
(1,286)	1:1:A:ILE:HG23	1:5:A:LYS:HA	9	11.3
(1,134)	1:8:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HE	1	11.3
(1,167)	1:5:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB2	9	11.29
(1,126)	1:5:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:H	18	11.29
(1,307)	1:1:A:ILE:HD11	1:5:A:LYS:HA	3	11.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,307)	1:1:A:ILE:HD12	1:5:A:LYS:HA	3	11.27
(1,307)	1:1:A:ILE:HD13	1:5:A:LYS:HA	3	11.27
(1,211)	1:1:A:ILE:HB	1:6:A:TRP:HB2	15	11.27
(1,171)	1:8:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD2	7	11.27
(1,171)	1:8:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD3	7	11.27
(1,74)	1:9:A:THR:HG21	1:13:A:ARG:HE	20	11.27
(1,74)	1:9:A:THR:HG22	1:13:A:ARG:HE	20	11.27
(1,74)	1:9:A:THR:HG23	1:13:A:ARG:HE	20	11.27
(1,61)	1:1:A:ILE:HG21	1:5:A:LYS:H	7	11.27
(1,61)	1:1:A:ILE:HG22	1:5:A:LYS:H	7	11.27
(1,61)	1:1:A:ILE:HG23	1:5:A:LYS:H	7	11.27
(1,2)	1:2:A:LEU:H	1:5:A:LYS:HA	16	11.27
(1,171)	1:8:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD2	20	11.26
(1,171)	1:8:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD3	20	11.26
(1,128)	1:7:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:H	17	11.26
(1,110)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:HB2	12	11.26
(1,307)	1:1:A:ILE:HD11	1:5:A:LYS:HA	14	11.25
(1,307)	1:1:A:ILE:HD12	1:5:A:LYS:HA	14	11.25
(1,307)	1:1:A:ILE:HD13	1:5:A:LYS:HA	14	11.25
(1,167)	1:5:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB2	15	11.25
(1,93)	1:1:A:ILE:HB	1:6:A:TRP:H	11	11.25
(1,35)	1:7:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:H	3	11.25
(1,35)	1:7:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:H	3	11.25
(1,108)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE2	9	11.24
(1,108)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE3	9	11.24
(1,35)	1:7:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:H	1	11.24
(1,35)	1:7:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:H	1	11.24
(1,4)	1:2:A:LEU:H	1:12:A:ARG:HA	2	11.24
(1,225)	1:7:A:LYS:HB2	1:12:A:ARG:H	20	11.23
(1,225)	1:7:A:LYS:HB3	1:12:A:ARG:H	20	11.23
(1,110)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:HB2	11	11.23
(1,319)	1:1:A:ILE:HD11	1:7:A:LYS:HD2	2	11.22
(1,319)	1:1:A:ILE:HD11	1:7:A:LYS:HD3	2	11.22
(1,319)	1:1:A:ILE:HD12	1:7:A:LYS:HD2	2	11.22
(1,319)	1:1:A:ILE:HD12	1:7:A:LYS:HD3	2	11.22
(1,319)	1:1:A:ILE:HD13	1:7:A:LYS:HD2	2	11.22
(1,319)	1:1:A:ILE:HD13	1:7:A:LYS:HD3	2	11.22
(1,171)	1:8:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD2	1	11.22
(1,171)	1:8:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD3	1	11.22
(1,94)	1:6:A:TRP:H	1:10:A:PRO:HB2	16	11.22
(1,94)	1:6:A:TRP:H	1:10:A:PRO:HB3	16	11.22
(1,286)	1:1:A:ILE:HG21	1:5:A:LYS:HA	15	11.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,286)	1:1:A:ILE:HG22	1:5:A:LYS:HA	15	11.2
(1,286)	1:1:A:ILE:HG23	1:5:A:LYS:HA	15	11.2
(1,213)	1:1:A:ILE:HB	1:4:A:TRP:HB2	3	11.2
(1,158)	1:7:A:LYS:HD2	1:11:A:TRP:HB2	11	11.2
(1,158)	1:7:A:LYS:HD2	1:11:A:TRP:HB3	11	11.2
(1,158)	1:7:A:LYS:HD3	1:11:A:TRP:HB2	11	11.2
(1,158)	1:7:A:LYS:HD3	1:11:A:TRP:HB3	11	11.2
(1,265)	1:2:A:LEU:HB3	1:7:A:LYS:HA	4	11.19
(1,165)	1:3:A:PRO:HA	1:6:A:TRP:HB2	16	11.19
(1,283)	1:5:A:LYS:HG2	1:11:A:TRP:H	8	11.18
(1,283)	1:5:A:LYS:HG3	1:11:A:TRP:H	8	11.18
(1,242)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HD2	5	11.18
(1,242)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HD3	5	11.18
(1,142)	1:5:A:LYS:HG2	1:11:A:TRP:H	8	11.18
(1,142)	1:5:A:LYS:HG3	1:11:A:TRP:H	8	11.18
(1,22)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HB2	15	11.18
(1,22)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HB3	15	11.18
(1,244)	1:7:A:LYS:HD2	1:10:A:PRO:HB2	18	11.16
(1,244)	1:7:A:LYS:HD2	1:10:A:PRO:HB3	18	11.16
(1,244)	1:7:A:LYS:HD3	1:10:A:PRO:HB2	18	11.16
(1,244)	1:7:A:LYS:HD3	1:10:A:PRO:HB3	18	11.16
(1,311)	1:1:A:ILE:HD11	1:12:A:ARG:HA	11	11.15
(1,311)	1:1:A:ILE:HD12	1:12:A:ARG:HA	11	11.15
(1,311)	1:1:A:ILE:HD13	1:12:A:ARG:HA	11	11.15
(1,286)	1:1:A:ILE:HG21	1:5:A:LYS:HA	19	11.15
(1,286)	1:1:A:ILE:HG22	1:5:A:LYS:HA	19	11.15
(1,286)	1:1:A:ILE:HG23	1:5:A:LYS:HA	19	11.15
(1,225)	1:7:A:LYS:HB2	1:12:A:ARG:H	16	11.15
(1,225)	1:7:A:LYS:HB3	1:12:A:ARG:H	16	11.15
(1,134)	1:8:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HE	11	11.15
(1,256)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	15	11.13
(1,251)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	15	11.13
(1,226)	1:2:A:LEU:HB2	1:6:A:TRP:HB2	11	11.13
(1,113)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD2	2	11.13
(1,113)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD3	2	11.13
(1,100)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	15	11.13
(1,286)	1:1:A:ILE:HG21	1:5:A:LYS:HA	5	11.12
(1,286)	1:1:A:ILE:HG22	1:5:A:LYS:HA	5	11.12
(1,286)	1:1:A:ILE:HG23	1:5:A:LYS:HA	5	11.12
(1,250)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:H	20	11.12
(1,98)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:H	20	11.12
(1,139)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HE	4	11.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,139)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HE	4	11.11
(1,222)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:HB2	16	11.1
(1,222)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:HB3	16	11.1
(1,222)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:HB2	16	11.1
(1,222)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:HB3	16	11.1
(1,2)	1:2:A:LEU:H	1:5:A:LYS:HA	3	11.1
(1,250)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:H	1	11.09
(1,172)	1:5:A:LYS:HE2	1:8:A:TRP:H	10	11.09
(1,172)	1:5:A:LYS:HE3	1:8:A:TRP:H	10	11.09
(1,98)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:H	1	11.09
(1,58)	1:5:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HD2	7	11.07
(1,58)	1:5:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HD3	7	11.07
(1,264)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:HA	2	11.05
(1,264)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:HA	2	11.05
(1,216)	1:4:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB2	15	11.05
(1,216)	1:4:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB3	15	11.05
(1,194)	1:7:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:HA	15	11.05
(1,194)	1:7:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:HA	15	11.05
(1,135)	1:5:A:LYS:HB2	1:12:A:ARG:HE	5	11.05
(1,135)	1:5:A:LYS:HB3	1:12:A:ARG:HE	5	11.05
(1,93)	1:1:A:ILE:HB	1:6:A:TRP:H	12	11.04
(1,126)	1:5:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:H	17	11.03
(1,102)	1:1:A:ILE:HG21	1:6:A:TRP:H	14	11.03
(1,102)	1:1:A:ILE:HG22	1:6:A:TRP:H	14	11.03
(1,102)	1:1:A:ILE:HG23	1:6:A:TRP:H	14	11.03
(1,275)	1:5:A:LYS:HB2	1:11:A:TRP:H	19	11.01
(1,275)	1:5:A:LYS:HB3	1:11:A:TRP:H	19	11.01
(1,136)	1:5:A:LYS:HB2	1:11:A:TRP:H	19	11.01
(1,136)	1:5:A:LYS:HB3	1:11:A:TRP:H	19	11.01
(1,264)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:HA	1	11.0
(1,264)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:HA	1	11.0
(1,236)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HB2	4	10.97
(1,236)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HB3	4	10.97
(1,194)	1:7:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:HA	19	10.97
(1,194)	1:7:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:HA	19	10.97
(1,319)	1:1:A:ILE:HD11	1:7:A:LYS:HD2	15	10.96
(1,319)	1:1:A:ILE:HD11	1:7:A:LYS:HD3	15	10.96
(1,319)	1:1:A:ILE:HD12	1:7:A:LYS:HD2	15	10.96
(1,319)	1:1:A:ILE:HD12	1:7:A:LYS:HD3	15	10.96
(1,319)	1:1:A:ILE:HD13	1:7:A:LYS:HD2	15	10.96
(1,319)	1:1:A:ILE:HD13	1:7:A:LYS:HD3	15	10.96
(1,310)	1:2:A:LEU:HD11	1:12:A:ARG:HA	11	10.96

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,310)	1:2:A:LEU:HD12	1:12:A:ARG:HA	11	10.96
(1,310)	1:2:A:LEU:HD13	1:12:A:ARG:HA	11	10.96
(1,310)	1:2:A:LEU:HD21	1:12:A:ARG:HA	11	10.96
(1,310)	1:2:A:LEU:HD22	1:12:A:ARG:HA	11	10.96
(1,310)	1:2:A:LEU:HD23	1:12:A:ARG:HA	11	10.96
(1,211)	1:1:A:ILE:HB	1:6:A:TRP:HB2	4	10.96
(1,286)	1:1:A:ILE:HG21	1:5:A:LYS:HA	2	10.95
(1,286)	1:1:A:ILE:HG22	1:5:A:LYS:HA	2	10.95
(1,286)	1:1:A:ILE:HG23	1:5:A:LYS:HA	2	10.95
(1,35)	1:7:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:H	2	10.95
(1,35)	1:7:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:H	2	10.95
(1,2)	1:2:A:LEU:H	1:5:A:LYS:HA	1	10.95
(1,2)	1:2:A:LEU:H	1:5:A:LYS:HA	7	10.95
(1,216)	1:4:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB2	10	10.94
(1,216)	1:4:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB3	10	10.94
(1,236)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HB2	2	10.93
(1,236)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HB3	2	10.93
(1,55)	1:5:A:LYS:H	1:11:A:TRP:HB2	11	10.93
(1,55)	1:5:A:LYS:H	1:11:A:TRP:HB3	11	10.93
(1,319)	1:1:A:ILE:HD11	1:7:A:LYS:HD2	17	10.92
(1,319)	1:1:A:ILE:HD11	1:7:A:LYS:HD3	17	10.92
(1,319)	1:1:A:ILE:HD12	1:7:A:LYS:HD2	17	10.92
(1,319)	1:1:A:ILE:HD12	1:7:A:LYS:HD3	17	10.92
(1,319)	1:1:A:ILE:HD13	1:7:A:LYS:HD2	17	10.92
(1,319)	1:1:A:ILE:HD13	1:7:A:LYS:HD3	17	10.92
(1,222)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:HB2	1	10.92
(1,222)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:HB3	1	10.92
(1,222)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:HB2	1	10.92
(1,222)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:HB3	1	10.92
(1,316)	1:1:A:ILE:HD11	1:4:A:TRP:HB2	3	10.91
(1,316)	1:1:A:ILE:HD12	1:4:A:TRP:HB2	3	10.91
(1,316)	1:1:A:ILE:HD13	1:4:A:TRP:HB2	3	10.91
(1,209)	1:5:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB2	18	10.91
(1,209)	1:5:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB3	18	10.91
(1,150)	1:8:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	8	10.91
(1,13)	1:2:A:LEU:H	1:7:A:LYS:HD2	17	10.91
(1,13)	1:2:A:LEU:H	1:7:A:LYS:HD3	17	10.91
(1,295)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD2	13	10.9
(1,295)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD3	13	10.9
(1,295)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD2	13	10.9
(1,295)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD3	13	10.9
(1,121)	1:8:A:TRP:H	1:11:A:TRP:H	14	10.9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,102)	1:1:A:ILE:HG21	1:6:A:TRP:H	4	10.9
(1,102)	1:1:A:ILE:HG22	1:6:A:TRP:H	4	10.9
(1,102)	1:1:A:ILE:HG23	1:6:A:TRP:H	4	10.9
(1,93)	1:1:A:ILE:HB	1:6:A:TRP:H	13	10.89
(1,93)	1:1:A:ILE:HB	1:6:A:TRP:H	18	10.89
(1,213)	1:1:A:ILE:HB	1:4:A:TRP:HB2	2	10.88
(1,211)	1:1:A:ILE:HB	1:6:A:TRP:HB2	14	10.88
(1,122)	1:8:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HE	15	10.88
(1,55)	1:5:A:LYS:H	1:11:A:TRP:HB2	7	10.88
(1,55)	1:5:A:LYS:H	1:11:A:TRP:HB3	7	10.88
(1,250)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:H	11	10.87
(1,98)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:H	11	10.87
(1,315)	1:1:A:ILE:HD11	1:6:A:TRP:HB2	6	10.86
(1,315)	1:1:A:ILE:HD12	1:6:A:TRP:HB2	6	10.86
(1,315)	1:1:A:ILE:HD13	1:6:A:TRP:HB2	6	10.86
(1,197)	1:5:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB3	4	10.85
(1,197)	1:5:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB3	15	10.85
(1,309)	1:2:A:LEU:HD11	1:7:A:LYS:HA	17	10.84
(1,309)	1:2:A:LEU:HD12	1:7:A:LYS:HA	17	10.84
(1,309)	1:2:A:LEU:HD13	1:7:A:LYS:HA	17	10.84
(1,309)	1:2:A:LEU:HD21	1:7:A:LYS:HA	17	10.84
(1,309)	1:2:A:LEU:HD22	1:7:A:LYS:HA	17	10.84
(1,309)	1:2:A:LEU:HD23	1:7:A:LYS:HA	17	10.84
(1,9)	1:2:A:LEU:H	1:5:A:LYS:HG2	7	10.84
(1,9)	1:2:A:LEU:H	1:5:A:LYS:HG3	7	10.84
(1,197)	1:5:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB3	6	10.83
(1,127)	1:7:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HE	20	10.83
(1,166)	1:5:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:HB2	6	10.82
(1,166)	1:5:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:HB3	6	10.82
(1,165)	1:3:A:PRO:HA	1:6:A:TRP:HB2	1	10.82
(1,201)	1:5:A:LYS:HG2	1:7:A:LYS:HE2	5	10.81
(1,201)	1:5:A:LYS:HG2	1:7:A:LYS:HE3	5	10.81
(1,201)	1:5:A:LYS:HG3	1:7:A:LYS:HE2	5	10.81
(1,201)	1:5:A:LYS:HG3	1:7:A:LYS:HE3	5	10.81
(1,176)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HD2	7	10.81
(1,176)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HD3	7	10.81
(1,260)	1:2:A:LEU:HB3	1:5:A:LYS:HA	3	10.8
(1,203)	1:1:A:ILE:HG21	1:7:A:LYS:HE2	17	10.8
(1,203)	1:1:A:ILE:HG21	1:7:A:LYS:HE3	17	10.8
(1,203)	1:1:A:ILE:HG22	1:7:A:LYS:HE2	17	10.8
(1,203)	1:1:A:ILE:HG22	1:7:A:LYS:HE3	17	10.8
(1,203)	1:1:A:ILE:HG23	1:7:A:LYS:HE2	17	10.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,203)	1:1:A:ILE:HG23	1:7:A:LYS:HE3	17	10.8
(1,248)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:H	16	10.79
(1,248)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:H	16	10.79
(1,222)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:HB2	11	10.79
(1,222)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:HB3	11	10.79
(1,222)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:HB2	11	10.79
(1,222)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:HB3	11	10.79
(1,48)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:H	16	10.79
(1,48)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:H	16	10.79
(1,283)	1:5:A:LYS:HG2	1:11:A:TRP:H	16	10.78
(1,283)	1:5:A:LYS:HG3	1:11:A:TRP:H	16	10.78
(1,275)	1:5:A:LYS:HB2	1:11:A:TRP:H	16	10.78
(1,275)	1:5:A:LYS:HB3	1:11:A:TRP:H	16	10.78
(1,142)	1:5:A:LYS:HG2	1:11:A:TRP:H	16	10.78
(1,142)	1:5:A:LYS:HG3	1:11:A:TRP:H	16	10.78
(1,136)	1:5:A:LYS:HB2	1:11:A:TRP:H	16	10.78
(1,136)	1:5:A:LYS:HB3	1:11:A:TRP:H	16	10.78
(1,130)	1:9:A:THR:HB	1:12:A:ARG:HE	8	10.78
(1,128)	1:7:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:H	7	10.78
(1,108)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE2	20	10.78
(1,108)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE3	20	10.78
(1,35)	1:7:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:H	17	10.78
(1,35)	1:7:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:H	17	10.78
(1,197)	1:5:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB3	13	10.77
(1,158)	1:7:A:LYS:HD2	1:11:A:TRP:HB2	9	10.77
(1,158)	1:7:A:LYS:HD2	1:11:A:TRP:HB3	9	10.77
(1,158)	1:7:A:LYS:HD3	1:11:A:TRP:HB2	9	10.77
(1,158)	1:7:A:LYS:HD3	1:11:A:TRP:HB3	9	10.77
(1,112)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:HB3	19	10.77
(1,107)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:HB3	19	10.77
(1,297)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD2	19	10.76
(1,297)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD3	19	10.76
(1,297)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD2	19	10.76
(1,297)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD3	19	10.76
(1,297)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD2	19	10.76
(1,297)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD3	19	10.76
(1,213)	1:1:A:ILE:HB	1:4:A:TRP:HB2	8	10.76
(1,182)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD2	19	10.76
(1,182)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD3	19	10.76
(1,182)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD2	19	10.76
(1,182)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD3	19	10.76
(1,182)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD2	19	10.76

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,182)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD3	19	10.76
(1,309)	1:2:A:LEU:HD11	1:7:A:LYS:HA	1	10.75
(1,309)	1:2:A:LEU:HD12	1:7:A:LYS:HA	1	10.75
(1,309)	1:2:A:LEU:HD13	1:7:A:LYS:HA	1	10.75
(1,309)	1:2:A:LEU:HD21	1:7:A:LYS:HA	1	10.75
(1,309)	1:2:A:LEU:HD22	1:7:A:LYS:HA	1	10.75
(1,309)	1:2:A:LEU:HD23	1:7:A:LYS:HA	1	10.75
(1,103)	1:6:A:TRP:H	1:9:A:THR:HG21	4	10.74
(1,103)	1:6:A:TRP:H	1:9:A:THR:HG22	4	10.74
(1,103)	1:6:A:TRP:H	1:9:A:THR:HG23	4	10.74
(1,78)	1:6:A:TRP:HB2	1:9:A:THR:H	8	10.74
(1,69)	1:6:A:TRP:HB2	1:9:A:THR:H	8	10.74
(1,55)	1:5:A:LYS:H	1:11:A:TRP:HB2	18	10.74
(1,55)	1:5:A:LYS:H	1:11:A:TRP:HB3	18	10.74
(1,283)	1:5:A:LYS:HG2	1:11:A:TRP:H	11	10.73
(1,283)	1:5:A:LYS:HG3	1:11:A:TRP:H	11	10.73
(1,142)	1:5:A:LYS:HG2	1:11:A:TRP:H	11	10.73
(1,142)	1:5:A:LYS:HG3	1:11:A:TRP:H	11	10.73
(1,2)	1:2:A:LEU:H	1:5:A:LYS:HA	4	10.73
(1,148)	1:8:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:H	18	10.72
(1,131)	1:7:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:HE	4	10.72
(1,131)	1:7:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:HE	4	10.72
(1,108)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE2	8	10.72
(1,108)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE3	8	10.72
(1,102)	1:1:A:ILE:HG21	1:6:A:TRP:H	8	10.72
(1,102)	1:1:A:ILE:HG22	1:6:A:TRP:H	8	10.72
(1,102)	1:1:A:ILE:HG23	1:6:A:TRP:H	8	10.72
(1,315)	1:1:A:ILE:HD11	1:6:A:TRP:HB2	7	10.71
(1,315)	1:1:A:ILE:HD12	1:6:A:TRP:HB2	7	10.71
(1,315)	1:1:A:ILE:HD13	1:6:A:TRP:HB2	7	10.71
(1,211)	1:1:A:ILE:HB	1:6:A:TRP:HB2	19	10.71
(1,122)	1:8:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HE	20	10.71
(1,284)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HE	7	10.7
(1,284)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HE	7	10.7
(1,284)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HE	7	10.7
(1,141)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HE	7	10.7
(1,141)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HE	7	10.7
(1,141)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HE	7	10.7
(1,316)	1:1:A:ILE:HD11	1:4:A:TRP:HB2	1	10.69
(1,316)	1:1:A:ILE:HD12	1:4:A:TRP:HB2	1	10.69
(1,316)	1:1:A:ILE:HD13	1:4:A:TRP:HB2	1	10.69
(1,299)	1:1:A:ILE:HG21	1:6:A:TRP:HB3	2	10.69

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,299)	1:1:A:ILE:HG22	1:6:A:TRP:HB3	2	10.69
(1,299)	1:1:A:ILE:HG23	1:6:A:TRP:HB3	2	10.69
(1,202)	1:1:A:ILE:HG21	1:6:A:TRP:HB3	2	10.69
(1,202)	1:1:A:ILE:HG22	1:6:A:TRP:HB3	2	10.69
(1,202)	1:1:A:ILE:HG23	1:6:A:TRP:HB3	2	10.69
(1,10)	1:2:A:LEU:H	1:6:A:TRP:HB2	12	10.69
(1,244)	1:7:A:LYS:HD2	1:10:A:PRO:HB2	7	10.68
(1,244)	1:7:A:LYS:HD2	1:10:A:PRO:HB3	7	10.68
(1,244)	1:7:A:LYS:HD3	1:10:A:PRO:HB2	7	10.68
(1,244)	1:7:A:LYS:HD3	1:10:A:PRO:HB3	7	10.68
(1,319)	1:1:A:ILE:HD11	1:7:A:LYS:HD2	9	10.67
(1,319)	1:1:A:ILE:HD11	1:7:A:LYS:HD3	9	10.67
(1,319)	1:1:A:ILE:HD12	1:7:A:LYS:HD2	9	10.67
(1,319)	1:1:A:ILE:HD12	1:7:A:LYS:HD3	9	10.67
(1,319)	1:1:A:ILE:HD13	1:7:A:LYS:HD2	9	10.67
(1,319)	1:1:A:ILE:HD13	1:7:A:LYS:HD3	9	10.67
(1,222)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:HB2	17	10.67
(1,222)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:HB3	17	10.67
(1,222)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:HB2	17	10.67
(1,222)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:HB3	17	10.67
(1,2)	1:2:A:LEU:H	1:5:A:LYS:HA	5	10.67
(1,250)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:H	16	10.66
(1,248)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:H	19	10.66
(1,248)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:H	19	10.66
(1,213)	1:1:A:ILE:HB	1:4:A:TRP:HB2	6	10.66
(1,146)	1:6:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:H	12	10.66
(1,110)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:HB2	10	10.66
(1,98)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:H	16	10.66
(1,48)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:H	19	10.66
(1,48)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:H	19	10.66
(1,20)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:H	15	10.66
(1,309)	1:2:A:LEU:HD11	1:7:A:LYS:HA	3	10.65
(1,309)	1:2:A:LEU:HD12	1:7:A:LYS:HA	3	10.65
(1,309)	1:2:A:LEU:HD13	1:7:A:LYS:HA	3	10.65
(1,309)	1:2:A:LEU:HD21	1:7:A:LYS:HA	3	10.65
(1,309)	1:2:A:LEU:HD22	1:7:A:LYS:HA	3	10.65
(1,309)	1:2:A:LEU:HD23	1:7:A:LYS:HA	3	10.65
(1,273)	1:5:A:LYS:HB2	1:13:A:ARG:H	18	10.65
(1,273)	1:5:A:LYS:HB3	1:13:A:ARG:H	18	10.65
(1,194)	1:7:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:HA	16	10.65
(1,194)	1:7:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:HA	16	10.65
(1,128)	1:7:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:H	11	10.65

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,33)	1:5:A:LYS:HB2	1:13:A:ARG:H	18	10.65
(1,33)	1:5:A:LYS:HB3	1:13:A:ARG:H	18	10.65
(1,226)	1:2:A:LEU:HB2	1:6:A:TRP:HB2	3	10.64
(1,205)	1:1:A:ILE:HB	1:5:A:LYS:HA	20	10.64
(1,52)	1:5:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HE2	18	10.63
(1,52)	1:5:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HE3	18	10.63
(1,20)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:H	3	10.63
(1,316)	1:1:A:ILE:HD11	1:4:A:TRP:HB2	6	10.62
(1,316)	1:1:A:ILE:HD12	1:4:A:TRP:HB2	6	10.62
(1,316)	1:1:A:ILE:HD13	1:4:A:TRP:HB2	6	10.62
(1,307)	1:1:A:ILE:HD11	1:5:A:LYS:HA	2	10.62
(1,307)	1:1:A:ILE:HD12	1:5:A:LYS:HA	2	10.62
(1,307)	1:1:A:ILE:HD13	1:5:A:LYS:HA	2	10.62
(1,174)	1:5:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:H	11	10.62
(1,174)	1:5:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:H	11	10.62
(1,166)	1:5:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:HB2	15	10.62
(1,166)	1:5:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:HB3	15	10.62
(1,102)	1:1:A:ILE:HG21	1:6:A:TRP:H	7	10.62
(1,102)	1:1:A:ILE:HG22	1:6:A:TRP:H	7	10.62
(1,102)	1:1:A:ILE:HG23	1:6:A:TRP:H	7	10.62
(1,211)	1:1:A:ILE:HB	1:6:A:TRP:HB2	5	10.61
(1,148)	1:8:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:H	14	10.61
(1,284)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HE	18	10.6
(1,284)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HE	18	10.6
(1,284)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HE	18	10.6
(1,141)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HE	18	10.6
(1,141)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HE	18	10.6
(1,141)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HE	18	10.6
(1,124)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HE	17	10.6
(1,102)	1:1:A:ILE:HG21	1:6:A:TRP:H	10	10.6
(1,102)	1:1:A:ILE:HG22	1:6:A:TRP:H	10	10.6
(1,102)	1:1:A:ILE:HG23	1:6:A:TRP:H	10	10.6
(1,84)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD2	15	10.6
(1,84)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD3	15	10.6
(1,167)	1:5:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB2	13	10.59
(1,61)	1:1:A:ILE:HG21	1:5:A:LYS:H	15	10.59
(1,61)	1:1:A:ILE:HG22	1:5:A:LYS:H	15	10.59
(1,61)	1:1:A:ILE:HG23	1:5:A:LYS:H	15	10.59
(1,167)	1:5:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB2	18	10.57
(1,213)	1:1:A:ILE:HB	1:4:A:TRP:HB2	20	10.56
(1,196)	1:3:A:PRO:HA	1:6:A:TRP:HB3	8	10.56
(1,284)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HE	16	10.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,284)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HE	16	10.54
(1,284)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HE	16	10.54
(1,141)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HE	16	10.54
(1,141)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HE	16	10.54
(1,141)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HE	16	10.54
(1,103)	1:6:A:TRP:H	1:9:A:THR:HG21	14	10.54
(1,103)	1:6:A:TRP:H	1:9:A:THR:HG22	14	10.54
(1,103)	1:6:A:TRP:H	1:9:A:THR:HG23	14	10.54
(1,250)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:H	12	10.53
(1,98)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:H	12	10.53
(1,180)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD2	13	10.52
(1,180)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD3	13	10.52
(1,180)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD2	13	10.52
(1,180)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD3	13	10.52
(1,174)	1:5:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:H	6	10.51
(1,174)	1:5:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:H	6	10.51
(1,148)	1:8:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:H	1	10.51
(1,84)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD2	11	10.51
(1,84)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD3	11	10.51
(1,176)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HD2	17	10.5
(1,176)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HD3	17	10.5
(1,94)	1:6:A:TRP:H	1:10:A:PRO:HB2	11	10.49
(1,94)	1:6:A:TRP:H	1:10:A:PRO:HB3	11	10.49
(1,309)	1:2:A:LEU:HD11	1:7:A:LYS:HA	11	10.48
(1,309)	1:2:A:LEU:HD12	1:7:A:LYS:HA	11	10.48
(1,309)	1:2:A:LEU:HD13	1:7:A:LYS:HA	11	10.48
(1,309)	1:2:A:LEU:HD21	1:7:A:LYS:HA	11	10.48
(1,309)	1:2:A:LEU:HD22	1:7:A:LYS:HA	11	10.48
(1,309)	1:2:A:LEU:HD23	1:7:A:LYS:HA	11	10.48
(1,61)	1:1:A:ILE:HG21	1:5:A:LYS:H	20	10.48
(1,61)	1:1:A:ILE:HG22	1:5:A:LYS:H	20	10.48
(1,61)	1:1:A:ILE:HG23	1:5:A:LYS:H	20	10.48
(1,283)	1:5:A:LYS:HG2	1:11:A:TRP:H	4	10.47
(1,283)	1:5:A:LYS:HG3	1:11:A:TRP:H	4	10.47
(1,142)	1:5:A:LYS:HG2	1:11:A:TRP:H	4	10.47
(1,142)	1:5:A:LYS:HG3	1:11:A:TRP:H	4	10.47
(1,112)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:HB3	20	10.47
(1,110)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:HB2	13	10.47
(1,107)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:HB3	20	10.47
(1,102)	1:1:A:ILE:HG21	1:6:A:TRP:H	2	10.47
(1,102)	1:1:A:ILE:HG22	1:6:A:TRP:H	2	10.47
(1,102)	1:1:A:ILE:HG23	1:6:A:TRP:H	2	10.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,283)	1:5:A:LYS:HG2	1:11:A:TRP:H	19	10.46
(1,283)	1:5:A:LYS:HG3	1:11:A:TRP:H	19	10.46
(1,214)	1:6:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB2	20	10.46
(1,214)	1:6:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB3	20	10.46
(1,142)	1:5:A:LYS:HG2	1:11:A:TRP:H	19	10.46
(1,142)	1:5:A:LYS:HG3	1:11:A:TRP:H	19	10.46
(1,203)	1:1:A:ILE:HG21	1:7:A:LYS:HE2	2	10.45
(1,203)	1:1:A:ILE:HG21	1:7:A:LYS:HE3	2	10.45
(1,203)	1:1:A:ILE:HG22	1:7:A:LYS:HE2	2	10.45
(1,203)	1:1:A:ILE:HG22	1:7:A:LYS:HE3	2	10.45
(1,203)	1:1:A:ILE:HG23	1:7:A:LYS:HE2	2	10.45
(1,203)	1:1:A:ILE:HG23	1:7:A:LYS:HE3	2	10.45
(1,158)	1:7:A:LYS:HD2	1:11:A:TRP:HB2	3	10.45
(1,158)	1:7:A:LYS:HD2	1:11:A:TRP:HB3	3	10.45
(1,158)	1:7:A:LYS:HD3	1:11:A:TRP:HB2	3	10.45
(1,158)	1:7:A:LYS:HD3	1:11:A:TRP:HB3	3	10.45
(1,134)	1:8:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HE	20	10.45
(1,110)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:HB2	19	10.45
(1,171)	1:8:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD2	18	10.44
(1,171)	1:8:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD3	18	10.44
(1,165)	1:3:A:PRO:HA	1:6:A:TRP:HB2	3	10.44
(1,112)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:HB3	18	10.44
(1,107)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:HB3	18	10.44
(1,264)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:HA	11	10.42
(1,264)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:HA	11	10.42
(1,260)	1:2:A:LEU:HB3	1:5:A:LYS:HA	16	10.42
(1,195)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE2	18	10.42
(1,195)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE3	18	10.42
(1,128)	1:7:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:H	18	10.42
(1,94)	1:6:A:TRP:H	1:10:A:PRO:HB2	13	10.42
(1,94)	1:6:A:TRP:H	1:10:A:PRO:HB3	13	10.42
(1,61)	1:1:A:ILE:HG21	1:5:A:LYS:H	8	10.42
(1,61)	1:1:A:ILE:HG22	1:5:A:LYS:H	8	10.42
(1,61)	1:1:A:ILE:HG23	1:5:A:LYS:H	8	10.42
(1,2)	1:2:A:LEU:H	1:5:A:LYS:HA	20	10.42
(1,309)	1:2:A:LEU:HD11	1:7:A:LYS:HA	7	10.41
(1,309)	1:2:A:LEU:HD12	1:7:A:LYS:HA	7	10.41
(1,309)	1:2:A:LEU:HD13	1:7:A:LYS:HA	7	10.41
(1,309)	1:2:A:LEU:HD21	1:7:A:LYS:HA	7	10.41
(1,309)	1:2:A:LEU:HD22	1:7:A:LYS:HA	7	10.41
(1,309)	1:2:A:LEU:HD23	1:7:A:LYS:HA	7	10.41
(1,275)	1:5:A:LYS:HB2	1:11:A:TRP:H	8	10.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,275)	1:5:A:LYS:HB3	1:11:A:TRP:H	8	10.41
(1,136)	1:5:A:LYS:HB2	1:11:A:TRP:H	8	10.41
(1,136)	1:5:A:LYS:HB3	1:11:A:TRP:H	8	10.41
(1,281)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HE	4	10.4
(1,281)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HE	4	10.4
(1,244)	1:7:A:LYS:HD2	1:10:A:PRO:HB2	20	10.38
(1,244)	1:7:A:LYS:HD2	1:10:A:PRO:HB3	20	10.38
(1,244)	1:7:A:LYS:HD3	1:10:A:PRO:HB2	20	10.38
(1,244)	1:7:A:LYS:HD3	1:10:A:PRO:HB3	20	10.38
(1,135)	1:5:A:LYS:HB2	1:12:A:ARG:HE	4	10.38
(1,135)	1:5:A:LYS:HB3	1:12:A:ARG:HE	4	10.38
(1,128)	1:7:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:H	20	10.38
(1,75)	1:5:A:LYS:HG2	1:13:A:ARG:HE	19	10.38
(1,75)	1:5:A:LYS:HG3	1:13:A:ARG:HE	19	10.38
(1,9)	1:2:A:LEU:H	1:5:A:LYS:HG2	15	10.38
(1,9)	1:2:A:LEU:H	1:5:A:LYS:HG3	15	10.38
(1,286)	1:1:A:ILE:HG21	1:5:A:LYS:HA	8	10.37
(1,286)	1:1:A:ILE:HG22	1:5:A:LYS:HA	8	10.37
(1,286)	1:1:A:ILE:HG23	1:5:A:LYS:HA	8	10.37
(1,10)	1:2:A:LEU:H	1:6:A:TRP:HB2	11	10.37
(1,316)	1:1:A:ILE:HD11	1:4:A:TRP:HB2	11	10.36
(1,316)	1:1:A:ILE:HD12	1:4:A:TRP:HB2	11	10.36
(1,316)	1:1:A:ILE:HD13	1:4:A:TRP:HB2	11	10.36
(1,250)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:H	5	10.36
(1,250)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:H	18	10.36
(1,196)	1:3:A:PRO:HA	1:6:A:TRP:HB3	13	10.36
(1,127)	1:7:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HE	15	10.36
(1,115)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD2	16	10.36
(1,115)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD3	16	10.36
(1,98)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:H	5	10.36
(1,98)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:H	18	10.36
(1,275)	1:5:A:LYS:HB2	1:11:A:TRP:H	5	10.35
(1,275)	1:5:A:LYS:HB3	1:11:A:TRP:H	5	10.35
(1,171)	1:8:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD2	16	10.35
(1,171)	1:8:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD3	16	10.35
(1,167)	1:5:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB2	14	10.35
(1,136)	1:5:A:LYS:HB2	1:11:A:TRP:H	5	10.35
(1,136)	1:5:A:LYS:HB3	1:11:A:TRP:H	5	10.35
(1,9)	1:2:A:LEU:H	1:5:A:LYS:HG2	4	10.35
(1,9)	1:2:A:LEU:H	1:5:A:LYS:HG3	4	10.35
(1,264)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:HA	16	10.34
(1,264)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:HA	16	10.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,316)	1:1:A:ILE:HD11	1:4:A:TRP:HB2	4	10.33
(1,316)	1:1:A:ILE:HD12	1:4:A:TRP:HB2	4	10.33
(1,316)	1:1:A:ILE:HD13	1:4:A:TRP:HB2	4	10.33
(1,167)	1:5:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB2	12	10.33
(1,204)	1:6:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG21	10	10.32
(1,204)	1:6:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG22	10	10.32
(1,204)	1:6:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG23	10	10.32
(1,133)	1:8:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:H	18	10.32
(1,226)	1:2:A:LEU:HB2	1:6:A:TRP:HB2	1	10.31
(1,196)	1:3:A:PRO:HA	1:6:A:TRP:HB3	1	10.31
(1,153)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:HB2	13	10.31
(1,24)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HG2	6	10.31
(1,2)	1:2:A:LEU:H	1:5:A:LYS:HA	17	10.31
(1,244)	1:7:A:LYS:HD2	1:10:A:PRO:HB2	13	10.3
(1,244)	1:7:A:LYS:HD2	1:10:A:PRO:HB3	13	10.3
(1,244)	1:7:A:LYS:HD3	1:10:A:PRO:HB2	13	10.3
(1,244)	1:7:A:LYS:HD3	1:10:A:PRO:HB3	13	10.3
(1,134)	1:8:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HE	9	10.3
(1,2)	1:2:A:LEU:H	1:5:A:LYS:HA	13	10.3
(1,288)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HA	19	10.29
(1,288)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HA	19	10.29
(1,288)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HA	19	10.29
(1,2)	1:2:A:LEU:H	1:5:A:LYS:HA	12	10.29
(1,283)	1:5:A:LYS:HG2	1:11:A:TRP:H	15	10.28
(1,283)	1:5:A:LYS:HG3	1:11:A:TRP:H	15	10.28
(1,196)	1:3:A:PRO:HA	1:6:A:TRP:HB3	15	10.28
(1,142)	1:5:A:LYS:HG2	1:11:A:TRP:H	15	10.28
(1,142)	1:5:A:LYS:HG3	1:11:A:TRP:H	15	10.28
(1,102)	1:1:A:ILE:HG21	1:6:A:TRP:H	1	10.28
(1,102)	1:1:A:ILE:HG22	1:6:A:TRP:H	1	10.28
(1,102)	1:1:A:ILE:HG23	1:6:A:TRP:H	1	10.28
(1,273)	1:5:A:LYS:HB2	1:13:A:ARG:H	15	10.27
(1,273)	1:5:A:LYS:HB3	1:13:A:ARG:H	15	10.27
(1,134)	1:8:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HE	5	10.27
(1,33)	1:5:A:LYS:HB2	1:13:A:ARG:H	15	10.27
(1,33)	1:5:A:LYS:HB3	1:13:A:ARG:H	15	10.27
(1,9)	1:2:A:LEU:H	1:5:A:LYS:HG2	14	10.27
(1,9)	1:2:A:LEU:H	1:5:A:LYS:HG3	14	10.27
(1,275)	1:5:A:LYS:HB2	1:11:A:TRP:H	17	10.26
(1,275)	1:5:A:LYS:HB3	1:11:A:TRP:H	17	10.26
(1,158)	1:7:A:LYS:HD2	1:11:A:TRP:HB2	14	10.26
(1,158)	1:7:A:LYS:HD2	1:11:A:TRP:HB3	14	10.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,158)	1:7:A:LYS:HD3	1:11:A:TRP:HB2	14	10.26
(1,158)	1:7:A:LYS:HD3	1:11:A:TRP:HB3	14	10.26
(1,136)	1:5:A:LYS:HB2	1:11:A:TRP:H	17	10.26
(1,136)	1:5:A:LYS:HB3	1:11:A:TRP:H	17	10.26
(1,112)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:HB3	12	10.26
(1,107)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:HB3	12	10.26
(1,211)	1:1:A:ILE:HB	1:6:A:TRP:HB2	10	10.25
(1,197)	1:5:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB3	11	10.25
(1,9)	1:2:A:LEU:H	1:5:A:LYS:HG2	19	10.25
(1,9)	1:2:A:LEU:H	1:5:A:LYS:HG3	19	10.25
(1,284)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HE	5	10.24
(1,284)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HE	5	10.24
(1,284)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HE	5	10.24
(1,225)	1:7:A:LYS:HB2	1:12:A:ARG:H	14	10.24
(1,225)	1:7:A:LYS:HB3	1:12:A:ARG:H	14	10.24
(1,148)	1:8:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:H	7	10.24
(1,141)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HE	5	10.24
(1,141)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HE	5	10.24
(1,141)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HE	5	10.24
(1,74)	1:9:A:THR:HG21	1:13:A:ARG:HE	15	10.24
(1,74)	1:9:A:THR:HG22	1:13:A:ARG:HE	15	10.24
(1,74)	1:9:A:THR:HG23	1:13:A:ARG:HE	15	10.24
(1,72)	1:7:A:LYS:HE2	1:13:A:ARG:HE	19	10.24
(1,72)	1:7:A:LYS:HE3	1:13:A:ARG:HE	19	10.24
(1,9)	1:2:A:LEU:H	1:5:A:LYS:HG2	6	10.24
(1,9)	1:2:A:LEU:H	1:5:A:LYS:HG3	6	10.24
(1,210)	1:7:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB2	5	10.23
(1,210)	1:7:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB3	5	10.23
(1,112)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:HB3	11	10.23
(1,107)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:HB3	11	10.23
(1,3)	1:2:A:LEU:H	1:7:A:LYS:HA	2	10.23
(1,274)	1:5:A:LYS:HB2	1:12:A:ARG:HE	5	10.22
(1,274)	1:5:A:LYS:HB3	1:12:A:ARG:HE	5	10.22
(1,197)	1:5:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB3	1	10.22
(1,130)	1:9:A:THR:HB	1:12:A:ARG:HE	16	10.22
(1,128)	1:7:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:H	9	10.22
(1,115)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD2	19	10.22
(1,115)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD3	19	10.22
(1,2)	1:2:A:LEU:H	1:5:A:LYS:HA	18	10.22
(1,201)	1:5:A:LYS:HG2	1:7:A:LYS:HE2	18	10.21
(1,201)	1:5:A:LYS:HG2	1:7:A:LYS:HE3	18	10.21
(1,201)	1:5:A:LYS:HG3	1:7:A:LYS:HE2	18	10.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,201)	1:5:A:LYS:HG3	1:7:A:LYS:HE3	18	10.21
(1,10)	1:2:A:LEU:H	1:6:A:TRP:HB2	15	10.2
(1,226)	1:2:A:LEU:HB2	1:6:A:TRP:HB2	12	10.19
(1,138)	1:11:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	9	10.19
(1,244)	1:7:A:LYS:HD2	1:10:A:PRO:HB2	11	10.18
(1,244)	1:7:A:LYS:HD2	1:10:A:PRO:HB3	11	10.18
(1,244)	1:7:A:LYS:HD3	1:10:A:PRO:HB2	11	10.18
(1,244)	1:7:A:LYS:HD3	1:10:A:PRO:HB3	11	10.18
(1,132)	1:7:A:LYS:HE2	1:11:A:TRP:H	14	10.18
(1,132)	1:7:A:LYS:HE3	1:11:A:TRP:H	14	10.18
(1,110)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:HB2	15	10.18
(1,2)	1:2:A:LEU:H	1:5:A:LYS:HA	15	10.18
(1,128)	1:7:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:H	2	10.17
(1,94)	1:6:A:TRP:H	1:10:A:PRO:HB2	20	10.17
(1,94)	1:6:A:TRP:H	1:10:A:PRO:HB3	20	10.17
(1,78)	1:6:A:TRP:HB2	1:9:A:THR:H	17	10.17
(1,69)	1:6:A:TRP:HB2	1:9:A:THR:H	17	10.17
(1,225)	1:7:A:LYS:HB2	1:12:A:ARG:H	12	10.16
(1,225)	1:7:A:LYS:HB3	1:12:A:ARG:H	12	10.16
(1,174)	1:5:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:H	18	10.16
(1,174)	1:5:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:H	18	10.16
(1,316)	1:1:A:ILE:HD11	1:4:A:TRP:HB2	13	10.15
(1,316)	1:1:A:ILE:HD12	1:4:A:TRP:HB2	13	10.15
(1,316)	1:1:A:ILE:HD13	1:4:A:TRP:HB2	13	10.15
(1,260)	1:2:A:LEU:HB3	1:5:A:LYS:HA	4	10.15
(1,244)	1:7:A:LYS:HD2	1:10:A:PRO:HB2	8	10.15
(1,244)	1:7:A:LYS:HD2	1:10:A:PRO:HB3	8	10.15
(1,244)	1:7:A:LYS:HD3	1:10:A:PRO:HB2	8	10.15
(1,244)	1:7:A:LYS:HD3	1:10:A:PRO:HB3	8	10.15
(1,172)	1:5:A:LYS:HE2	1:8:A:TRP:H	1	10.15
(1,172)	1:5:A:LYS:HE3	1:8:A:TRP:H	1	10.15
(1,226)	1:2:A:LEU:HB2	1:6:A:TRP:HB2	4	10.14
(1,139)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HE	8	10.14
(1,139)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HE	8	10.14
(1,309)	1:2:A:LEU:HD11	1:7:A:LYS:HA	13	10.13
(1,309)	1:2:A:LEU:HD12	1:7:A:LYS:HA	13	10.13
(1,309)	1:2:A:LEU:HD13	1:7:A:LYS:HA	13	10.13
(1,309)	1:2:A:LEU:HD21	1:7:A:LYS:HA	13	10.13
(1,309)	1:2:A:LEU:HD22	1:7:A:LYS:HA	13	10.13
(1,309)	1:2:A:LEU:HD23	1:7:A:LYS:HA	13	10.13
(1,68)	1:11:A:TRP:HB2	1:13:A:ARG:HE	8	10.13
(1,68)	1:11:A:TRP:HB3	1:13:A:ARG:HE	8	10.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,108)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE2	17	10.12
(1,108)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE3	17	10.12
(1,74)	1:9:A:THR:HG21	1:13:A:ARG:HE	12	10.12
(1,74)	1:9:A:THR:HG22	1:13:A:ARG:HE	12	10.12
(1,74)	1:9:A:THR:HG23	1:13:A:ARG:HE	12	10.12
(1,52)	1:5:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HE2	6	10.12
(1,52)	1:5:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HE3	6	10.12
(1,9)	1:2:A:LEU:H	1:5:A:LYS:HG2	13	10.12
(1,9)	1:2:A:LEU:H	1:5:A:LYS:HG3	13	10.12
(1,165)	1:3:A:PRO:HA	1:6:A:TRP:HB2	5	10.11
(1,148)	1:8:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:H	10	10.11
(1,196)	1:3:A:PRO:HA	1:6:A:TRP:HB3	5	10.1
(1,138)	1:11:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	8	10.1
(1,244)	1:7:A:LYS:HD2	1:10:A:PRO:HB2	17	10.09
(1,244)	1:7:A:LYS:HD2	1:10:A:PRO:HB3	17	10.09
(1,244)	1:7:A:LYS:HD3	1:10:A:PRO:HB2	17	10.09
(1,244)	1:7:A:LYS:HD3	1:10:A:PRO:HB3	17	10.09
(1,152)	1:10:A:PRO:HB2	1:12:A:ARG:HE	10	10.09
(1,152)	1:10:A:PRO:HB3	1:12:A:ARG:HE	10	10.09
(1,133)	1:8:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:H	7	10.09
(1,93)	1:1:A:ILE:HB	1:6:A:TRP:H	3	10.09
(1,89)	1:3:A:PRO:HA	1:6:A:TRP:H	14	10.09
(1,307)	1:1:A:ILE:HD11	1:5:A:LYS:HA	10	10.08
(1,307)	1:1:A:ILE:HD12	1:5:A:LYS:HA	10	10.08
(1,307)	1:1:A:ILE:HD13	1:5:A:LYS:HA	10	10.08
(1,213)	1:1:A:ILE:HB	1:4:A:TRP:HB2	16	10.08
(1,112)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:HB3	3	10.08
(1,107)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:HB3	3	10.08
(1,214)	1:6:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB2	14	10.07
(1,214)	1:6:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB3	14	10.07
(1,242)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HD2	6	10.06
(1,242)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HD3	6	10.06
(1,171)	1:8:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD2	14	10.06
(1,171)	1:8:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD3	14	10.06
(1,153)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:HB2	11	10.06
(1,137)	1:12:A:ARG:HE	1:13:A:ARG:HG3	19	10.06
(1,195)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE2	6	10.05
(1,195)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE3	6	10.05
(1,133)	1:8:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:H	10	10.05
(1,289)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HA	18	10.04
(1,289)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HA	18	10.04
(1,2)	1:2:A:LEU:H	1:5:A:LYS:HA	11	10.04

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,316)	1:1:A:ILE:HD11	1:4:A:TRP:HB2	14	10.03
(1,316)	1:1:A:ILE:HD12	1:4:A:TRP:HB2	14	10.03
(1,316)	1:1:A:ILE:HD13	1:4:A:TRP:HB2	14	10.03
(1,263)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HG2	17	10.03
(1,126)	1:5:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:H	15	10.03
(1,15)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HE	15	10.03
(1,150)	1:8:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	20	10.02
(1,172)	1:5:A:LYS:HE2	1:8:A:TRP:H	5	10.01
(1,172)	1:5:A:LYS:HE3	1:8:A:TRP:H	5	10.01
(1,172)	1:5:A:LYS:HE2	1:8:A:TRP:H	6	10.01
(1,172)	1:5:A:LYS:HE3	1:8:A:TRP:H	6	10.01
(1,152)	1:10:A:PRO:HB2	1:12:A:ARG:HE	13	10.01
(1,152)	1:10:A:PRO:HB3	1:12:A:ARG:HE	13	10.01
(1,133)	1:8:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:H	14	10.01
(1,61)	1:1:A:ILE:HG21	1:5:A:LYS:H	6	10.01
(1,61)	1:1:A:ILE:HG22	1:5:A:LYS:H	6	10.01
(1,61)	1:1:A:ILE:HG23	1:5:A:LYS:H	6	10.01
(1,307)	1:1:A:ILE:HD11	1:5:A:LYS:HA	6	10.0
(1,307)	1:1:A:ILE:HD12	1:5:A:LYS:HA	6	10.0
(1,307)	1:1:A:ILE:HD13	1:5:A:LYS:HA	6	10.0
(1,286)	1:1:A:ILE:HG21	1:5:A:LYS:HA	11	10.0
(1,286)	1:1:A:ILE:HG22	1:5:A:LYS:HA	11	10.0
(1,286)	1:1:A:ILE:HG23	1:5:A:LYS:HA	11	10.0
(1,132)	1:7:A:LYS:HE2	1:11:A:TRP:H	4	10.0
(1,132)	1:7:A:LYS:HE3	1:11:A:TRP:H	4	10.0
(1,2)	1:2:A:LEU:H	1:5:A:LYS:HA	9	10.0
(1,201)	1:5:A:LYS:HG2	1:7:A:LYS:HE2	6	9.99
(1,201)	1:5:A:LYS:HG2	1:7:A:LYS:HE3	6	9.99
(1,201)	1:5:A:LYS:HG3	1:7:A:LYS:HE2	6	9.99
(1,201)	1:5:A:LYS:HG3	1:7:A:LYS:HE3	6	9.99
(1,286)	1:1:A:ILE:HG21	1:5:A:LYS:HA	12	9.98
(1,286)	1:1:A:ILE:HG22	1:5:A:LYS:HA	12	9.98
(1,286)	1:1:A:ILE:HG23	1:5:A:LYS:HA	12	9.98
(1,275)	1:5:A:LYS:HB2	1:11:A:TRP:H	4	9.98
(1,275)	1:5:A:LYS:HB3	1:11:A:TRP:H	4	9.98
(1,139)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HE	3	9.98
(1,139)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HE	3	9.98
(1,136)	1:5:A:LYS:HB2	1:11:A:TRP:H	4	9.98
(1,136)	1:5:A:LYS:HB3	1:11:A:TRP:H	4	9.98
(1,244)	1:7:A:LYS:HD2	1:10:A:PRO:HB2	6	9.97
(1,244)	1:7:A:LYS:HD2	1:10:A:PRO:HB3	6	9.97
(1,244)	1:7:A:LYS:HD3	1:10:A:PRO:HB2	6	9.97

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,244)	1:7:A:LYS:HD3	1:10:A:PRO:HB3	6	9.97
(1,94)	1:6:A:TRP:H	1:10:A:PRO:HB2	2	9.97
(1,94)	1:6:A:TRP:H	1:10:A:PRO:HB3	2	9.97
(1,38)	1:7:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:H	19	9.97
(1,38)	1:7:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:H	19	9.97
(1,158)	1:7:A:LYS:HD2	1:11:A:TRP:HB2	15	9.96
(1,158)	1:7:A:LYS:HD2	1:11:A:TRP:HB3	15	9.96
(1,158)	1:7:A:LYS:HD3	1:11:A:TRP:HB2	15	9.96
(1,158)	1:7:A:LYS:HD3	1:11:A:TRP:HB3	15	9.96
(1,9)	1:2:A:LEU:H	1:5:A:LYS:HG2	3	9.96
(1,9)	1:2:A:LEU:H	1:5:A:LYS:HG3	3	9.96
(1,135)	1:5:A:LYS:HB2	1:12:A:ARG:HE	7	9.95
(1,135)	1:5:A:LYS:HB3	1:12:A:ARG:HE	7	9.95
(1,135)	1:5:A:LYS:HB2	1:12:A:ARG:HE	16	9.95
(1,135)	1:5:A:LYS:HB3	1:12:A:ARG:HE	16	9.95
(1,121)	1:8:A:TRP:H	1:11:A:TRP:H	5	9.95
(1,110)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:HB2	14	9.95
(1,214)	1:6:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB2	18	9.94
(1,214)	1:6:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB3	18	9.94
(1,115)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD2	12	9.94
(1,115)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD3	12	9.94
(1,24)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HG2	14	9.94
(1,295)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD2	19	9.93
(1,295)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD3	19	9.93
(1,295)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD2	19	9.93
(1,295)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD3	19	9.93
(1,288)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HA	12	9.93
(1,288)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HA	12	9.93
(1,288)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HA	12	9.93
(1,115)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD2	20	9.93
(1,115)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD3	20	9.93
(1,93)	1:1:A:ILE:HB	1:6:A:TRP:H	16	9.93
(1,9)	1:2:A:LEU:H	1:5:A:LYS:HG2	5	9.93
(1,9)	1:2:A:LEU:H	1:5:A:LYS:HG3	5	9.93
(1,295)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD2	12	9.92
(1,295)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD3	12	9.92
(1,295)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD2	12	9.92
(1,295)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD3	12	9.92
(1,158)	1:7:A:LYS:HD2	1:11:A:TRP:HB2	17	9.92
(1,158)	1:7:A:LYS:HD2	1:11:A:TRP:HB3	17	9.92
(1,158)	1:7:A:LYS:HD3	1:11:A:TRP:HB2	17	9.92
(1,158)	1:7:A:LYS:HD3	1:11:A:TRP:HB3	17	9.92

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,131)	1:7:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:HE	1	9.92
(1,131)	1:7:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:HE	1	9.92
(1,128)	1:7:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:H	12	9.92
(1,74)	1:9:A:THR:HG21	1:13:A:ARG:HE	11	9.92
(1,74)	1:9:A:THR:HG22	1:13:A:ARG:HE	11	9.92
(1,74)	1:9:A:THR:HG23	1:13:A:ARG:HE	11	9.92
(1,61)	1:1:A:ILE:HG21	1:5:A:LYS:H	5	9.92
(1,61)	1:1:A:ILE:HG22	1:5:A:LYS:H	5	9.92
(1,61)	1:1:A:ILE:HG23	1:5:A:LYS:H	5	9.92
(1,9)	1:2:A:LEU:H	1:5:A:LYS:HG2	9	9.92
(1,9)	1:2:A:LEU:H	1:5:A:LYS:HG3	9	9.92
(1,260)	1:2:A:LEU:HB3	1:5:A:LYS:HA	15	9.91
(1,197)	1:5:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB3	18	9.91
(1,176)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HD2	6	9.91
(1,176)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HD3	6	9.91
(1,260)	1:2:A:LEU:HB3	1:5:A:LYS:HA	13	9.9
(1,205)	1:1:A:ILE:HB	1:5:A:LYS:HA	7	9.9
(1,126)	1:5:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:H	6	9.9
(1,74)	1:9:A:THR:HG21	1:13:A:ARG:HE	16	9.9
(1,74)	1:9:A:THR:HG22	1:13:A:ARG:HE	16	9.9
(1,74)	1:9:A:THR:HG23	1:13:A:ARG:HE	16	9.9
(1,52)	1:5:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HE2	17	9.9
(1,52)	1:5:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HE3	17	9.9
(1,205)	1:1:A:ILE:HB	1:5:A:LYS:HA	11	9.88
(1,139)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HE	2	9.88
(1,139)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HE	2	9.88
(1,315)	1:1:A:ILE:HD11	1:6:A:TRP:HB2	8	9.86
(1,315)	1:1:A:ILE:HD12	1:6:A:TRP:HB2	8	9.86
(1,315)	1:1:A:ILE:HD13	1:6:A:TRP:HB2	8	9.86
(1,248)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:H	17	9.86
(1,248)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:H	17	9.86
(1,205)	1:1:A:ILE:HB	1:5:A:LYS:HA	16	9.86
(1,48)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:H	17	9.86
(1,48)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:H	17	9.86
(1,172)	1:5:A:LYS:HE2	1:8:A:TRP:H	13	9.85
(1,172)	1:5:A:LYS:HE3	1:8:A:TRP:H	13	9.85
(1,307)	1:1:A:ILE:HD11	1:5:A:LYS:HA	19	9.84
(1,307)	1:1:A:ILE:HD12	1:5:A:LYS:HA	19	9.84
(1,307)	1:1:A:ILE:HD13	1:5:A:LYS:HA	19	9.84
(1,222)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:HB2	10	9.84
(1,222)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:HB3	10	9.84
(1,222)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:HB2	10	9.84

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,222)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:HB3	10	9.84
(1,89)	1:3:A:PRO:HA	1:6:A:TRP:H	20	9.83
(1,286)	1:1:A:ILE:HG21	1:5:A:LYS:HA	4	9.82
(1,286)	1:1:A:ILE:HG22	1:5:A:LYS:HA	4	9.82
(1,286)	1:1:A:ILE:HG23	1:5:A:LYS:HA	4	9.82
(1,248)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:H	1	9.82
(1,248)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:H	1	9.82
(1,48)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:H	1	9.82
(1,48)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:H	1	9.82
(1,10)	1:2:A:LEU:H	1:6:A:TRP:HB2	13	9.82
(1,316)	1:1:A:ILE:HD11	1:4:A:TRP:HB2	16	9.81
(1,316)	1:1:A:ILE:HD12	1:4:A:TRP:HB2	16	9.81
(1,316)	1:1:A:ILE:HD13	1:4:A:TRP:HB2	16	9.81
(1,264)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:HA	17	9.81
(1,264)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:HA	17	9.81
(1,260)	1:2:A:LEU:HB3	1:5:A:LYS:HA	17	9.81
(1,195)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE2	5	9.81
(1,195)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE3	5	9.81
(1,158)	1:7:A:LYS:HD2	1:11:A:TRP:HB2	4	9.81
(1,158)	1:7:A:LYS:HD2	1:11:A:TRP:HB3	4	9.81
(1,158)	1:7:A:LYS:HD3	1:11:A:TRP:HB2	4	9.81
(1,158)	1:7:A:LYS:HD3	1:11:A:TRP:HB3	4	9.81
(1,10)	1:2:A:LEU:H	1:6:A:TRP:HB2	1	9.81
(1,299)	1:1:A:ILE:HG21	1:6:A:TRP:HB3	17	9.8
(1,299)	1:1:A:ILE:HG22	1:6:A:TRP:HB3	17	9.8
(1,299)	1:1:A:ILE:HG23	1:6:A:TRP:HB3	17	9.8
(1,202)	1:1:A:ILE:HG21	1:6:A:TRP:HB3	17	9.8
(1,202)	1:1:A:ILE:HG22	1:6:A:TRP:HB3	17	9.8
(1,202)	1:1:A:ILE:HG23	1:6:A:TRP:HB3	17	9.8
(1,316)	1:1:A:ILE:HD11	1:4:A:TRP:HB2	10	9.79
(1,316)	1:1:A:ILE:HD12	1:4:A:TRP:HB2	10	9.79
(1,316)	1:1:A:ILE:HD13	1:4:A:TRP:HB2	10	9.79
(1,299)	1:1:A:ILE:HG21	1:6:A:TRP:HB3	7	9.79
(1,299)	1:1:A:ILE:HG22	1:6:A:TRP:HB3	7	9.79
(1,299)	1:1:A:ILE:HG23	1:6:A:TRP:HB3	7	9.79
(1,248)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:H	14	9.79
(1,248)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:H	14	9.79
(1,213)	1:1:A:ILE:HB	1:4:A:TRP:HB2	4	9.79
(1,202)	1:1:A:ILE:HG21	1:6:A:TRP:HB3	7	9.79
(1,202)	1:1:A:ILE:HG22	1:6:A:TRP:HB3	7	9.79
(1,202)	1:1:A:ILE:HG23	1:6:A:TRP:HB3	7	9.79
(1,48)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:H	14	9.79

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,48)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:H	14	9.79
(1,9)	1:2:A:LEU:H	1:5:A:LYS:HG2	1	9.79
(1,9)	1:2:A:LEU:H	1:5:A:LYS:HG3	1	9.79
(1,279)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HD2	17	9.78
(1,279)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HD3	17	9.78
(1,225)	1:7:A:LYS:HB2	1:12:A:ARG:H	2	9.78
(1,225)	1:7:A:LYS:HB3	1:12:A:ARG:H	2	9.78
(1,210)	1:7:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB2	14	9.78
(1,210)	1:7:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB3	14	9.78
(1,176)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HD2	11	9.77
(1,176)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HD3	11	9.77
(1,94)	1:6:A:TRP:H	1:10:A:PRO:HB2	18	9.76
(1,94)	1:6:A:TRP:H	1:10:A:PRO:HB3	18	9.76
(1,13)	1:2:A:LEU:H	1:7:A:LYS:HD2	1	9.76
(1,13)	1:2:A:LEU:H	1:7:A:LYS:HD3	1	9.76
(1,209)	1:5:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB2	17	9.75
(1,209)	1:5:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB3	17	9.75
(1,244)	1:7:A:LYS:HD2	1:10:A:PRO:HB2	12	9.74
(1,244)	1:7:A:LYS:HD2	1:10:A:PRO:HB3	12	9.74
(1,244)	1:7:A:LYS:HD3	1:10:A:PRO:HB2	12	9.74
(1,244)	1:7:A:LYS:HD3	1:10:A:PRO:HB3	12	9.74
(1,153)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:HB2	4	9.74
(1,112)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:HB3	10	9.74
(1,107)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:HB3	10	9.74
(1,319)	1:1:A:ILE:HD11	1:7:A:LYS:HD2	1	9.73
(1,319)	1:1:A:ILE:HD11	1:7:A:LYS:HD3	1	9.73
(1,319)	1:1:A:ILE:HD12	1:7:A:LYS:HD2	1	9.73
(1,319)	1:1:A:ILE:HD12	1:7:A:LYS:HD3	1	9.73
(1,319)	1:1:A:ILE:HD13	1:7:A:LYS:HD2	1	9.73
(1,319)	1:1:A:ILE:HD13	1:7:A:LYS:HD3	1	9.73
(1,172)	1:5:A:LYS:HE2	1:8:A:TRP:H	11	9.73
(1,172)	1:5:A:LYS:HE3	1:8:A:TRP:H	11	9.73
(1,115)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD2	13	9.73
(1,115)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD3	13	9.73
(1,89)	1:3:A:PRO:HA	1:6:A:TRP:H	19	9.73
(1,316)	1:1:A:ILE:HD11	1:4:A:TRP:HB2	12	9.72
(1,316)	1:1:A:ILE:HD12	1:4:A:TRP:HB2	12	9.72
(1,316)	1:1:A:ILE:HD13	1:4:A:TRP:HB2	12	9.72
(1,222)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:HB2	19	9.72
(1,222)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:HB3	19	9.72
(1,222)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:HB2	19	9.72
(1,222)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:HB3	19	9.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,148)	1:8:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:H	17	9.71
(1,61)	1:1:A:ILE:HG21	1:5:A:LYS:H	9	9.71
(1,61)	1:1:A:ILE:HG22	1:5:A:LYS:H	9	9.71
(1,61)	1:1:A:ILE:HG23	1:5:A:LYS:H	9	9.71
(1,10)	1:2:A:LEU:H	1:6:A:TRP:HB2	16	9.71
(1,260)	1:2:A:LEU:HB3	1:5:A:LYS:HA	5	9.7
(1,244)	1:7:A:LYS:HD2	1:10:A:PRO:HB2	9	9.7
(1,244)	1:7:A:LYS:HD2	1:10:A:PRO:HB3	9	9.7
(1,244)	1:7:A:LYS:HD3	1:10:A:PRO:HB2	9	9.7
(1,244)	1:7:A:LYS:HD3	1:10:A:PRO:HB3	9	9.7
(1,210)	1:7:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB2	8	9.7
(1,210)	1:7:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB3	8	9.7
(1,209)	1:5:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB2	16	9.7
(1,209)	1:5:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB3	16	9.7
(1,205)	1:1:A:ILE:HB	1:5:A:LYS:HA	12	9.7
(1,93)	1:1:A:ILE:HB	1:6:A:TRP:H	4	9.7
(1,275)	1:5:A:LYS:HB2	1:11:A:TRP:H	7	9.69
(1,275)	1:5:A:LYS:HB3	1:11:A:TRP:H	7	9.69
(1,226)	1:2:A:LEU:HB2	1:6:A:TRP:HB2	16	9.69
(1,213)	1:1:A:ILE:HB	1:4:A:TRP:HB2	11	9.69
(1,136)	1:5:A:LYS:HB2	1:11:A:TRP:H	7	9.69
(1,136)	1:5:A:LYS:HB3	1:11:A:TRP:H	7	9.69
(1,2)	1:2:A:LEU:H	1:5:A:LYS:HA	6	9.68
(1,165)	1:3:A:PRO:HA	1:6:A:TRP:HB2	4	9.67
(1,138)	1:11:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	16	9.67
(1,126)	1:5:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:H	7	9.67
(1,316)	1:1:A:ILE:HD11	1:4:A:TRP:HB2	7	9.66
(1,316)	1:1:A:ILE:HD12	1:4:A:TRP:HB2	7	9.66
(1,316)	1:1:A:ILE:HD13	1:4:A:TRP:HB2	7	9.66
(1,110)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:HB2	18	9.66
(1,108)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE2	5	9.66
(1,108)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE3	5	9.66
(1,108)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE2	14	9.66
(1,108)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE3	14	9.66
(1,102)	1:1:A:ILE:HG21	1:6:A:TRP:H	9	9.66
(1,102)	1:1:A:ILE:HG22	1:6:A:TRP:H	9	9.66
(1,102)	1:1:A:ILE:HG23	1:6:A:TRP:H	9	9.66
(1,81)	1:6:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HB2	6	9.66
(1,81)	1:6:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HB3	6	9.66
(1,209)	1:5:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB2	10	9.65
(1,209)	1:5:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB3	10	9.65
(1,204)	1:6:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG21	16	9.65

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,204)	1:6:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG22	16	9.65
(1,204)	1:6:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG23	16	9.65
(1,196)	1:3:A:PRO:HA	1:6:A:TRP:HB3	16	9.65
(1,167)	1:5:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB2	4	9.65
(1,286)	1:1:A:ILE:HG21	1:5:A:LYS:HA	18	9.63
(1,286)	1:1:A:ILE:HG22	1:5:A:LYS:HA	18	9.63
(1,286)	1:1:A:ILE:HG23	1:5:A:LYS:HA	18	9.63
(1,203)	1:1:A:ILE:HG21	1:7:A:LYS:HE2	7	9.63
(1,203)	1:1:A:ILE:HG21	1:7:A:LYS:HE3	7	9.63
(1,203)	1:1:A:ILE:HG22	1:7:A:LYS:HE2	7	9.63
(1,203)	1:1:A:ILE:HG22	1:7:A:LYS:HE3	7	9.63
(1,203)	1:1:A:ILE:HG23	1:7:A:LYS:HE2	7	9.63
(1,203)	1:1:A:ILE:HG23	1:7:A:LYS:HE3	7	9.63
(1,167)	1:5:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB2	11	9.63
(1,226)	1:2:A:LEU:HB2	1:6:A:TRP:HB2	5	9.62
(1,210)	1:7:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB2	13	9.62
(1,210)	1:7:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB3	13	9.62
(1,209)	1:5:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB2	11	9.62
(1,209)	1:5:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB3	11	9.62
(1,103)	1:6:A:TRP:H	1:9:A:THR:HG21	15	9.62
(1,103)	1:6:A:TRP:H	1:9:A:THR:HG22	15	9.62
(1,103)	1:6:A:TRP:H	1:9:A:THR:HG23	15	9.62
(1,55)	1:5:A:LYS:H	1:11:A:TRP:HB2	3	9.62
(1,55)	1:5:A:LYS:H	1:11:A:TRP:HB3	3	9.62
(1,225)	1:7:A:LYS:HB2	1:12:A:ARG:H	3	9.61
(1,225)	1:7:A:LYS:HB3	1:12:A:ARG:H	3	9.61
(1,61)	1:1:A:ILE:HG21	1:5:A:LYS:H	2	9.61
(1,61)	1:1:A:ILE:HG22	1:5:A:LYS:H	2	9.61
(1,61)	1:1:A:ILE:HG23	1:5:A:LYS:H	2	9.61
(1,225)	1:7:A:LYS:HB2	1:12:A:ARG:H	4	9.6
(1,225)	1:7:A:LYS:HB3	1:12:A:ARG:H	4	9.6
(1,213)	1:1:A:ILE:HB	1:4:A:TRP:HB2	13	9.6
(1,158)	1:7:A:LYS:HD2	1:11:A:TRP:HB2	12	9.6
(1,158)	1:7:A:LYS:HD2	1:11:A:TRP:HB3	12	9.6
(1,158)	1:7:A:LYS:HD3	1:11:A:TRP:HB2	12	9.6
(1,158)	1:7:A:LYS:HD3	1:11:A:TRP:HB3	12	9.6
(1,148)	1:8:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:H	5	9.6
(1,135)	1:5:A:LYS:HB2	1:12:A:ARG:HE	18	9.6
(1,135)	1:5:A:LYS:HB3	1:12:A:ARG:HE	18	9.6
(1,210)	1:7:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB2	17	9.59
(1,210)	1:7:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB3	17	9.59
(1,74)	1:9:A:THR:HG21	1:13:A:ARG:HE	3	9.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,74)	1:9:A:THR:HG22	1:13:A:ARG:HE	3	9.59
(1,74)	1:9:A:THR:HG23	1:13:A:ARG:HE	3	9.59
(1,286)	1:1:A:ILE:HG21	1:5:A:LYS:HA	13	9.58
(1,286)	1:1:A:ILE:HG22	1:5:A:LYS:HA	13	9.58
(1,286)	1:1:A:ILE:HG23	1:5:A:LYS:HA	13	9.58
(1,275)	1:5:A:LYS:HB2	1:11:A:TRP:H	15	9.58
(1,275)	1:5:A:LYS:HB3	1:11:A:TRP:H	15	9.58
(1,204)	1:6:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG21	17	9.58
(1,204)	1:6:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG22	17	9.58
(1,204)	1:6:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG23	17	9.58
(1,195)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE2	14	9.58
(1,195)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE3	14	9.58
(1,136)	1:5:A:LYS:HB2	1:11:A:TRP:H	15	9.58
(1,136)	1:5:A:LYS:HB3	1:11:A:TRP:H	15	9.58
(1,110)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:HB2	20	9.58
(1,273)	1:5:A:LYS:HB2	1:13:A:ARG:H	3	9.57
(1,273)	1:5:A:LYS:HB3	1:13:A:ARG:H	3	9.57
(1,166)	1:5:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:HB2	7	9.57
(1,166)	1:5:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:HB3	7	9.57
(1,33)	1:5:A:LYS:HB2	1:13:A:ARG:H	3	9.57
(1,33)	1:5:A:LYS:HB3	1:13:A:ARG:H	3	9.57
(1,213)	1:1:A:ILE:HB	1:4:A:TRP:HB2	7	9.56
(1,103)	1:6:A:TRP:H	1:9:A:THR:HG21	17	9.56
(1,103)	1:6:A:TRP:H	1:9:A:THR:HG22	17	9.56
(1,103)	1:6:A:TRP:H	1:9:A:THR:HG23	17	9.56
(1,95)	1:2:A:LEU:HB2	1:6:A:TRP:H	3	9.56
(1,74)	1:9:A:THR:HG21	1:13:A:ARG:HE	6	9.56
(1,74)	1:9:A:THR:HG22	1:13:A:ARG:HE	6	9.56
(1,74)	1:9:A:THR:HG23	1:13:A:ARG:HE	6	9.56
(1,274)	1:5:A:LYS:HB2	1:12:A:ARG:HE	4	9.55
(1,274)	1:5:A:LYS:HB3	1:12:A:ARG:HE	4	9.55
(1,180)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD2	19	9.55
(1,180)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD3	19	9.55
(1,180)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD2	19	9.55
(1,180)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD3	19	9.55
(1,286)	1:1:A:ILE:HG21	1:5:A:LYS:HA	17	9.54
(1,286)	1:1:A:ILE:HG22	1:5:A:LYS:HA	17	9.54
(1,286)	1:1:A:ILE:HG23	1:5:A:LYS:HA	17	9.54
(1,228)	1:2:A:LEU:HB2	1:4:A:TRP:HB2	3	9.54
(1,209)	1:5:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB2	4	9.54
(1,209)	1:5:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB3	4	9.54
(1,180)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD2	12	9.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,180)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD3	12	9.54
(1,180)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD2	12	9.54
(1,180)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD3	12	9.54
(1,167)	1:5:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB2	8	9.54
(1,153)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:HB2	3	9.54
(1,139)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HE	20	9.54
(1,139)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HE	20	9.54
(1,9)	1:2:A:LEU:H	1:5:A:LYS:HG2	2	9.54
(1,9)	1:2:A:LEU:H	1:5:A:LYS:HG3	2	9.54
(1,133)	1:8:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:H	19	9.53
(1,52)	1:5:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HE2	8	9.53
(1,52)	1:5:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HE3	8	9.53
(1,152)	1:10:A:PRO:HB2	1:12:A:ARG:HE	11	9.52
(1,152)	1:10:A:PRO:HB3	1:12:A:ARG:HE	11	9.52
(1,9)	1:2:A:LEU:H	1:5:A:LYS:HG2	12	9.52
(1,9)	1:2:A:LEU:H	1:5:A:LYS:HG3	12	9.52
(1,9)	1:2:A:LEU:H	1:5:A:LYS:HG2	18	9.52
(1,9)	1:2:A:LEU:H	1:5:A:LYS:HG3	18	9.52
(1,260)	1:2:A:LEU:HB3	1:5:A:LYS:HA	1	9.51
(1,204)	1:6:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG21	14	9.51
(1,204)	1:6:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG22	14	9.51
(1,204)	1:6:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG23	14	9.51
(1,128)	1:7:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:H	1	9.51
(1,205)	1:1:A:ILE:HB	1:5:A:LYS:HA	13	9.5
(1,108)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE2	13	9.5
(1,108)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE3	13	9.5
(1,71)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:H	8	9.5
(1,71)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:H	8	9.5
(1,288)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HA	13	9.48
(1,288)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HA	13	9.48
(1,288)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HA	13	9.48
(1,115)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD2	9	9.48
(1,115)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD3	9	9.48
(1,244)	1:7:A:LYS:HD2	1:10:A:PRO:HB2	14	9.47
(1,244)	1:7:A:LYS:HD2	1:10:A:PRO:HB3	14	9.47
(1,244)	1:7:A:LYS:HD3	1:10:A:PRO:HB2	14	9.47
(1,244)	1:7:A:LYS:HD3	1:10:A:PRO:HB3	14	9.47
(1,204)	1:6:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG21	19	9.47
(1,204)	1:6:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG22	19	9.47
(1,204)	1:6:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG23	19	9.47
(1,115)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD2	8	9.47
(1,115)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD3	8	9.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,204)	1:6:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG21	9	9.46
(1,204)	1:6:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG22	9	9.46
(1,204)	1:6:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG23	9	9.46
(1,135)	1:5:A:LYS:HB2	1:12:A:ARG:HE	8	9.46
(1,135)	1:5:A:LYS:HB3	1:12:A:ARG:HE	8	9.46
(1,121)	1:8:A:TRP:H	1:11:A:TRP:H	20	9.46
(1,78)	1:6:A:TRP:HB2	1:9:A:THR:H	9	9.46
(1,69)	1:6:A:TRP:HB2	1:9:A:THR:H	9	9.46
(1,10)	1:2:A:LEU:H	1:6:A:TRP:HB2	5	9.46
(1,286)	1:1:A:ILE:HG21	1:5:A:LYS:HA	1	9.45
(1,286)	1:1:A:ILE:HG22	1:5:A:LYS:HA	1	9.45
(1,286)	1:1:A:ILE:HG23	1:5:A:LYS:HA	1	9.45
(1,228)	1:2:A:LEU:HB2	1:4:A:TRP:HB2	15	9.45
(1,78)	1:6:A:TRP:HB2	1:9:A:THR:H	11	9.45
(1,69)	1:6:A:TRP:HB2	1:9:A:THR:H	11	9.45
(1,214)	1:6:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB2	12	9.44
(1,214)	1:6:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB3	12	9.44
(1,194)	1:7:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:HA	17	9.44
(1,194)	1:7:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:HA	17	9.44
(1,115)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD2	5	9.44
(1,115)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD3	5	9.44
(1,89)	1:3:A:PRO:HA	1:6:A:TRP:H	18	9.44
(1,281)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HE	8	9.43
(1,281)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HE	8	9.43
(1,262)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD2	18	9.42
(1,262)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD3	18	9.42
(1,196)	1:3:A:PRO:HA	1:6:A:TRP:HB3	4	9.42
(1,103)	1:6:A:TRP:H	1:9:A:THR:HG21	9	9.42
(1,103)	1:6:A:TRP:H	1:9:A:THR:HG22	9	9.42
(1,103)	1:6:A:TRP:H	1:9:A:THR:HG23	9	9.42
(1,89)	1:3:A:PRO:HA	1:6:A:TRP:H	10	9.42
(1,52)	1:5:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HE2	14	9.42
(1,52)	1:5:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HE3	14	9.42
(1,307)	1:1:A:ILE:HD11	1:5:A:LYS:HA	9	9.41
(1,307)	1:1:A:ILE:HD12	1:5:A:LYS:HA	9	9.41
(1,307)	1:1:A:ILE:HD13	1:5:A:LYS:HA	9	9.41
(1,153)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:HB2	12	9.41
(1,128)	1:7:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:H	3	9.41
(1,319)	1:1:A:ILE:HD11	1:7:A:LYS:HD2	7	9.4
(1,319)	1:1:A:ILE:HD11	1:7:A:LYS:HD3	7	9.4
(1,319)	1:1:A:ILE:HD12	1:7:A:LYS:HD2	7	9.4
(1,319)	1:1:A:ILE:HD12	1:7:A:LYS:HD3	7	9.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,319)	1:1:A:ILE:HD13	1:7:A:LYS:HD2	7	9.4
(1,319)	1:1:A:ILE:HD13	1:7:A:LYS:HD3	7	9.4
(1,262)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD2	6	9.4
(1,262)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD3	6	9.4
(1,213)	1:1:A:ILE:HB	1:4:A:TRP:HB2	17	9.4
(1,201)	1:5:A:LYS:HG2	1:7:A:LYS:HE2	8	9.4
(1,201)	1:5:A:LYS:HG2	1:7:A:LYS:HE3	8	9.4
(1,201)	1:5:A:LYS:HG3	1:7:A:LYS:HE2	8	9.4
(1,201)	1:5:A:LYS:HG3	1:7:A:LYS:HE3	8	9.4
(1,197)	1:5:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB3	5	9.4
(1,132)	1:7:A:LYS:HE2	1:11:A:TRP:H	3	9.4
(1,132)	1:7:A:LYS:HE3	1:11:A:TRP:H	3	9.4
(1,20)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:H	10	9.4
(1,312)	1:1:A:ILE:HD11	1:7:A:LYS:HA	9	9.39
(1,312)	1:1:A:ILE:HD12	1:7:A:LYS:HA	9	9.39
(1,312)	1:1:A:ILE:HD13	1:7:A:LYS:HA	9	9.39
(1,197)	1:5:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB3	19	9.39
(1,153)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:HB2	1	9.38
(1,138)	1:11:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	10	9.38
(1,172)	1:5:A:LYS:HE2	1:8:A:TRP:H	4	9.37
(1,172)	1:5:A:LYS:HE3	1:8:A:TRP:H	4	9.37
(1,171)	1:8:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD2	5	9.37
(1,171)	1:8:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD3	5	9.37
(1,133)	1:8:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:H	1	9.37
(1,205)	1:1:A:ILE:HB	1:5:A:LYS:HA	18	9.36
(1,174)	1:5:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:H	7	9.35
(1,174)	1:5:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:H	7	9.35
(1,244)	1:7:A:LYS:HD2	1:10:A:PRO:HB2	2	9.34
(1,244)	1:7:A:LYS:HD2	1:10:A:PRO:HB3	2	9.34
(1,244)	1:7:A:LYS:HD3	1:10:A:PRO:HB2	2	9.34
(1,244)	1:7:A:LYS:HD3	1:10:A:PRO:HB3	2	9.34
(1,61)	1:1:A:ILE:HG21	1:5:A:LYS:H	13	9.34
(1,61)	1:1:A:ILE:HG22	1:5:A:LYS:H	13	9.34
(1,61)	1:1:A:ILE:HG23	1:5:A:LYS:H	13	9.34
(1,152)	1:10:A:PRO:HB2	1:12:A:ARG:HE	19	9.33
(1,152)	1:10:A:PRO:HB3	1:12:A:ARG:HE	19	9.33
(1,128)	1:7:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:H	10	9.33
(1,309)	1:2:A:LEU:HD11	1:7:A:LYS:HA	10	9.32
(1,309)	1:2:A:LEU:HD12	1:7:A:LYS:HA	10	9.32
(1,309)	1:2:A:LEU:HD13	1:7:A:LYS:HA	10	9.32
(1,309)	1:2:A:LEU:HD21	1:7:A:LYS:HA	10	9.32
(1,309)	1:2:A:LEU:HD22	1:7:A:LYS:HA	10	9.32

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,309)	1:2:A:LEU:HD23	1:7:A:LYS:HA	10	9.32
(1,226)	1:2:A:LEU:HB2	1:6:A:TRP:HB2	20	9.32
(1,201)	1:5:A:LYS:HG2	1:7:A:LYS:HE2	7	9.32
(1,201)	1:5:A:LYS:HG2	1:7:A:LYS:HE3	7	9.32
(1,201)	1:5:A:LYS:HG3	1:7:A:LYS:HE2	7	9.32
(1,201)	1:5:A:LYS:HG3	1:7:A:LYS:HE3	7	9.32
(1,137)	1:12:A:ARG:HE	1:13:A:ARG:HG3	17	9.32
(1,132)	1:7:A:LYS:HE2	1:11:A:TRP:H	17	9.32
(1,132)	1:7:A:LYS:HE3	1:11:A:TRP:H	17	9.32
(1,121)	1:8:A:TRP:H	1:11:A:TRP:H	10	9.32
(1,61)	1:1:A:ILE:HG21	1:5:A:LYS:H	1	9.32
(1,61)	1:1:A:ILE:HG22	1:5:A:LYS:H	1	9.32
(1,61)	1:1:A:ILE:HG23	1:5:A:LYS:H	1	9.32
(1,288)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HA	7	9.31
(1,288)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HA	7	9.31
(1,288)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HA	7	9.31
(1,165)	1:3:A:PRO:HA	1:6:A:TRP:HB2	8	9.31
(1,148)	1:8:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:H	12	9.31
(1,133)	1:8:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:H	17	9.31
(1,124)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HE	6	9.31
(1,213)	1:1:A:ILE:HB	1:4:A:TRP:HB2	15	9.3
(1,110)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:HB2	16	9.29
(1,2)	1:2:A:LEU:H	1:5:A:LYS:HA	19	9.29
(1,225)	1:7:A:LYS:HB2	1:12:A:ARG:H	1	9.28
(1,225)	1:7:A:LYS:HB3	1:12:A:ARG:H	1	9.28
(1,213)	1:1:A:ILE:HB	1:4:A:TRP:HB2	14	9.28
(1,210)	1:7:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB2	1	9.28
(1,210)	1:7:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB3	1	9.28
(1,112)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:HB3	14	9.28
(1,107)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:HB3	14	9.28
(1,22)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HB2	14	9.28
(1,22)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HB3	14	9.28
(1,281)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HE	3	9.27
(1,281)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HE	3	9.27
(1,130)	1:9:A:THR:HB	1:12:A:ARG:HE	9	9.27
(1,148)	1:8:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:H	16	9.26
(1,306)	1:2:A:LEU:HD11	1:5:A:LYS:HA	5	9.25
(1,306)	1:2:A:LEU:HD12	1:5:A:LYS:HA	5	9.25
(1,306)	1:2:A:LEU:HD13	1:5:A:LYS:HA	5	9.25
(1,306)	1:2:A:LEU:HD21	1:5:A:LYS:HA	5	9.25
(1,306)	1:2:A:LEU:HD22	1:5:A:LYS:HA	5	9.25
(1,306)	1:2:A:LEU:HD23	1:5:A:LYS:HA	5	9.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,213)	1:1:A:ILE:HB	1:4:A:TRP:HB2	9	9.25
(1,167)	1:5:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB2	19	9.25
(1,89)	1:3:A:PRO:HA	1:6:A:TRP:H	11	9.25
(1,139)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HE	16	9.24
(1,139)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HE	16	9.24
(1,78)	1:6:A:TRP:HB2	1:9:A:THR:H	7	9.24
(1,69)	1:6:A:TRP:HB2	1:9:A:THR:H	7	9.24
(1,288)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HA	16	9.22
(1,288)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HA	16	9.22
(1,288)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HA	16	9.22
(1,280)	1:5:A:LYS:HD2	1:7:A:LYS:HA	9	9.22
(1,280)	1:5:A:LYS:HD3	1:7:A:LYS:HA	9	9.22
(1,61)	1:1:A:ILE:HG21	1:5:A:LYS:H	17	9.22
(1,61)	1:1:A:ILE:HG22	1:5:A:LYS:H	17	9.22
(1,61)	1:1:A:ILE:HG23	1:5:A:LYS:H	17	9.22
(1,205)	1:1:A:ILE:HB	1:5:A:LYS:HA	17	9.21
(1,152)	1:10:A:PRO:HB2	1:12:A:ARG:HE	3	9.21
(1,152)	1:10:A:PRO:HB3	1:12:A:ARG:HE	3	9.21
(1,121)	1:8:A:TRP:H	1:11:A:TRP:H	7	9.21
(1,112)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:HB3	4	9.21
(1,107)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:HB3	4	9.21
(1,89)	1:3:A:PRO:HA	1:6:A:TRP:H	3	9.21
(1,103)	1:6:A:TRP:H	1:9:A:THR:HG21	20	9.2
(1,103)	1:6:A:TRP:H	1:9:A:THR:HG22	20	9.2
(1,103)	1:6:A:TRP:H	1:9:A:THR:HG23	20	9.2
(1,309)	1:2:A:LEU:HD11	1:7:A:LYS:HA	14	9.19
(1,309)	1:2:A:LEU:HD12	1:7:A:LYS:HA	14	9.19
(1,309)	1:2:A:LEU:HD13	1:7:A:LYS:HA	14	9.19
(1,309)	1:2:A:LEU:HD21	1:7:A:LYS:HA	14	9.19
(1,309)	1:2:A:LEU:HD22	1:7:A:LYS:HA	14	9.19
(1,309)	1:2:A:LEU:HD23	1:7:A:LYS:HA	14	9.19
(1,121)	1:8:A:TRP:H	1:11:A:TRP:H	17	9.19
(1,112)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:HB3	13	9.18
(1,107)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:HB3	13	9.18
(1,281)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HE	2	9.17
(1,281)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HE	2	9.17
(1,139)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HE	18	9.17
(1,139)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HE	18	9.17
(1,128)	1:7:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:H	16	9.17
(1,112)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:HB3	15	9.17
(1,108)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE2	6	9.17
(1,108)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE3	6	9.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,107)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:HB3	15	9.17
(1,153)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:HB2	5	9.16
(1,89)	1:3:A:PRO:HA	1:6:A:TRP:H	12	9.16
(1,10)	1:2:A:LEU:H	1:6:A:TRP:HB2	20	9.16
(1,13)	1:2:A:LEU:H	1:7:A:LYS:HD2	2	9.15
(1,13)	1:2:A:LEU:H	1:7:A:LYS:HD3	2	9.15
(1,260)	1:2:A:LEU:HB3	1:5:A:LYS:HA	6	9.14
(1,250)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:H	17	9.14
(1,210)	1:7:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB2	11	9.14
(1,210)	1:7:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB3	11	9.14
(1,154)	1:2:A:LEU:HB3	1:4:A:TRP:HB2	6	9.14
(1,98)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:H	17	9.14
(1,232)	1:2:A:LEU:HB2	1:6:A:TRP:H	3	9.13
(1,199)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:HG21	3	9.13
(1,199)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:HG22	3	9.13
(1,199)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:HG23	3	9.13
(1,199)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:HG21	3	9.13
(1,199)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:HG22	3	9.13
(1,199)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:HG23	3	9.13
(1,148)	1:8:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:H	6	9.13
(1,138)	1:11:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	13	9.13
(1,10)	1:2:A:LEU:H	1:6:A:TRP:HB2	3	9.13
(1,9)	1:2:A:LEU:H	1:5:A:LYS:HG2	20	9.13
(1,9)	1:2:A:LEU:H	1:5:A:LYS:HG3	20	9.13
(1,274)	1:5:A:LYS:HB2	1:12:A:ARG:HE	7	9.12
(1,274)	1:5:A:LYS:HB3	1:12:A:ARG:HE	7	9.12
(1,274)	1:5:A:LYS:HB2	1:12:A:ARG:HE	16	9.12
(1,274)	1:5:A:LYS:HB3	1:12:A:ARG:HE	16	9.12
(1,230)	1:6:A:TRP:HB2	1:13:A:ARG:HG2	19	9.12
(1,204)	1:6:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG21	4	9.12
(1,204)	1:6:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG22	4	9.12
(1,204)	1:6:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG23	4	9.12
(1,61)	1:1:A:ILE:HG21	1:5:A:LYS:H	11	9.12
(1,61)	1:1:A:ILE:HG22	1:5:A:LYS:H	11	9.12
(1,61)	1:1:A:ILE:HG23	1:5:A:LYS:H	11	9.12
(1,102)	1:1:A:ILE:HG21	1:6:A:TRP:H	17	9.11
(1,102)	1:1:A:ILE:HG22	1:6:A:TRP:H	17	9.11
(1,102)	1:1:A:ILE:HG23	1:6:A:TRP:H	17	9.11
(1,316)	1:1:A:ILE:HD11	1:4:A:TRP:HB2	18	9.1
(1,316)	1:1:A:ILE:HD12	1:4:A:TRP:HB2	18	9.1
(1,316)	1:1:A:ILE:HD13	1:4:A:TRP:HB2	18	9.1
(1,209)	1:5:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB2	6	9.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,209)	1:5:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB3	6	9.1
(1,121)	1:8:A:TRP:H	1:11:A:TRP:H	1	9.1
(1,14)	1:7:A:LYS:H	1:11:A:TRP:H	5	9.1
(1,319)	1:1:A:ILE:HD11	1:7:A:LYS:HD2	4	9.09
(1,319)	1:1:A:ILE:HD11	1:7:A:LYS:HD3	4	9.09
(1,319)	1:1:A:ILE:HD12	1:7:A:LYS:HD2	4	9.09
(1,319)	1:1:A:ILE:HD12	1:7:A:LYS:HD3	4	9.09
(1,319)	1:1:A:ILE:HD13	1:7:A:LYS:HD2	4	9.09
(1,319)	1:1:A:ILE:HD13	1:7:A:LYS:HD3	4	9.09
(1,52)	1:5:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HE2	3	9.09
(1,52)	1:5:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HE3	3	9.09
(1,11)	1:2:A:LEU:H	1:4:A:TRP:HB2	3	9.09
(1,213)	1:1:A:ILE:HB	1:4:A:TRP:HB2	12	9.08
(1,199)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:HG21	13	9.08
(1,199)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:HG22	13	9.08
(1,199)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:HG23	13	9.08
(1,199)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:HG21	13	9.08
(1,199)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:HG22	13	9.08
(1,199)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:HG23	13	9.08
(1,171)	1:8:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD2	6	9.08
(1,171)	1:8:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD3	6	9.08
(1,78)	1:6:A:TRP:HB2	1:9:A:THR:H	16	9.08
(1,69)	1:6:A:TRP:HB2	1:9:A:THR:H	16	9.08
(1,289)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HA	17	9.07
(1,289)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HA	17	9.07
(1,138)	1:11:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	12	9.07
(1,133)	1:8:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:H	4	9.07
(1,121)	1:8:A:TRP:H	1:11:A:TRP:H	8	9.07
(1,121)	1:8:A:TRP:H	1:11:A:TRP:H	12	9.07
(1,38)	1:7:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:H	17	9.07
(1,38)	1:7:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:H	17	9.07
(1,307)	1:1:A:ILE:HD11	1:5:A:LYS:HA	5	9.06
(1,307)	1:1:A:ILE:HD12	1:5:A:LYS:HA	5	9.06
(1,307)	1:1:A:ILE:HD13	1:5:A:LYS:HA	5	9.06
(1,112)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:HB3	2	9.06
(1,107)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:HB3	2	9.06
(1,103)	1:6:A:TRP:H	1:9:A:THR:HG21	19	9.06
(1,103)	1:6:A:TRP:H	1:9:A:THR:HG22	19	9.06
(1,103)	1:6:A:TRP:H	1:9:A:THR:HG23	19	9.06
(1,35)	1:7:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:H	14	9.06
(1,35)	1:7:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:H	14	9.06
(1,210)	1:7:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB2	12	9.05

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,210)	1:7:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB3	12	9.05
(1,146)	1:6:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:H	13	9.05
(1,288)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HA	5	9.04
(1,288)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HA	5	9.04
(1,288)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HA	5	9.04
(1,237)	1:7:A:LYS:HB2	1:10:A:PRO:HB2	18	9.04
(1,237)	1:7:A:LYS:HB2	1:10:A:PRO:HB3	18	9.04
(1,237)	1:7:A:LYS:HB3	1:10:A:PRO:HB2	18	9.04
(1,237)	1:7:A:LYS:HB3	1:10:A:PRO:HB3	18	9.04
(1,234)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG2	15	9.03
(1,167)	1:5:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB2	1	9.03
(1,96)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG2	15	9.03
(1,9)	1:2:A:LEU:H	1:5:A:LYS:HG2	8	9.02
(1,9)	1:2:A:LEU:H	1:5:A:LYS:HG3	8	9.02
(1,146)	1:6:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:H	10	9.01
(1,61)	1:1:A:ILE:HG21	1:5:A:LYS:H	12	9.01
(1,61)	1:1:A:ILE:HG22	1:5:A:LYS:H	12	9.01
(1,61)	1:1:A:ILE:HG23	1:5:A:LYS:H	12	9.01
(1,307)	1:1:A:ILE:HD11	1:5:A:LYS:HA	15	9.0
(1,307)	1:1:A:ILE:HD12	1:5:A:LYS:HA	15	9.0
(1,307)	1:1:A:ILE:HD13	1:5:A:LYS:HA	15	9.0
(1,152)	1:10:A:PRO:HB2	1:12:A:ARG:HE	14	8.99
(1,152)	1:10:A:PRO:HB3	1:12:A:ARG:HE	14	8.99
(1,72)	1:7:A:LYS:HE2	1:13:A:ARG:HE	3	8.99
(1,72)	1:7:A:LYS:HE3	1:13:A:ARG:HE	3	8.99
(1,250)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:H	19	8.98
(1,173)	1:8:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HD2	2	8.98
(1,173)	1:8:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HD3	2	8.98
(1,152)	1:10:A:PRO:HB2	1:12:A:ARG:HE	17	8.98
(1,152)	1:10:A:PRO:HB3	1:12:A:ARG:HE	17	8.98
(1,148)	1:8:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:H	19	8.98
(1,131)	1:7:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:HE	10	8.98
(1,131)	1:7:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:HE	10	8.98
(1,121)	1:8:A:TRP:H	1:11:A:TRP:H	13	8.98
(1,98)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:H	19	8.98
(1,255)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	15	8.97
(1,99)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	15	8.97
(1,11)	1:2:A:LEU:H	1:4:A:TRP:HB2	9	8.97
(1,242)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HD2	9	8.96
(1,242)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HD3	9	8.96
(1,210)	1:7:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB2	16	8.96
(1,210)	1:7:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB3	16	8.96

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,195)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE2	8	8.96
(1,195)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE3	8	8.96
(1,112)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:HB3	8	8.96
(1,110)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:HB2	2	8.96
(1,107)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:HB3	8	8.96
(1,61)	1:1:A:ILE:HG21	1:5:A:LYS:H	14	8.96
(1,61)	1:1:A:ILE:HG22	1:5:A:LYS:H	14	8.96
(1,61)	1:1:A:ILE:HG23	1:5:A:LYS:H	14	8.96
(1,307)	1:1:A:ILE:HD11	1:5:A:LYS:HA	8	8.95
(1,307)	1:1:A:ILE:HD12	1:5:A:LYS:HA	8	8.95
(1,307)	1:1:A:ILE:HD13	1:5:A:LYS:HA	8	8.95
(1,263)	1:5:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HG2	6	8.95
(1,237)	1:7:A:LYS:HB2	1:10:A:PRO:HB2	11	8.95
(1,237)	1:7:A:LYS:HB2	1:10:A:PRO:HB3	11	8.95
(1,237)	1:7:A:LYS:HB3	1:10:A:PRO:HB2	11	8.95
(1,237)	1:7:A:LYS:HB3	1:10:A:PRO:HB3	11	8.95
(1,213)	1:1:A:ILE:HB	1:4:A:TRP:HB2	18	8.95
(1,146)	1:6:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:H	19	8.95
(1,316)	1:1:A:ILE:HD11	1:4:A:TRP:HB2	17	8.94
(1,316)	1:1:A:ILE:HD12	1:4:A:TRP:HB2	17	8.94
(1,316)	1:1:A:ILE:HD13	1:4:A:TRP:HB2	17	8.94
(1,121)	1:8:A:TRP:H	1:11:A:TRP:H	18	8.94
(1,138)	1:11:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	14	8.93
(1,288)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HA	8	8.92
(1,288)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HA	8	8.92
(1,288)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HA	8	8.92
(1,275)	1:5:A:LYS:HB2	1:11:A:TRP:H	18	8.92
(1,275)	1:5:A:LYS:HB3	1:11:A:TRP:H	18	8.92
(1,270)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	11	8.92
(1,136)	1:5:A:LYS:HB2	1:11:A:TRP:H	18	8.92
(1,136)	1:5:A:LYS:HB3	1:11:A:TRP:H	18	8.92
(1,116)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	11	8.92
(1,61)	1:1:A:ILE:HG21	1:5:A:LYS:H	18	8.92
(1,61)	1:1:A:ILE:HG22	1:5:A:LYS:H	18	8.92
(1,61)	1:1:A:ILE:HG23	1:5:A:LYS:H	18	8.92
(1,214)	1:6:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB2	2	8.91
(1,214)	1:6:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB3	2	8.91
(1,130)	1:9:A:THR:HB	1:12:A:ARG:HE	15	8.91
(1,93)	1:1:A:ILE:HB	1:6:A:TRP:H	1	8.91
(1,81)	1:6:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HB2	15	8.91
(1,81)	1:6:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HB3	15	8.91
(1,52)	1:5:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HE2	5	8.91

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,52)	1:5:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HE3	5	8.91
(1,10)	1:2:A:LEU:H	1:6:A:TRP:HB2	18	8.91
(1,214)	1:6:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB2	4	8.9
(1,214)	1:6:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB3	4	8.9
(1,264)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:HA	10	8.89
(1,264)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:HA	10	8.89
(1,237)	1:7:A:LYS:HB2	1:10:A:PRO:HB2	14	8.89
(1,237)	1:7:A:LYS:HB2	1:10:A:PRO:HB3	14	8.89
(1,237)	1:7:A:LYS:HB3	1:10:A:PRO:HB2	14	8.89
(1,237)	1:7:A:LYS:HB3	1:10:A:PRO:HB3	14	8.89
(1,205)	1:1:A:ILE:HB	1:5:A:LYS:HA	2	8.89
(1,108)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE2	12	8.89
(1,108)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE3	12	8.89
(1,74)	1:9:A:THR:HG21	1:13:A:ARG:HE	14	8.89
(1,74)	1:9:A:THR:HG22	1:13:A:ARG:HE	14	8.89
(1,74)	1:9:A:THR:HG23	1:13:A:ARG:HE	14	8.89
(1,309)	1:2:A:LEU:HD11	1:7:A:LYS:HA	9	8.88
(1,309)	1:2:A:LEU:HD12	1:7:A:LYS:HA	9	8.88
(1,309)	1:2:A:LEU:HD13	1:7:A:LYS:HA	9	8.88
(1,309)	1:2:A:LEU:HD21	1:7:A:LYS:HA	9	8.88
(1,309)	1:2:A:LEU:HD22	1:7:A:LYS:HA	9	8.88
(1,309)	1:2:A:LEU:HD23	1:7:A:LYS:HA	9	8.88
(1,284)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HE	10	8.88
(1,284)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HE	10	8.88
(1,284)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HE	10	8.88
(1,141)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HE	10	8.88
(1,141)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HE	10	8.88
(1,141)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HE	10	8.88
(1,110)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:HB2	1	8.88
(1,93)	1:1:A:ILE:HB	1:6:A:TRP:H	14	8.88
(1,194)	1:7:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:HA	10	8.87
(1,194)	1:7:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:HA	10	8.87
(1,130)	1:9:A:THR:HB	1:12:A:ARG:HE	4	8.87
(1,61)	1:1:A:ILE:HG21	1:5:A:LYS:H	10	8.87
(1,61)	1:1:A:ILE:HG22	1:5:A:LYS:H	10	8.87
(1,61)	1:1:A:ILE:HG23	1:5:A:LYS:H	10	8.87
(1,275)	1:5:A:LYS:HB2	1:11:A:TRP:H	11	8.86
(1,275)	1:5:A:LYS:HB3	1:11:A:TRP:H	11	8.86
(1,136)	1:5:A:LYS:HB2	1:11:A:TRP:H	11	8.86
(1,136)	1:5:A:LYS:HB3	1:11:A:TRP:H	11	8.86
(1,15)	1:7:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HE	6	8.86
(1,297)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD2	13	8.85

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,297)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD3	13	8.85
(1,297)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD2	13	8.85
(1,297)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD3	13	8.85
(1,297)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD2	13	8.85
(1,297)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD3	13	8.85
(1,209)	1:5:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB2	7	8.85
(1,209)	1:5:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB3	7	8.85
(1,205)	1:1:A:ILE:HB	1:5:A:LYS:HA	4	8.85
(1,182)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD2	13	8.85
(1,182)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD3	13	8.85
(1,182)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD2	13	8.85
(1,182)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD3	13	8.85
(1,182)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD2	13	8.85
(1,182)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD3	13	8.85
(1,148)	1:8:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:H	13	8.85
(1,242)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HD2	15	8.84
(1,242)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HD3	15	8.84
(1,215)	1:8:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB2	1	8.84
(1,215)	1:8:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB3	1	8.84
(1,210)	1:7:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB2	7	8.84
(1,210)	1:7:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB3	7	8.84
(1,121)	1:8:A:TRP:H	1:11:A:TRP:H	11	8.84
(1,316)	1:1:A:ILE:HD11	1:4:A:TRP:HB2	20	8.83
(1,316)	1:1:A:ILE:HD12	1:4:A:TRP:HB2	20	8.83
(1,316)	1:1:A:ILE:HD13	1:4:A:TRP:HB2	20	8.83
(1,281)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HE	20	8.83
(1,281)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HE	20	8.83
(1,137)	1:12:A:ARG:HE	1:13:A:ARG:HG3	11	8.83
(1,68)	1:11:A:TRP:HB2	1:13:A:ARG:HE	4	8.83
(1,68)	1:11:A:TRP:HB3	1:13:A:ARG:HE	4	8.83
(1,295)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD2	5	8.82
(1,295)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD3	5	8.82
(1,295)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD2	5	8.82
(1,295)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD3	5	8.82
(1,225)	1:7:A:LYS:HB2	1:12:A:ARG:H	19	8.82
(1,225)	1:7:A:LYS:HB3	1:12:A:ARG:H	19	8.82
(1,205)	1:1:A:ILE:HB	1:5:A:LYS:HA	8	8.82
(1,171)	1:8:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD2	11	8.82
(1,171)	1:8:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD3	11	8.82
(1,295)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD2	2	8.81
(1,295)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD3	2	8.81
(1,295)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD2	2	8.81

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,295)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD3	2	8.81
(1,153)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:HB2	16	8.81
(1,110)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:HB2	4	8.81
(1,103)	1:6:A:TRP:H	1:9:A:THR:HG21	16	8.81
(1,103)	1:6:A:TRP:H	1:9:A:THR:HG22	16	8.81
(1,103)	1:6:A:TRP:H	1:9:A:THR:HG23	16	8.81
(1,286)	1:1:A:ILE:HG21	1:5:A:LYS:HA	14	8.8
(1,286)	1:1:A:ILE:HG22	1:5:A:LYS:HA	14	8.8
(1,286)	1:1:A:ILE:HG23	1:5:A:LYS:HA	14	8.8
(1,148)	1:8:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:H	15	8.8
(1,127)	1:7:A:LYS:HA	1:12:A:ARG:HE	6	8.8
(1,89)	1:3:A:PRO:HA	1:6:A:TRP:H	15	8.8
(1,52)	1:5:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HE2	11	8.8
(1,52)	1:5:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HE3	11	8.8
(1,260)	1:2:A:LEU:HB3	1:5:A:LYS:HA	20	8.79
(1,210)	1:7:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB2	18	8.79
(1,210)	1:7:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB3	18	8.79
(1,128)	1:7:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:H	6	8.79
(1,121)	1:8:A:TRP:H	1:11:A:TRP:H	9	8.79
(1,74)	1:9:A:THR:HG21	1:13:A:ARG:HE	19	8.79
(1,74)	1:9:A:THR:HG22	1:13:A:ARG:HE	19	8.79
(1,74)	1:9:A:THR:HG23	1:13:A:ARG:HE	19	8.79
(1,71)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:H	13	8.79
(1,71)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:H	13	8.79
(1,11)	1:2:A:LEU:H	1:4:A:TRP:HB2	1	8.79
(1,297)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD2	12	8.78
(1,297)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD3	12	8.78
(1,297)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD2	12	8.78
(1,297)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD3	12	8.78
(1,297)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD2	12	8.78
(1,297)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD3	12	8.78
(1,182)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD2	12	8.78
(1,182)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD3	12	8.78
(1,182)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD2	12	8.78
(1,182)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD3	12	8.78
(1,182)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD2	12	8.78
(1,182)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD3	12	8.78
(1,274)	1:5:A:LYS:HB2	1:12:A:ARG:HE	18	8.77
(1,274)	1:5:A:LYS:HB3	1:12:A:ARG:HE	18	8.77
(1,121)	1:8:A:TRP:H	1:11:A:TRP:H	2	8.77
(1,262)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD2	5	8.76
(1,262)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD3	5	8.76

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,196)	1:3:A:PRO:HA	1:6:A:TRP:HB3	6	8.76
(1,242)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HD2	10	8.75
(1,242)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HD3	10	8.75
(1,132)	1:7:A:LYS:HE2	1:11:A:TRP:H	9	8.75
(1,132)	1:7:A:LYS:HE3	1:11:A:TRP:H	9	8.75
(1,95)	1:2:A:LEU:HB2	1:6:A:TRP:H	13	8.75
(1,38)	1:7:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:H	14	8.75
(1,38)	1:7:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:H	14	8.75
(1,265)	1:2:A:LEU:HB3	1:7:A:LYS:HA	5	8.74
(1,199)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:HG21	6	8.74
(1,199)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:HG22	6	8.74
(1,199)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:HG23	6	8.74
(1,199)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:HG21	6	8.74
(1,199)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:HG22	6	8.74
(1,199)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:HG23	6	8.74
(1,58)	1:5:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HD2	11	8.74
(1,58)	1:5:A:LYS:H	1:12:A:ARG:HD3	11	8.74
(1,14)	1:7:A:LYS:H	1:11:A:TRP:H	8	8.74
(1,199)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:HG21	18	8.73
(1,199)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:HG22	18	8.73
(1,199)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:HG23	18	8.73
(1,199)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:HG21	18	8.73
(1,199)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:HG22	18	8.73
(1,199)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:HG23	18	8.73
(1,108)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE2	16	8.73
(1,108)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE3	16	8.73
(1,72)	1:7:A:LYS:HE2	1:13:A:ARG:HE	10	8.73
(1,72)	1:7:A:LYS:HE3	1:13:A:ARG:HE	10	8.73
(1,35)	1:7:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:H	19	8.73
(1,35)	1:7:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:H	19	8.73
(1,283)	1:5:A:LYS:HG2	1:11:A:TRP:H	6	8.72
(1,283)	1:5:A:LYS:HG3	1:11:A:TRP:H	6	8.72
(1,142)	1:5:A:LYS:HG2	1:11:A:TRP:H	6	8.72
(1,142)	1:5:A:LYS:HG3	1:11:A:TRP:H	6	8.72
(1,131)	1:7:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:HE	20	8.72
(1,131)	1:7:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:HE	20	8.72
(1,84)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD2	6	8.72
(1,84)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD3	6	8.72
(1,205)	1:1:A:ILE:HB	1:5:A:LYS:HA	3	8.71
(1,130)	1:9:A:THR:HB	1:12:A:ARG:HE	1	8.7
(1,172)	1:5:A:LYS:HE2	1:8:A:TRP:H	7	8.69
(1,172)	1:5:A:LYS:HE3	1:8:A:TRP:H	7	8.69

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,115)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD2	6	8.69
(1,115)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD3	6	8.69
(1,92)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE2	14	8.69
(1,92)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE3	14	8.69
(1,244)	1:7:A:LYS:HD2	1:10:A:PRO:HB2	5	8.68
(1,244)	1:7:A:LYS:HD2	1:10:A:PRO:HB3	5	8.68
(1,244)	1:7:A:LYS:HD3	1:10:A:PRO:HB2	5	8.68
(1,244)	1:7:A:LYS:HD3	1:10:A:PRO:HB3	5	8.68
(1,108)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE2	7	8.68
(1,108)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE3	7	8.68
(1,71)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:H	7	8.68
(1,71)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:H	7	8.68
(1,9)	1:2:A:LEU:H	1:5:A:LYS:HG2	16	8.68
(1,9)	1:2:A:LEU:H	1:5:A:LYS:HG3	16	8.68
(1,299)	1:1:A:ILE:HG21	1:6:A:TRP:HB3	9	8.67
(1,299)	1:1:A:ILE:HG22	1:6:A:TRP:HB3	9	8.67
(1,299)	1:1:A:ILE:HG23	1:6:A:TRP:HB3	9	8.67
(1,225)	1:7:A:LYS:HB2	1:12:A:ARG:H	17	8.67
(1,225)	1:7:A:LYS:HB3	1:12:A:ARG:H	17	8.67
(1,202)	1:1:A:ILE:HG21	1:6:A:TRP:HB3	9	8.67
(1,202)	1:1:A:ILE:HG22	1:6:A:TRP:HB3	9	8.67
(1,202)	1:1:A:ILE:HG23	1:6:A:TRP:HB3	9	8.67
(1,199)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:HG21	10	8.67
(1,199)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:HG22	10	8.67
(1,199)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:HG23	10	8.67
(1,199)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:HG21	10	8.67
(1,199)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:HG22	10	8.67
(1,199)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:HG23	10	8.67
(1,172)	1:5:A:LYS:HE2	1:8:A:TRP:H	15	8.67
(1,172)	1:5:A:LYS:HE3	1:8:A:TRP:H	15	8.67
(1,130)	1:9:A:THR:HB	1:12:A:ARG:HE	17	8.67
(1,89)	1:3:A:PRO:HA	1:6:A:TRP:H	13	8.67
(1,210)	1:7:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB2	9	8.66
(1,210)	1:7:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB3	9	8.66
(1,118)	1:1:A:ILE:HG21	1:4:A:TRP:H	6	8.66
(1,118)	1:1:A:ILE:HG22	1:4:A:TRP:H	6	8.66
(1,118)	1:1:A:ILE:HG23	1:4:A:TRP:H	6	8.66
(1,93)	1:1:A:ILE:HB	1:6:A:TRP:H	15	8.66
(1,287)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HG2	14	8.65
(1,287)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HG3	14	8.65
(1,132)	1:7:A:LYS:HE2	1:11:A:TRP:H	1	8.64
(1,132)	1:7:A:LYS:HE3	1:11:A:TRP:H	1	8.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,93)	1:1:A:ILE:HB	1:6:A:TRP:H	19	8.64
(1,274)	1:5:A:LYS:HB2	1:12:A:ARG:HE	8	8.63
(1,274)	1:5:A:LYS:HB3	1:12:A:ARG:HE	8	8.63
(1,135)	1:5:A:LYS:HB2	1:12:A:ARG:HE	20	8.63
(1,135)	1:5:A:LYS:HB3	1:12:A:ARG:HE	20	8.63
(1,78)	1:6:A:TRP:HB2	1:9:A:THR:H	1	8.63
(1,69)	1:6:A:TRP:HB2	1:9:A:THR:H	1	8.63
(1,131)	1:7:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:HE	5	8.62
(1,131)	1:7:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:HE	5	8.62
(1,295)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD2	3	8.61
(1,295)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD3	3	8.61
(1,295)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD2	3	8.61
(1,295)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD3	3	8.61
(1,213)	1:1:A:ILE:HB	1:4:A:TRP:HB2	10	8.61
(1,10)	1:2:A:LEU:H	1:6:A:TRP:HB2	19	8.61
(1,264)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:HA	14	8.6
(1,264)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:HA	14	8.6
(1,260)	1:2:A:LEU:HB3	1:5:A:LYS:HA	7	8.6
(1,195)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE2	4	8.6
(1,195)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE3	4	8.6
(1,137)	1:12:A:ARG:HE	1:13:A:ARG:HG3	13	8.6
(1,166)	1:5:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:HB2	18	8.59
(1,166)	1:5:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:HB3	18	8.59
(1,121)	1:8:A:TRP:H	1:11:A:TRP:H	4	8.59
(1,93)	1:1:A:ILE:HB	1:6:A:TRP:H	6	8.59
(1,10)	1:2:A:LEU:H	1:6:A:TRP:HB2	4	8.59
(1,291)	1:7:A:LYS:HA	1:9:A:THR:HG21	3	8.58
(1,291)	1:7:A:LYS:HA	1:9:A:THR:HG22	3	8.58
(1,291)	1:7:A:LYS:HA	1:9:A:THR:HG23	3	8.58
(1,211)	1:1:A:ILE:HB	1:6:A:TRP:HB2	2	8.58
(1,167)	1:5:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB2	5	8.58
(1,52)	1:5:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HE2	9	8.58
(1,52)	1:5:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HE3	9	8.58
(1,103)	1:6:A:TRP:H	1:9:A:THR:HG21	1	8.57
(1,103)	1:6:A:TRP:H	1:9:A:THR:HG22	1	8.57
(1,103)	1:6:A:TRP:H	1:9:A:THR:HG23	1	8.57
(1,93)	1:1:A:ILE:HB	1:6:A:TRP:H	8	8.57
(1,242)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HD2	17	8.56
(1,242)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HD3	17	8.56
(1,210)	1:7:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB2	2	8.56
(1,210)	1:7:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB3	2	8.56
(1,204)	1:6:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG21	20	8.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,204)	1:6:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG22	20	8.56
(1,204)	1:6:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG23	20	8.56
(1,173)	1:8:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HD2	10	8.56
(1,173)	1:8:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HD3	10	8.56
(1,133)	1:8:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:H	16	8.56
(1,81)	1:6:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HB2	18	8.56
(1,81)	1:6:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HB3	18	8.56
(1,306)	1:2:A:LEU:HD11	1:5:A:LYS:HA	1	8.55
(1,306)	1:2:A:LEU:HD12	1:5:A:LYS:HA	1	8.55
(1,306)	1:2:A:LEU:HD13	1:5:A:LYS:HA	1	8.55
(1,306)	1:2:A:LEU:HD21	1:5:A:LYS:HA	1	8.55
(1,306)	1:2:A:LEU:HD22	1:5:A:LYS:HA	1	8.55
(1,306)	1:2:A:LEU:HD23	1:5:A:LYS:HA	1	8.55
(1,242)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HD2	2	8.55
(1,242)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HD3	2	8.55
(1,228)	1:2:A:LEU:HB2	1:4:A:TRP:HB2	9	8.54
(1,281)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HE	16	8.53
(1,281)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HE	16	8.53
(1,292)	1:5:A:LYS:HG2	1:7:A:LYS:HA	9	8.52
(1,292)	1:5:A:LYS:HG3	1:7:A:LYS:HA	9	8.52
(1,237)	1:7:A:LYS:HB2	1:10:A:PRO:HB2	5	8.52
(1,237)	1:7:A:LYS:HB2	1:10:A:PRO:HB3	5	8.52
(1,237)	1:7:A:LYS:HB3	1:10:A:PRO:HB2	5	8.52
(1,237)	1:7:A:LYS:HB3	1:10:A:PRO:HB3	5	8.52
(1,199)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:HG21	5	8.52
(1,199)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:HG22	5	8.52
(1,199)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:HG23	5	8.52
(1,199)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:HG21	5	8.52
(1,199)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:HG22	5	8.52
(1,199)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:HG23	5	8.52
(1,242)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HD2	14	8.51
(1,242)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HD3	14	8.51
(1,211)	1:1:A:ILE:HB	1:6:A:TRP:HB2	17	8.51
(1,152)	1:10:A:PRO:HB2	1:12:A:ARG:HE	2	8.51
(1,152)	1:10:A:PRO:HB3	1:12:A:ARG:HE	2	8.51
(1,133)	1:8:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:H	6	8.51
(1,110)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:HB2	3	8.51
(1,237)	1:7:A:LYS:HB2	1:10:A:PRO:HB2	7	8.5
(1,237)	1:7:A:LYS:HB2	1:10:A:PRO:HB3	7	8.5
(1,237)	1:7:A:LYS:HB3	1:10:A:PRO:HB2	7	8.5
(1,237)	1:7:A:LYS:HB3	1:10:A:PRO:HB3	7	8.5
(1,11)	1:2:A:LEU:H	1:4:A:TRP:HB2	6	8.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,201)	1:5:A:LYS:HG2	1:7:A:LYS:HE2	14	8.49
(1,201)	1:5:A:LYS:HG2	1:7:A:LYS:HE3	14	8.49
(1,201)	1:5:A:LYS:HG3	1:7:A:LYS:HE2	14	8.49
(1,201)	1:5:A:LYS:HG3	1:7:A:LYS:HE3	14	8.49
(1,145)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	17	8.49
(1,145)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HE	17	8.49
(1,138)	1:11:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	6	8.49
(1,260)	1:2:A:LEU:HB3	1:5:A:LYS:HA	11	8.48
(1,279)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HD2	4	8.47
(1,279)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HD3	4	8.47
(1,205)	1:1:A:ILE:HB	1:5:A:LYS:HA	1	8.47
(1,2)	1:2:A:LEU:H	1:5:A:LYS:HA	8	8.47
(1,295)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD2	4	8.46
(1,295)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD3	4	8.46
(1,295)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD2	4	8.46
(1,295)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD3	4	8.46
(1,281)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HE	18	8.46
(1,281)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HE	18	8.46
(1,213)	1:1:A:ILE:HB	1:4:A:TRP:HB2	19	8.46
(1,210)	1:7:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB2	20	8.46
(1,210)	1:7:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB3	20	8.46
(1,197)	1:5:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB3	17	8.46
(1,195)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE2	19	8.46
(1,195)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE3	19	8.46
(1,172)	1:5:A:LYS:HE2	1:8:A:TRP:H	20	8.46
(1,172)	1:5:A:LYS:HE3	1:8:A:TRP:H	20	8.46
(1,135)	1:5:A:LYS:HB2	1:12:A:ARG:HE	2	8.46
(1,135)	1:5:A:LYS:HB3	1:12:A:ARG:HE	2	8.46
(1,112)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:HB3	6	8.46
(1,107)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:HB3	6	8.46
(1,113)	1:2:A:LEU:H	1:7:A:LYS:HD2	7	8.46
(1,113)	1:2:A:LEU:H	1:7:A:LYS:HD3	7	8.46
(1,280)	1:5:A:LYS:HD2	1:7:A:LYS:HA	18	8.45
(1,280)	1:5:A:LYS:HD3	1:7:A:LYS:HA	18	8.45
(1,201)	1:5:A:LYS:HG2	1:7:A:LYS:HE2	20	8.45
(1,201)	1:5:A:LYS:HG2	1:7:A:LYS:HE3	20	8.45
(1,201)	1:5:A:LYS:HG3	1:7:A:LYS:HE2	20	8.45
(1,201)	1:5:A:LYS:HG3	1:7:A:LYS:HE3	20	8.45
(1,153)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:HB2	6	8.45
(1,92)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE2	5	8.45
(1,92)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE3	5	8.45
(1,283)	1:5:A:LYS:HG2	1:11:A:TRP:H	3	8.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,283)	1:5:A:LYS:HG3	1:11:A:TRP:H	3	8.44
(1,195)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE2	20	8.44
(1,195)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE3	20	8.44
(1,180)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD2	5	8.44
(1,180)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD3	5	8.44
(1,180)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD2	5	8.44
(1,180)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD3	5	8.44
(1,142)	1:5:A:LYS:HG2	1:11:A:TRP:H	3	8.44
(1,142)	1:5:A:LYS:HG3	1:11:A:TRP:H	3	8.44
(1,279)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HD2	15	8.43
(1,279)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HD3	15	8.43
(1,237)	1:7:A:LYS:HB2	1:10:A:PRO:HB2	20	8.43
(1,237)	1:7:A:LYS:HB2	1:10:A:PRO:HB3	20	8.43
(1,237)	1:7:A:LYS:HB3	1:10:A:PRO:HB2	20	8.43
(1,237)	1:7:A:LYS:HB3	1:10:A:PRO:HB3	20	8.43
(1,180)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD2	2	8.43
(1,180)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD3	2	8.43
(1,180)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD2	2	8.43
(1,180)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD3	2	8.43
(1,148)	1:8:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:H	9	8.43
(1,133)	1:8:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:H	8	8.43
(1,68)	1:11:A:TRP:HB2	1:13:A:ARG:HE	3	8.43
(1,68)	1:11:A:TRP:HB3	1:13:A:ARG:HE	3	8.43
(1,2)	1:2:A:LEU:H	1:5:A:LYS:HA	2	8.43
(1,133)	1:8:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:H	12	8.42
(1,118)	1:1:A:ILE:HG21	1:4:A:TRP:H	16	8.42
(1,118)	1:1:A:ILE:HG22	1:4:A:TRP:H	16	8.42
(1,118)	1:1:A:ILE:HG23	1:4:A:TRP:H	16	8.42
(1,92)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE2	18	8.42
(1,92)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE3	18	8.42
(1,297)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD2	8	8.41
(1,297)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD3	8	8.41
(1,297)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD2	8	8.41
(1,297)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD3	8	8.41
(1,297)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD2	8	8.41
(1,297)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD3	8	8.41
(1,182)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD2	8	8.41
(1,182)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD3	8	8.41
(1,182)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD2	8	8.41
(1,182)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD3	8	8.41
(1,182)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD2	8	8.41
(1,182)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD3	8	8.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,165)	1:3:A:PRO:HA	1:6:A:TRP:HB2	6	8.41
(1,94)	1:6:A:TRP:H	1:10:A:PRO:HB2	4	8.41
(1,94)	1:6:A:TRP:H	1:10:A:PRO:HB3	4	8.41
(1,204)	1:6:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG21	3	8.4
(1,204)	1:6:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG22	3	8.4
(1,204)	1:6:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG23	3	8.4
(1,128)	1:7:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:H	19	8.4
(1,316)	1:1:A:ILE:HD11	1:4:A:TRP:HB2	2	8.39
(1,316)	1:1:A:ILE:HD12	1:4:A:TRP:HB2	2	8.39
(1,316)	1:1:A:ILE:HD13	1:4:A:TRP:HB2	2	8.39
(1,213)	1:1:A:ILE:HB	1:4:A:TRP:HB2	5	8.39
(1,288)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HA	9	8.38
(1,288)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HA	9	8.38
(1,288)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HA	9	8.38
(1,283)	1:5:A:LYS:HG2	1:11:A:TRP:H	18	8.38
(1,283)	1:5:A:LYS:HG3	1:11:A:TRP:H	18	8.38
(1,260)	1:2:A:LEU:HB3	1:5:A:LYS:HA	18	8.38
(1,209)	1:5:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB2	19	8.38
(1,209)	1:5:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB3	19	8.38
(1,142)	1:5:A:LYS:HG2	1:11:A:TRP:H	18	8.38
(1,142)	1:5:A:LYS:HG3	1:11:A:TRP:H	18	8.38
(1,14)	1:7:A:LYS:H	1:11:A:TRP:H	18	8.38
(1,172)	1:5:A:LYS:HE2	1:8:A:TRP:H	18	8.37
(1,172)	1:5:A:LYS:HE3	1:8:A:TRP:H	18	8.37
(1,68)	1:11:A:TRP:HB2	1:13:A:ARG:HE	18	8.37
(1,68)	1:11:A:TRP:HB3	1:13:A:ARG:HE	18	8.37
(1,306)	1:2:A:LEU:HD11	1:5:A:LYS:HA	7	8.36
(1,306)	1:2:A:LEU:HD12	1:5:A:LYS:HA	7	8.36
(1,306)	1:2:A:LEU:HD13	1:5:A:LYS:HA	7	8.36
(1,306)	1:2:A:LEU:HD21	1:5:A:LYS:HA	7	8.36
(1,306)	1:2:A:LEU:HD22	1:5:A:LYS:HA	7	8.36
(1,306)	1:2:A:LEU:HD23	1:5:A:LYS:HA	7	8.36
(1,228)	1:2:A:LEU:HB2	1:4:A:TRP:HB2	1	8.36
(1,199)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:HG21	15	8.36
(1,199)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:HG22	15	8.36
(1,199)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:HG23	15	8.36
(1,199)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:HG21	15	8.36
(1,199)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:HG22	15	8.36
(1,199)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:HG23	15	8.36
(1,152)	1:10:A:PRO:HB2	1:12:A:ARG:HE	4	8.36
(1,152)	1:10:A:PRO:HB3	1:12:A:ARG:HE	4	8.36
(1,262)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD2	3	8.35

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,262)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD3	3	8.35
(1,262)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD2	11	8.35
(1,262)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD3	11	8.35
(1,153)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:HB2	20	8.35
(1,103)	1:6:A:TRP:H	1:9:A:THR:HG21	12	8.35
(1,103)	1:6:A:TRP:H	1:9:A:THR:HG22	12	8.35
(1,103)	1:6:A:TRP:H	1:9:A:THR:HG23	12	8.35
(1,89)	1:3:A:PRO:HA	1:6:A:TRP:H	8	8.35
(1,309)	1:2:A:LEU:HD11	1:7:A:LYS:HA	4	8.34
(1,309)	1:2:A:LEU:HD12	1:7:A:LYS:HA	4	8.34
(1,309)	1:2:A:LEU:HD13	1:7:A:LYS:HA	4	8.34
(1,309)	1:2:A:LEU:HD21	1:7:A:LYS:HA	4	8.34
(1,309)	1:2:A:LEU:HD22	1:7:A:LYS:HA	4	8.34
(1,309)	1:2:A:LEU:HD23	1:7:A:LYS:HA	4	8.34
(1,283)	1:5:A:LYS:HG2	1:11:A:TRP:H	17	8.34
(1,283)	1:5:A:LYS:HG3	1:11:A:TRP:H	17	8.34
(1,201)	1:5:A:LYS:HG2	1:7:A:LYS:HE2	4	8.34
(1,201)	1:5:A:LYS:HG2	1:7:A:LYS:HE3	4	8.34
(1,201)	1:5:A:LYS:HG3	1:7:A:LYS:HE2	4	8.34
(1,201)	1:5:A:LYS:HG3	1:7:A:LYS:HE3	4	8.34
(1,142)	1:5:A:LYS:HG2	1:11:A:TRP:H	17	8.34
(1,142)	1:5:A:LYS:HG3	1:11:A:TRP:H	17	8.34
(1,262)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD2	14	8.32
(1,262)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD3	14	8.32
(1,232)	1:2:A:LEU:HB2	1:6:A:TRP:H	13	8.32
(1,201)	1:5:A:LYS:HG2	1:7:A:LYS:HE2	13	8.32
(1,201)	1:5:A:LYS:HG2	1:7:A:LYS:HE3	13	8.32
(1,201)	1:5:A:LYS:HG3	1:7:A:LYS:HE2	13	8.32
(1,201)	1:5:A:LYS:HG3	1:7:A:LYS:HE3	13	8.32
(1,61)	1:1:A:ILE:HG21	1:5:A:LYS:H	4	8.32
(1,61)	1:1:A:ILE:HG22	1:5:A:LYS:H	4	8.32
(1,61)	1:1:A:ILE:HG23	1:5:A:LYS:H	4	8.32
(1,316)	1:1:A:ILE:HD11	1:4:A:TRP:HB2	15	8.31
(1,316)	1:1:A:ILE:HD12	1:4:A:TRP:HB2	15	8.31
(1,316)	1:1:A:ILE:HD13	1:4:A:TRP:HB2	15	8.31
(1,316)	1:1:A:ILE:HD11	1:4:A:TRP:HB2	19	8.31
(1,316)	1:1:A:ILE:HD12	1:4:A:TRP:HB2	19	8.31
(1,316)	1:1:A:ILE:HD13	1:4:A:TRP:HB2	19	8.31
(1,309)	1:2:A:LEU:HD11	1:7:A:LYS:HA	19	8.31
(1,309)	1:2:A:LEU:HD12	1:7:A:LYS:HA	19	8.31
(1,309)	1:2:A:LEU:HD13	1:7:A:LYS:HA	19	8.31
(1,309)	1:2:A:LEU:HD21	1:7:A:LYS:HA	19	8.31

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,309)	1:2:A:LEU:HD22	1:7:A:LYS:HA	19	8.31
(1,309)	1:2:A:LEU:HD23	1:7:A:LYS:HA	19	8.31
(1,255)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	3	8.31
(1,150)	1:8:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	6	8.31
(1,99)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	3	8.31
(1,71)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:H	11	8.31
(1,71)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:H	11	8.31
(1,280)	1:5:A:LYS:HD2	1:7:A:LYS:HA	1	8.3
(1,280)	1:5:A:LYS:HD3	1:7:A:LYS:HA	1	8.3
(1,148)	1:8:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:H	20	8.29
(1,237)	1:7:A:LYS:HB2	1:10:A:PRO:HB2	8	8.28
(1,237)	1:7:A:LYS:HB2	1:10:A:PRO:HB3	8	8.28
(1,237)	1:7:A:LYS:HB3	1:10:A:PRO:HB2	8	8.28
(1,237)	1:7:A:LYS:HB3	1:10:A:PRO:HB3	8	8.28
(1,115)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD2	14	8.28
(1,115)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD3	14	8.28
(1,68)	1:11:A:TRP:HB2	1:13:A:ARG:HE	19	8.28
(1,68)	1:11:A:TRP:HB3	1:13:A:ARG:HE	19	8.28
(1,204)	1:6:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG21	1	8.27
(1,204)	1:6:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG22	1	8.27
(1,204)	1:6:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG23	1	8.27
(1,95)	1:2:A:LEU:HB2	1:6:A:TRP:H	15	8.27
(1,89)	1:3:A:PRO:HA	1:6:A:TRP:H	4	8.27
(1,216)	1:4:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB2	4	8.26
(1,216)	1:4:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB3	4	8.26
(1,118)	1:1:A:ILE:HG21	1:4:A:TRP:H	3	8.26
(1,118)	1:1:A:ILE:HG22	1:4:A:TRP:H	3	8.26
(1,118)	1:1:A:ILE:HG23	1:4:A:TRP:H	3	8.26
(1,11)	1:2:A:LEU:H	1:4:A:TRP:HB2	15	8.26
(1,295)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD2	20	8.25
(1,295)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD3	20	8.25
(1,295)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD2	20	8.25
(1,295)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD3	20	8.25
(1,279)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HD2	8	8.25
(1,279)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HD3	8	8.25
(1,165)	1:3:A:PRO:HA	1:6:A:TRP:HB2	2	8.25
(1,286)	1:1:A:ILE:HG21	1:5:A:LYS:HA	10	8.24
(1,286)	1:1:A:ILE:HG22	1:5:A:LYS:HA	10	8.24
(1,286)	1:1:A:ILE:HG23	1:5:A:LYS:HA	10	8.24
(1,148)	1:8:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:H	4	8.24
(1,137)	1:12:A:ARG:HE	1:13:A:ARG:HG3	3	8.24
(1,245)	1:10:A:PRO:HB2	1:12:A:ARG:HG2	13	8.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,245)	1:10:A:PRO:HB3	1:12:A:ARG:HG2	13	8.23
(1,180)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD2	3	8.23
(1,180)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD3	3	8.23
(1,180)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD2	3	8.23
(1,180)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD3	3	8.23
(1,148)	1:8:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:H	2	8.22
(1,92)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE2	6	8.22
(1,92)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE3	6	8.22
(1,14)	1:7:A:LYS:H	1:11:A:TRP:H	14	8.22
(1,118)	1:1:A:ILE:HG21	1:4:A:TRP:H	5	8.21
(1,118)	1:1:A:ILE:HG22	1:4:A:TRP:H	5	8.21
(1,118)	1:1:A:ILE:HG23	1:4:A:TRP:H	5	8.21
(1,80)	1:4:A:TRP:HB2	1:6:A:TRP:H	4	8.21
(1,77)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB2	20	8.21
(1,77)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB3	20	8.21
(1,67)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB2	20	8.21
(1,67)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB3	20	8.21
(1,39)	1:6:A:TRP:HB3	1:8:A:TRP:H	16	8.21
(1,284)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HE	17	8.2
(1,284)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HE	17	8.2
(1,284)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HE	17	8.2
(1,245)	1:10:A:PRO:HB2	1:12:A:ARG:HG2	10	8.2
(1,245)	1:10:A:PRO:HB3	1:12:A:ARG:HG2	10	8.2
(1,214)	1:6:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB2	6	8.2
(1,214)	1:6:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB3	6	8.2
(1,141)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HE	17	8.2
(1,141)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HE	17	8.2
(1,141)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HE	17	8.2
(1,132)	1:7:A:LYS:HE2	1:11:A:TRP:H	15	8.2
(1,132)	1:7:A:LYS:HE3	1:11:A:TRP:H	15	8.2
(1,112)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:HB3	1	8.2
(1,107)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:HB3	1	8.2
(1,80)	1:4:A:TRP:HB2	1:6:A:TRP:H	11	8.2
(1,42)	1:6:A:TRP:HB2	1:8:A:TRP:H	8	8.2
(1,39)	1:6:A:TRP:HB3	1:8:A:TRP:H	11	8.2
(1,308)	1:1:A:ILE:HD11	1:3:A:PRO:HA	19	8.18
(1,308)	1:1:A:ILE:HD12	1:3:A:PRO:HA	19	8.18
(1,308)	1:1:A:ILE:HD13	1:3:A:PRO:HA	19	8.18
(1,226)	1:2:A:LEU:HB2	1:6:A:TRP:HB2	18	8.18
(1,154)	1:2:A:LEU:HB3	1:4:A:TRP:HB2	15	8.18
(1,309)	1:2:A:LEU:HD11	1:7:A:LYS:HA	5	8.17
(1,309)	1:2:A:LEU:HD12	1:7:A:LYS:HA	5	8.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,309)	1:2:A:LEU:HD13	1:7:A:LYS:HA	5	8.17
(1,309)	1:2:A:LEU:HD21	1:7:A:LYS:HA	5	8.17
(1,309)	1:2:A:LEU:HD22	1:7:A:LYS:HA	5	8.17
(1,309)	1:2:A:LEU:HD23	1:7:A:LYS:HA	5	8.17
(1,283)	1:5:A:LYS:HG2	1:11:A:TRP:H	7	8.17
(1,283)	1:5:A:LYS:HG3	1:11:A:TRP:H	7	8.17
(1,142)	1:5:A:LYS:HG2	1:11:A:TRP:H	7	8.17
(1,142)	1:5:A:LYS:HG3	1:11:A:TRP:H	7	8.17
(1,139)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HE	7	8.17
(1,139)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HE	7	8.17
(1,93)	1:1:A:ILE:HB	1:6:A:TRP:H	5	8.17
(1,297)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD2	18	8.16
(1,297)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD3	18	8.16
(1,297)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD2	18	8.16
(1,297)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD3	18	8.16
(1,297)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD2	18	8.16
(1,297)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD3	18	8.16
(1,291)	1:7:A:LYS:HA	1:9:A:THR:HG21	10	8.16
(1,291)	1:7:A:LYS:HA	1:9:A:THR:HG22	10	8.16
(1,291)	1:7:A:LYS:HA	1:9:A:THR:HG23	10	8.16
(1,182)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD2	18	8.16
(1,182)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD3	18	8.16
(1,182)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD2	18	8.16
(1,182)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD3	18	8.16
(1,182)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD2	18	8.16
(1,182)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD3	18	8.16
(1,118)	1:1:A:ILE:HG21	1:4:A:TRP:H	19	8.16
(1,118)	1:1:A:ILE:HG22	1:4:A:TRP:H	19	8.16
(1,118)	1:1:A:ILE:HG23	1:4:A:TRP:H	19	8.16
(1,93)	1:1:A:ILE:HB	1:6:A:TRP:H	17	8.16
(1,308)	1:1:A:ILE:HD11	1:3:A:PRO:HA	16	8.15
(1,308)	1:1:A:ILE:HD12	1:3:A:PRO:HA	16	8.15
(1,308)	1:1:A:ILE:HD13	1:3:A:PRO:HA	16	8.15
(1,292)	1:5:A:LYS:HG2	1:7:A:LYS:HA	1	8.15
(1,292)	1:5:A:LYS:HG3	1:7:A:LYS:HA	1	8.15
(1,245)	1:10:A:PRO:HB2	1:12:A:ARG:HG2	3	8.15
(1,245)	1:10:A:PRO:HB3	1:12:A:ARG:HG2	3	8.15
(1,132)	1:7:A:LYS:HE2	1:11:A:TRP:H	16	8.15
(1,132)	1:7:A:LYS:HE3	1:11:A:TRP:H	16	8.15
(1,112)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:HB3	5	8.15
(1,107)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:HB3	5	8.15
(1,288)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HA	18	8.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,288)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HA	18	8.14
(1,288)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HA	18	8.14
(1,287)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HG2	7	8.14
(1,287)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HG3	7	8.14
(1,280)	1:5:A:LYS:HD2	1:7:A:LYS:HA	2	8.14
(1,280)	1:5:A:LYS:HD3	1:7:A:LYS:HA	2	8.14
(1,211)	1:1:A:ILE:HB	1:6:A:TRP:HB2	6	8.14
(1,158)	1:7:A:LYS:HD2	1:11:A:TRP:HB2	19	8.14
(1,158)	1:7:A:LYS:HD2	1:11:A:TRP:HB3	19	8.14
(1,158)	1:7:A:LYS:HD3	1:11:A:TRP:HB2	19	8.14
(1,158)	1:7:A:LYS:HD3	1:11:A:TRP:HB3	19	8.14
(1,148)	1:8:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:H	11	8.14
(1,118)	1:1:A:ILE:HG21	1:4:A:TRP:H	7	8.14
(1,118)	1:1:A:ILE:HG22	1:4:A:TRP:H	7	8.14
(1,118)	1:1:A:ILE:HG23	1:4:A:TRP:H	7	8.14
(1,11)	1:2:A:LEU:H	1:4:A:TRP:HB2	16	8.14
(1,9)	1:2:A:LEU:H	1:5:A:LYS:HG2	11	8.14
(1,9)	1:2:A:LEU:H	1:5:A:LYS:HG3	11	8.14
(1,204)	1:6:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG21	12	8.13
(1,204)	1:6:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG22	12	8.13
(1,204)	1:6:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG23	12	8.13
(1,195)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE2	11	8.13
(1,195)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE3	11	8.13
(1,145)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	5	8.13
(1,145)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HE	5	8.13
(1,14)	1:7:A:LYS:H	1:11:A:TRP:H	20	8.13
(1,95)	1:2:A:LEU:HB2	1:6:A:TRP:H	4	8.12
(1,94)	1:6:A:TRP:H	1:10:A:PRO:HB2	10	8.12
(1,94)	1:6:A:TRP:H	1:10:A:PRO:HB3	10	8.12
(1,260)	1:2:A:LEU:HB3	1:5:A:LYS:HA	12	8.11
(1,215)	1:8:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB2	6	8.11
(1,215)	1:8:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB3	6	8.11
(1,10)	1:2:A:LEU:H	1:6:A:TRP:HB2	14	8.11
(1,199)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:HG21	8	8.1
(1,199)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:HG22	8	8.1
(1,199)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:HG23	8	8.1
(1,199)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:HG21	8	8.1
(1,199)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:HG22	8	8.1
(1,199)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:HG23	8	8.1
(1,308)	1:1:A:ILE:HD11	1:3:A:PRO:HA	4	8.09
(1,308)	1:1:A:ILE:HD12	1:3:A:PRO:HA	4	8.09
(1,308)	1:1:A:ILE:HD13	1:3:A:PRO:HA	4	8.09

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,110)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:HB2	5	8.09
(1,110)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:HB2	6	8.09
(1,92)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE2	4	8.09
(1,92)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE3	4	8.09
(1,180)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD2	4	8.08
(1,180)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD3	4	8.08
(1,180)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD2	4	8.08
(1,180)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD3	4	8.08
(1,154)	1:2:A:LEU:HB3	1:4:A:TRP:HB2	3	8.08
(1,74)	1:9:A:THR:HG21	1:13:A:ARG:HE	2	8.08
(1,74)	1:9:A:THR:HG22	1:13:A:ARG:HE	2	8.08
(1,74)	1:9:A:THR:HG23	1:13:A:ARG:HE	2	8.08
(1,197)	1:5:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB3	8	8.07
(1,115)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD2	10	8.07
(1,115)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD3	10	8.07
(1,115)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD2	17	8.07
(1,115)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD3	17	8.07
(1,78)	1:6:A:TRP:HB2	1:9:A:THR:H	3	8.07
(1,69)	1:6:A:TRP:HB2	1:9:A:THR:H	3	8.07
(1,297)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD2	16	8.06
(1,297)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD3	16	8.06
(1,297)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD2	16	8.06
(1,297)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD3	16	8.06
(1,297)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD2	16	8.06
(1,297)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD3	16	8.06
(1,182)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD2	16	8.06
(1,182)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD3	16	8.06
(1,182)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD2	16	8.06
(1,182)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD3	16	8.06
(1,182)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD2	16	8.06
(1,182)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD3	16	8.06
(1,131)	1:7:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:HE	11	8.06
(1,131)	1:7:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:HE	11	8.06
(1,314)	1:2:A:LEU:HD11	1:4:A:TRP:HB2	9	8.05
(1,314)	1:2:A:LEU:HD12	1:4:A:TRP:HB2	9	8.05
(1,314)	1:2:A:LEU:HD13	1:4:A:TRP:HB2	9	8.05
(1,314)	1:2:A:LEU:HD21	1:4:A:TRP:HB2	9	8.05
(1,314)	1:2:A:LEU:HD22	1:4:A:TRP:HB2	9	8.05
(1,314)	1:2:A:LEU:HD23	1:4:A:TRP:HB2	9	8.05
(1,195)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE2	7	8.04
(1,195)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE3	7	8.04
(1,95)	1:2:A:LEU:HB2	1:6:A:TRP:H	20	8.04

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,71)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:H	10	8.04
(1,71)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:H	10	8.04
(1,284)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HE	3	8.03
(1,284)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HE	3	8.03
(1,284)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HE	3	8.03
(1,250)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:H	14	8.03
(1,211)	1:1:A:ILE:HB	1:6:A:TRP:HB2	8	8.03
(1,199)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:HG21	19	8.03
(1,199)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:HG22	19	8.03
(1,199)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:HG23	19	8.03
(1,199)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:HG21	19	8.03
(1,199)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:HG22	19	8.03
(1,199)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:HG23	19	8.03
(1,155)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HD2	4	8.03
(1,155)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HD3	4	8.03
(1,141)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HE	3	8.03
(1,141)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HE	3	8.03
(1,141)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HE	3	8.03
(1,137)	1:12:A:ARG:HE	1:13:A:ARG:HG3	12	8.03
(1,98)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:H	14	8.03
(1,93)	1:1:A:ILE:HB	1:6:A:TRP:H	10	8.03
(1,68)	1:11:A:TRP:HB2	1:13:A:ARG:HE	13	8.03
(1,68)	1:11:A:TRP:HB3	1:13:A:ARG:HE	13	8.03
(1,316)	1:1:A:ILE:HD11	1:4:A:TRP:HB2	5	8.02
(1,316)	1:1:A:ILE:HD12	1:4:A:TRP:HB2	5	8.02
(1,316)	1:1:A:ILE:HD13	1:4:A:TRP:HB2	5	8.02
(1,308)	1:1:A:ILE:HD11	1:3:A:PRO:HA	11	8.02
(1,308)	1:1:A:ILE:HD12	1:3:A:PRO:HA	11	8.02
(1,308)	1:1:A:ILE:HD13	1:3:A:PRO:HA	11	8.02
(1,306)	1:2:A:LEU:HD11	1:5:A:LYS:HA	18	8.02
(1,306)	1:2:A:LEU:HD12	1:5:A:LYS:HA	18	8.02
(1,306)	1:2:A:LEU:HD13	1:5:A:LYS:HA	18	8.02
(1,306)	1:2:A:LEU:HD21	1:5:A:LYS:HA	18	8.02
(1,306)	1:2:A:LEU:HD22	1:5:A:LYS:HA	18	8.02
(1,306)	1:2:A:LEU:HD23	1:5:A:LYS:HA	18	8.02
(1,244)	1:7:A:LYS:HD2	1:10:A:PRO:HB2	16	8.02
(1,244)	1:7:A:LYS:HD2	1:10:A:PRO:HB3	16	8.02
(1,244)	1:7:A:LYS:HD3	1:10:A:PRO:HB2	16	8.02
(1,244)	1:7:A:LYS:HD3	1:10:A:PRO:HB3	16	8.02
(1,71)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:H	6	8.02
(1,71)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:H	6	8.02
(1,252)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:H	3	8.01

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,195)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE2	3	8.01
(1,195)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE3	3	8.01
(1,167)	1:5:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB2	3	8.01
(1,38)	1:7:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:H	10	8.01
(1,38)	1:7:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:H	10	8.01
(1,2)	1:2:A:LEU:H	1:5:A:LYS:HA	14	8.01
(1,145)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	2	8.0
(1,145)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HE	2	8.0
(1,131)	1:7:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:HE	19	8.0
(1,131)	1:7:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:HE	19	8.0
(1,237)	1:7:A:LYS:HB2	1:10:A:PRO:HB2	13	7.99
(1,237)	1:7:A:LYS:HB2	1:10:A:PRO:HB3	13	7.99
(1,237)	1:7:A:LYS:HB3	1:10:A:PRO:HB2	13	7.99
(1,237)	1:7:A:LYS:HB3	1:10:A:PRO:HB3	13	7.99
(1,237)	1:7:A:LYS:HB2	1:10:A:PRO:HB2	17	7.99
(1,237)	1:7:A:LYS:HB2	1:10:A:PRO:HB3	17	7.99
(1,237)	1:7:A:LYS:HB3	1:10:A:PRO:HB2	17	7.99
(1,237)	1:7:A:LYS:HB3	1:10:A:PRO:HB3	17	7.99
(1,146)	1:6:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:H	3	7.99
(1,71)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:H	5	7.99
(1,71)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:H	5	7.99
(1,284)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HE	8	7.98
(1,284)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HE	8	7.98
(1,284)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HE	8	7.98
(1,280)	1:5:A:LYS:HD2	1:7:A:LYS:HA	20	7.98
(1,280)	1:5:A:LYS:HD3	1:7:A:LYS:HA	20	7.98
(1,237)	1:7:A:LYS:HB2	1:10:A:PRO:HB2	6	7.98
(1,237)	1:7:A:LYS:HB2	1:10:A:PRO:HB3	6	7.98
(1,237)	1:7:A:LYS:HB3	1:10:A:PRO:HB2	6	7.98
(1,237)	1:7:A:LYS:HB3	1:10:A:PRO:HB3	6	7.98
(1,141)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HE	8	7.98
(1,141)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HE	8	7.98
(1,141)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HE	8	7.98
(1,133)	1:8:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:H	5	7.98
(1,108)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE2	10	7.98
(1,108)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE3	10	7.98
(1,137)	1:12:A:ARG:HE	1:13:A:ARG:HG3	15	7.97
(1,316)	1:1:A:ILE:HD11	1:4:A:TRP:HB2	8	7.96
(1,316)	1:1:A:ILE:HD12	1:4:A:TRP:HB2	8	7.96
(1,316)	1:1:A:ILE:HD13	1:4:A:TRP:HB2	8	7.96
(1,280)	1:5:A:LYS:HD2	1:7:A:LYS:HA	6	7.96
(1,280)	1:5:A:LYS:HD3	1:7:A:LYS:HA	6	7.96

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,157)	1:7:A:LYS:HD2	1:8:A:TRP:HB2	9	7.95
(1,157)	1:7:A:LYS:HD3	1:8:A:TRP:HB2	9	7.95
(1,154)	1:2:A:LEU:HB3	1:4:A:TRP:HB2	9	7.95
(1,308)	1:1:A:ILE:HD11	1:3:A:PRO:HA	14	7.94
(1,308)	1:1:A:ILE:HD12	1:3:A:PRO:HA	14	7.94
(1,308)	1:1:A:ILE:HD13	1:3:A:PRO:HA	14	7.94
(1,256)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	6	7.94
(1,251)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	6	7.94
(1,137)	1:12:A:ARG:HE	1:13:A:ARG:HG3	5	7.94
(1,100)	1:6:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HG2	6	7.94
(1,54)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB2	15	7.94
(1,196)	1:3:A:PRO:HA	1:6:A:TRP:HB3	2	7.93
(1,146)	1:6:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:H	6	7.93
(1,297)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD2	3	7.92
(1,297)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD3	3	7.92
(1,297)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD2	3	7.92
(1,297)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD3	3	7.92
(1,297)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD2	3	7.92
(1,297)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD3	3	7.92
(1,295)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD2	8	7.92
(1,295)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD3	8	7.92
(1,295)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD2	8	7.92
(1,295)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD3	8	7.92
(1,182)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD2	3	7.92
(1,182)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD3	3	7.92
(1,182)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD2	3	7.92
(1,182)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD3	3	7.92
(1,182)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD2	3	7.92
(1,182)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD3	3	7.92
(1,122)	1:8:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HE	6	7.92
(1,287)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HG2	17	7.91
(1,287)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HG3	17	7.91
(1,145)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	18	7.91
(1,145)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HE	18	7.91
(1,138)	1:11:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	18	7.91
(1,68)	1:11:A:TRP:HB2	1:13:A:ARG:HE	6	7.91
(1,68)	1:11:A:TRP:HB3	1:13:A:ARG:HE	6	7.91
(1,158)	1:7:A:LYS:HD2	1:11:A:TRP:HB2	10	7.9
(1,158)	1:7:A:LYS:HD2	1:11:A:TRP:HB3	10	7.9
(1,158)	1:7:A:LYS:HD3	1:11:A:TRP:HB2	10	7.9
(1,158)	1:7:A:LYS:HD3	1:11:A:TRP:HB3	10	7.9
(1,131)	1:7:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:HE	17	7.9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,131)	1:7:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:HE	17	7.9
(1,89)	1:3:A:PRO:HA	1:6:A:TRP:H	16	7.9
(1,172)	1:5:A:LYS:HE2	1:8:A:TRP:H	12	7.89
(1,172)	1:5:A:LYS:HE3	1:8:A:TRP:H	12	7.89
(1,154)	1:2:A:LEU:HB3	1:4:A:TRP:HB2	1	7.89
(1,148)	1:8:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:H	3	7.89
(1,137)	1:12:A:ARG:HE	1:13:A:ARG:HG3	7	7.89
(1,118)	1:1:A:ILE:HG21	1:4:A:TRP:H	15	7.89
(1,118)	1:1:A:ILE:HG22	1:4:A:TRP:H	15	7.89
(1,118)	1:1:A:ILE:HG23	1:4:A:TRP:H	15	7.89
(1,113)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD2	11	7.89
(1,113)	1:4:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HD3	11	7.89
(1,52)	1:5:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HE2	7	7.89
(1,52)	1:5:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HE3	7	7.89
(1,308)	1:1:A:ILE:HD11	1:3:A:PRO:HA	13	7.88
(1,308)	1:1:A:ILE:HD12	1:3:A:PRO:HA	13	7.88
(1,308)	1:1:A:ILE:HD13	1:3:A:PRO:HA	13	7.88
(1,128)	1:7:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:H	4	7.88
(1,297)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD2	9	7.87
(1,297)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD3	9	7.87
(1,297)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD2	9	7.87
(1,297)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD3	9	7.87
(1,297)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD2	9	7.87
(1,297)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD3	9	7.87
(1,199)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:HG21	7	7.87
(1,199)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:HG22	7	7.87
(1,199)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:HG23	7	7.87
(1,199)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:HG21	7	7.87
(1,199)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:HG22	7	7.87
(1,199)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:HG23	7	7.87
(1,182)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD2	9	7.87
(1,182)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD3	9	7.87
(1,182)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD2	9	7.87
(1,182)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD3	9	7.87
(1,182)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD2	9	7.87
(1,182)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD3	9	7.87
(1,180)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD2	20	7.87
(1,180)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD3	20	7.87
(1,180)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD2	20	7.87
(1,180)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD3	20	7.87
(1,52)	1:5:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HE2	4	7.87
(1,52)	1:5:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HE3	4	7.87

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,133)	1:8:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:H	20	7.86
(1,42)	1:6:A:TRP:HB2	1:8:A:TRP:H	17	7.86
(1,225)	1:7:A:LYS:HB2	1:12:A:ARG:H	10	7.85
(1,225)	1:7:A:LYS:HB3	1:12:A:ARG:H	10	7.85
(1,308)	1:1:A:ILE:HD11	1:3:A:PRO:HA	12	7.84
(1,308)	1:1:A:ILE:HD12	1:3:A:PRO:HA	12	7.84
(1,308)	1:1:A:ILE:HD13	1:3:A:PRO:HA	12	7.84
(1,284)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HE	1	7.84
(1,284)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HE	1	7.84
(1,284)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HE	1	7.84
(1,232)	1:2:A:LEU:HB2	1:6:A:TRP:H	15	7.84
(1,141)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HE	1	7.84
(1,141)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HE	1	7.84
(1,141)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HE	1	7.84
(1,95)	1:2:A:LEU:HB2	1:6:A:TRP:H	11	7.84
(1,292)	1:5:A:LYS:HG2	1:7:A:LYS:HA	2	7.83
(1,292)	1:5:A:LYS:HG3	1:7:A:LYS:HA	2	7.83
(1,157)	1:7:A:LYS:HD2	1:8:A:TRP:HB2	4	7.83
(1,157)	1:7:A:LYS:HD3	1:8:A:TRP:HB2	4	7.83
(1,89)	1:3:A:PRO:HA	1:6:A:TRP:H	1	7.83
(1,78)	1:6:A:TRP:HB2	1:9:A:THR:H	5	7.83
(1,77)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB2	9	7.83
(1,77)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB3	9	7.83
(1,69)	1:6:A:TRP:HB2	1:9:A:THR:H	5	7.83
(1,67)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB2	9	7.83
(1,67)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB3	9	7.83
(1,308)	1:1:A:ILE:HD11	1:3:A:PRO:HA	7	7.82
(1,308)	1:1:A:ILE:HD12	1:3:A:PRO:HA	7	7.82
(1,308)	1:1:A:ILE:HD13	1:3:A:PRO:HA	7	7.82
(1,155)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HD2	5	7.82
(1,155)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HD3	5	7.82
(1,89)	1:3:A:PRO:HA	1:6:A:TRP:H	6	7.82
(1,314)	1:2:A:LEU:HD11	1:4:A:TRP:HB2	1	7.81
(1,314)	1:2:A:LEU:HD12	1:4:A:TRP:HB2	1	7.81
(1,314)	1:2:A:LEU:HD13	1:4:A:TRP:HB2	1	7.81
(1,314)	1:2:A:LEU:HD21	1:4:A:TRP:HB2	1	7.81
(1,314)	1:2:A:LEU:HD22	1:4:A:TRP:HB2	1	7.81
(1,314)	1:2:A:LEU:HD23	1:4:A:TRP:HB2	1	7.81
(1,306)	1:2:A:LEU:HD11	1:5:A:LYS:HA	16	7.81
(1,306)	1:2:A:LEU:HD12	1:5:A:LYS:HA	16	7.81
(1,306)	1:2:A:LEU:HD13	1:5:A:LYS:HA	16	7.81
(1,306)	1:2:A:LEU:HD21	1:5:A:LYS:HA	16	7.81

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,306)	1:2:A:LEU:HD22	1:5:A:LYS:HA	16	7.81
(1,306)	1:2:A:LEU:HD23	1:5:A:LYS:HA	16	7.81
(1,274)	1:5:A:LYS:HB2	1:12:A:ARG:HE	20	7.8
(1,274)	1:5:A:LYS:HB3	1:12:A:ARG:HE	20	7.8
(1,201)	1:5:A:LYS:HG2	1:7:A:LYS:HE2	9	7.8
(1,201)	1:5:A:LYS:HG2	1:7:A:LYS:HE3	9	7.8
(1,201)	1:5:A:LYS:HG3	1:7:A:LYS:HE2	9	7.8
(1,201)	1:5:A:LYS:HG3	1:7:A:LYS:HE3	9	7.8
(1,80)	1:4:A:TRP:HB2	1:6:A:TRP:H	12	7.8
(1,215)	1:8:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB2	2	7.79
(1,215)	1:8:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB3	2	7.79
(1,78)	1:6:A:TRP:HB2	1:9:A:THR:H	19	7.79
(1,69)	1:6:A:TRP:HB2	1:9:A:THR:H	19	7.79
(1,295)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD2	14	7.78
(1,295)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD3	14	7.78
(1,295)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD2	14	7.78
(1,295)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD3	14	7.78
(1,288)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HA	1	7.78
(1,288)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HA	1	7.78
(1,288)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HA	1	7.78
(1,280)	1:5:A:LYS:HD2	1:7:A:LYS:HA	16	7.78
(1,280)	1:5:A:LYS:HD3	1:7:A:LYS:HA	16	7.78
(1,197)	1:5:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB3	3	7.78
(1,197)	1:5:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB3	20	7.78
(1,118)	1:1:A:ILE:HG21	1:4:A:TRP:H	9	7.78
(1,118)	1:1:A:ILE:HG22	1:4:A:TRP:H	9	7.78
(1,118)	1:1:A:ILE:HG23	1:4:A:TRP:H	9	7.78
(1,11)	1:2:A:LEU:H	1:4:A:TRP:HB2	14	7.78
(1,298)	1:5:A:LYS:HG2	1:6:A:TRP:HB3	2	7.77
(1,298)	1:5:A:LYS:HG3	1:6:A:TRP:HB3	2	7.77
(1,231)	1:11:A:TRP:HB2	1:13:A:ARG:HG2	8	7.77
(1,231)	1:11:A:TRP:HB3	1:13:A:ARG:HG2	8	7.77
(1,200)	1:5:A:LYS:HG2	1:6:A:TRP:HB3	2	7.77
(1,200)	1:5:A:LYS:HG3	1:6:A:TRP:HB3	2	7.77
(1,173)	1:8:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HD2	19	7.77
(1,173)	1:8:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HD3	19	7.77
(1,137)	1:12:A:ARG:HE	1:13:A:ARG:HG3	2	7.77
(1,318)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:HB3	12	7.76
(1,318)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:HB3	12	7.76
(1,318)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:HB3	12	7.76
(1,306)	1:2:A:LEU:HD11	1:5:A:LYS:HA	12	7.76
(1,306)	1:2:A:LEU:HD12	1:5:A:LYS:HA	12	7.76

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,306)	1:2:A:LEU:HD13	1:5:A:LYS:HA	12	7.76
(1,306)	1:2:A:LEU:HD21	1:5:A:LYS:HA	12	7.76
(1,306)	1:2:A:LEU:HD22	1:5:A:LYS:HA	12	7.76
(1,306)	1:2:A:LEU:HD23	1:5:A:LYS:HA	12	7.76
(1,267)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:HB3	12	7.76
(1,267)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:HB3	12	7.76
(1,267)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:HB3	12	7.76
(1,262)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD2	13	7.76
(1,262)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD3	13	7.76
(1,297)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD2	5	7.75
(1,297)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD3	5	7.75
(1,297)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD2	5	7.75
(1,297)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD3	5	7.75
(1,297)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD2	5	7.75
(1,297)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD3	5	7.75
(1,182)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD2	5	7.75
(1,182)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD3	5	7.75
(1,182)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD2	5	7.75
(1,182)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD3	5	7.75
(1,182)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD2	5	7.75
(1,182)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD3	5	7.75
(1,77)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB2	1	7.75
(1,77)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB3	1	7.75
(1,67)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB2	1	7.75
(1,67)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB3	1	7.75
(1,201)	1:5:A:LYS:HG2	1:7:A:LYS:HE2	10	7.74
(1,201)	1:5:A:LYS:HG2	1:7:A:LYS:HE3	10	7.74
(1,201)	1:5:A:LYS:HG3	1:7:A:LYS:HE2	10	7.74
(1,201)	1:5:A:LYS:HG3	1:7:A:LYS:HE3	10	7.74
(1,137)	1:12:A:ARG:HE	1:13:A:ARG:HG3	1	7.74
(1,77)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB2	6	7.74
(1,77)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB3	6	7.74
(1,67)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB2	6	7.74
(1,67)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB3	6	7.74
(1,14)	1:7:A:LYS:H	1:11:A:TRP:H	7	7.74
(1,280)	1:5:A:LYS:HD2	1:7:A:LYS:HA	15	7.73
(1,280)	1:5:A:LYS:HD3	1:7:A:LYS:HA	15	7.73
(1,71)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:H	2	7.73
(1,71)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:H	2	7.73
(1,71)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:H	12	7.73
(1,71)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:H	12	7.73
(1,215)	1:8:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB2	18	7.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,215)	1:8:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB3	18	7.72
(1,204)	1:6:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG21	11	7.72
(1,204)	1:6:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG22	11	7.72
(1,204)	1:6:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG23	11	7.72
(1,199)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:HG21	4	7.72
(1,199)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:HG22	4	7.72
(1,199)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:HG23	4	7.72
(1,199)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:HG21	4	7.72
(1,199)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:HG22	4	7.72
(1,199)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:HG23	4	7.72
(1,131)	1:7:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:HE	9	7.72
(1,131)	1:7:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:HE	9	7.72
(1,280)	1:5:A:LYS:HD2	1:7:A:LYS:HA	7	7.71
(1,280)	1:5:A:LYS:HD3	1:7:A:LYS:HA	7	7.71
(1,231)	1:11:A:TRP:HB2	1:13:A:ARG:HG2	10	7.71
(1,231)	1:11:A:TRP:HB3	1:13:A:ARG:HG2	10	7.71
(1,145)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	7	7.71
(1,145)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HE	7	7.71
(1,14)	1:7:A:LYS:H	1:11:A:TRP:H	17	7.71
(1,155)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HD2	1	7.7
(1,155)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HD3	1	7.7
(1,237)	1:7:A:LYS:HB2	1:10:A:PRO:HB2	16	7.69
(1,237)	1:7:A:LYS:HB2	1:10:A:PRO:HB3	16	7.69
(1,237)	1:7:A:LYS:HB3	1:10:A:PRO:HB2	16	7.69
(1,237)	1:7:A:LYS:HB3	1:10:A:PRO:HB3	16	7.69
(1,232)	1:2:A:LEU:HB2	1:6:A:TRP:H	4	7.69
(1,231)	1:11:A:TRP:HB2	1:13:A:ARG:HG2	13	7.69
(1,231)	1:11:A:TRP:HB3	1:13:A:ARG:HG2	13	7.69
(1,95)	1:2:A:LEU:HB2	1:6:A:TRP:H	1	7.69
(1,10)	1:2:A:LEU:H	1:6:A:TRP:HB2	10	7.69
(1,137)	1:12:A:ARG:HE	1:13:A:ARG:HG3	6	7.68
(1,77)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB2	2	7.68
(1,77)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB3	2	7.68
(1,67)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB2	2	7.68
(1,67)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB3	2	7.68
(1,155)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HD2	6	7.67
(1,155)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HD3	6	7.67
(1,133)	1:8:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:H	15	7.67
(1,131)	1:7:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:HE	15	7.67
(1,131)	1:7:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:HE	15	7.67
(1,112)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:HB3	16	7.67
(1,107)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:HB3	16	7.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,81)	1:6:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HB2	3	7.66
(1,81)	1:6:A:TRP:H	1:11:A:TRP:HB3	3	7.66
(1,52)	1:5:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HE2	16	7.66
(1,52)	1:5:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HE3	16	7.66
(1,292)	1:5:A:LYS:HG2	1:7:A:LYS:HA	5	7.65
(1,292)	1:5:A:LYS:HG3	1:7:A:LYS:HA	5	7.65
(1,215)	1:8:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB2	10	7.65
(1,215)	1:8:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB3	10	7.65
(1,187)	1:4:A:TRP:HB3	1:6:A:TRP:H	3	7.65
(1,130)	1:9:A:THR:HB	1:12:A:ARG:HE	2	7.65
(1,103)	1:6:A:TRP:H	1:9:A:THR:HG21	13	7.65
(1,103)	1:6:A:TRP:H	1:9:A:THR:HG22	13	7.65
(1,103)	1:6:A:TRP:H	1:9:A:THR:HG23	13	7.65
(1,91)	1:4:A:TRP:HB3	1:6:A:TRP:H	3	7.65
(1,83)	1:4:A:TRP:HB3	1:6:A:TRP:H	3	7.65
(1,230)	1:6:A:TRP:HB2	1:13:A:ARG:HG2	15	7.64
(1,137)	1:12:A:ARG:HE	1:13:A:ARG:HG3	20	7.64
(1,274)	1:5:A:LYS:HB2	1:12:A:ARG:HE	2	7.63
(1,274)	1:5:A:LYS:HB3	1:12:A:ARG:HE	2	7.63
(1,237)	1:7:A:LYS:HB2	1:10:A:PRO:HB2	12	7.63
(1,237)	1:7:A:LYS:HB2	1:10:A:PRO:HB3	12	7.63
(1,237)	1:7:A:LYS:HB3	1:10:A:PRO:HB2	12	7.63
(1,237)	1:7:A:LYS:HB3	1:10:A:PRO:HB3	12	7.63
(1,92)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE2	9	7.63
(1,92)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE3	9	7.63
(1,68)	1:11:A:TRP:HB2	1:13:A:ARG:HE	9	7.63
(1,68)	1:11:A:TRP:HB3	1:13:A:ARG:HE	9	7.63
(1,302)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:HB2	14	7.62
(1,302)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:HB2	14	7.62
(1,302)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:HB2	14	7.62
(1,298)	1:5:A:LYS:HG2	1:6:A:TRP:HB3	7	7.62
(1,298)	1:5:A:LYS:HG3	1:6:A:TRP:HB3	7	7.62
(1,275)	1:5:A:LYS:HB2	1:11:A:TRP:H	6	7.62
(1,275)	1:5:A:LYS:HB3	1:11:A:TRP:H	6	7.62
(1,200)	1:5:A:LYS:HG2	1:6:A:TRP:HB3	7	7.62
(1,200)	1:5:A:LYS:HG3	1:6:A:TRP:HB3	7	7.62
(1,136)	1:5:A:LYS:HB2	1:11:A:TRP:H	6	7.62
(1,136)	1:5:A:LYS:HB3	1:11:A:TRP:H	6	7.62
(1,135)	1:5:A:LYS:HB2	1:12:A:ARG:HE	3	7.62
(1,135)	1:5:A:LYS:HB3	1:12:A:ARG:HE	3	7.62
(1,110)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:HB2	8	7.62
(1,80)	1:4:A:TRP:HB2	1:6:A:TRP:H	10	7.62

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,71)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:H	1	7.62
(1,71)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:H	1	7.62
(1,288)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HA	15	7.61
(1,288)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HA	15	7.61
(1,288)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HA	15	7.61
(1,287)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HG2	4	7.61
(1,287)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HG3	4	7.61
(1,232)	1:2:A:LEU:HB2	1:6:A:TRP:H	20	7.61
(1,89)	1:3:A:PRO:HA	1:6:A:TRP:H	5	7.61
(1,52)	1:5:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HE2	19	7.61
(1,52)	1:5:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HE3	19	7.61
(1,297)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD2	7	7.6
(1,297)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD3	7	7.6
(1,297)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD2	7	7.6
(1,297)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD3	7	7.6
(1,297)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD2	7	7.6
(1,297)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD3	7	7.6
(1,194)	1:7:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:HA	14	7.6
(1,194)	1:7:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:HA	14	7.6
(1,185)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB3	4	7.6
(1,182)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD2	7	7.6
(1,182)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD3	7	7.6
(1,182)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD2	7	7.6
(1,182)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD3	7	7.6
(1,182)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD2	7	7.6
(1,182)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD3	7	7.6
(1,137)	1:12:A:ARG:HE	1:13:A:ARG:HG3	9	7.6
(1,57)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB3	4	7.6
(1,51)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB3	4	7.6
(1,254)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD2	18	7.59
(1,254)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD3	18	7.59
(1,292)	1:5:A:LYS:HG2	1:7:A:LYS:HA	10	7.58
(1,292)	1:5:A:LYS:HG3	1:7:A:LYS:HA	10	7.58
(1,254)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD2	14	7.58
(1,254)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD3	14	7.58
(1,170)	1:12:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD2	8	7.58
(1,170)	1:12:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD3	8	7.58
(1,145)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	11	7.58
(1,145)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HE	11	7.58
(1,77)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB2	14	7.58
(1,77)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB3	14	7.58
(1,67)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB2	14	7.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,67)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB3	14	7.58
(1,195)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE2	13	7.57
(1,195)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE3	13	7.57
(1,137)	1:12:A:ARG:HE	1:13:A:ARG:HG3	16	7.57
(1,80)	1:4:A:TRP:HB2	1:6:A:TRP:H	13	7.57
(1,71)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:H	15	7.57
(1,71)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:H	15	7.57
(1,11)	1:2:A:LEU:H	1:4:A:TRP:HB2	8	7.57
(1,318)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:HB3	7	7.55
(1,318)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:HB3	7	7.55
(1,318)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:HB3	7	7.55
(1,316)	1:1:A:ILE:HD11	1:4:A:TRP:HB2	9	7.55
(1,316)	1:1:A:ILE:HD12	1:4:A:TRP:HB2	9	7.55
(1,316)	1:1:A:ILE:HD13	1:4:A:TRP:HB2	9	7.55
(1,267)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:HB3	7	7.55
(1,267)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:HB3	7	7.55
(1,267)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:HB3	7	7.55
(1,248)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:H	10	7.55
(1,248)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:H	10	7.55
(1,121)	1:8:A:TRP:H	1:11:A:TRP:H	6	7.55
(1,121)	1:8:A:TRP:H	1:11:A:TRP:H	19	7.55
(1,49)	1:12:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HG3	13	7.55
(1,48)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:H	10	7.55
(1,48)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:H	10	7.55
(1,11)	1:2:A:LEU:H	1:4:A:TRP:HB2	10	7.55
(1,228)	1:2:A:LEU:HB2	1:4:A:TRP:HB2	6	7.54
(1,180)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD2	8	7.54
(1,180)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD3	8	7.54
(1,180)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD2	8	7.54
(1,180)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD3	8	7.54
(1,157)	1:7:A:LYS:HD2	1:8:A:TRP:HB2	12	7.54
(1,157)	1:7:A:LYS:HD3	1:8:A:TRP:HB2	12	7.54
(1,153)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:HB2	18	7.54
(1,139)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HE	15	7.54
(1,139)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HE	15	7.54
(1,290)	1:1:A:ILE:HG21	1:3:A:PRO:HA	19	7.53
(1,290)	1:1:A:ILE:HG22	1:3:A:PRO:HA	19	7.53
(1,290)	1:1:A:ILE:HG23	1:3:A:PRO:HA	19	7.53
(1,157)	1:7:A:LYS:HD2	1:8:A:TRP:HB2	17	7.53
(1,157)	1:7:A:LYS:HD3	1:8:A:TRP:HB2	17	7.53
(1,115)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD2	2	7.53
(1,115)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD3	2	7.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,103)	1:6:A:TRP:H	1:9:A:THR:HG21	2	7.53
(1,103)	1:6:A:TRP:H	1:9:A:THR:HG22	2	7.53
(1,103)	1:6:A:TRP:H	1:9:A:THR:HG23	2	7.53
(1,287)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HG2	15	7.52
(1,287)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HG3	15	7.52
(1,204)	1:6:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG21	15	7.52
(1,204)	1:6:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG22	15	7.52
(1,204)	1:6:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG23	15	7.52
(1,222)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:HB2	14	7.51
(1,222)	1:7:A:LYS:HD2	1:12:A:ARG:HB3	14	7.51
(1,222)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:HB2	14	7.51
(1,222)	1:7:A:LYS:HD3	1:12:A:ARG:HB3	14	7.51
(1,288)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HA	4	7.5
(1,288)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HA	4	7.5
(1,288)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HA	4	7.5
(1,80)	1:4:A:TRP:HB2	1:6:A:TRP:H	18	7.5
(1,52)	1:5:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HE2	20	7.5
(1,52)	1:5:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HE3	20	7.5
(1,42)	1:6:A:TRP:HB2	1:8:A:TRP:H	7	7.5
(1,39)	1:6:A:TRP:HB3	1:8:A:TRP:H	19	7.5
(1,11)	1:2:A:LEU:H	1:4:A:TRP:HB2	2	7.5
(1,207)	1:10:A:PRO:HB2	1:12:A:ARG:HA	6	7.49
(1,207)	1:10:A:PRO:HB3	1:12:A:ARG:HA	6	7.49
(1,143)	1:1:A:ILE:HG21	1:12:A:ARG:HE	11	7.48
(1,143)	1:1:A:ILE:HG22	1:12:A:ARG:HE	11	7.48
(1,143)	1:1:A:ILE:HG23	1:12:A:ARG:HE	11	7.48
(1,103)	1:6:A:TRP:H	1:9:A:THR:HG21	8	7.48
(1,103)	1:6:A:TRP:H	1:9:A:THR:HG22	8	7.48
(1,103)	1:6:A:TRP:H	1:9:A:THR:HG23	8	7.48
(1,77)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB2	19	7.48
(1,77)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB3	19	7.48
(1,67)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB2	19	7.48
(1,67)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB3	19	7.48
(1,288)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HA	3	7.47
(1,288)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HA	3	7.47
(1,288)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HA	3	7.47
(1,260)	1:2:A:LEU:HB3	1:5:A:LYS:HA	2	7.47
(1,245)	1:10:A:PRO:HB2	1:12:A:ARG:HG2	14	7.47
(1,245)	1:10:A:PRO:HB3	1:12:A:ARG:HG2	14	7.47
(1,237)	1:7:A:LYS:HB2	1:10:A:PRO:HB2	9	7.47
(1,237)	1:7:A:LYS:HB2	1:10:A:PRO:HB3	9	7.47
(1,237)	1:7:A:LYS:HB3	1:10:A:PRO:HB2	9	7.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,237)	1:7:A:LYS:HB3	1:10:A:PRO:HB3	9	7.47
(1,206)	1:1:A:ILE:HB	1:3:A:PRO:HA	2	7.47
(1,92)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE2	8	7.47
(1,92)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE3	8	7.47
(1,281)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HE	7	7.46
(1,281)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HE	7	7.46
(1,280)	1:5:A:LYS:HD2	1:7:A:LYS:HA	10	7.46
(1,280)	1:5:A:LYS:HD3	1:7:A:LYS:HA	10	7.46
(1,206)	1:1:A:ILE:HB	1:3:A:PRO:HA	10	7.46
(1,155)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HD2	3	7.46
(1,155)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HD3	3	7.46
(1,291)	1:7:A:LYS:HA	1:9:A:THR:HG21	4	7.45
(1,291)	1:7:A:LYS:HA	1:9:A:THR:HG22	4	7.45
(1,291)	1:7:A:LYS:HA	1:9:A:THR:HG23	4	7.45
(1,260)	1:2:A:LEU:HB3	1:5:A:LYS:HA	9	7.45
(1,206)	1:1:A:ILE:HB	1:3:A:PRO:HA	19	7.45
(1,138)	1:11:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	5	7.45
(1,133)	1:8:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:H	9	7.44
(1,77)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB2	10	7.44
(1,77)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB3	10	7.44
(1,67)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB2	10	7.44
(1,67)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB3	10	7.44
(1,42)	1:6:A:TRP:HB2	1:8:A:TRP:H	16	7.44
(1,206)	1:1:A:ILE:HB	1:3:A:PRO:HA	20	7.43
(1,195)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE2	17	7.43
(1,195)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE3	17	7.43
(1,187)	1:4:A:TRP:HB3	1:6:A:TRP:H	11	7.43
(1,91)	1:4:A:TRP:HB3	1:6:A:TRP:H	11	7.43
(1,83)	1:4:A:TRP:HB3	1:6:A:TRP:H	11	7.43
(1,215)	1:8:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB2	15	7.42
(1,215)	1:8:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB3	15	7.42
(1,215)	1:8:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB2	16	7.42
(1,215)	1:8:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB3	16	7.42
(1,207)	1:10:A:PRO:HB2	1:12:A:ARG:HA	11	7.42
(1,207)	1:10:A:PRO:HB3	1:12:A:ARG:HA	11	7.42
(1,245)	1:10:A:PRO:HB2	1:12:A:ARG:HG2	15	7.41
(1,245)	1:10:A:PRO:HB3	1:12:A:ARG:HG2	15	7.41
(1,232)	1:2:A:LEU:HB2	1:6:A:TRP:H	11	7.41
(1,228)	1:2:A:LEU:HB2	1:4:A:TRP:HB2	16	7.41
(1,145)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	10	7.41
(1,145)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HE	10	7.41
(1,291)	1:7:A:LYS:HA	1:9:A:THR:HG21	15	7.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,291)	1:7:A:LYS:HA	1:9:A:THR:HG22	15	7.4
(1,291)	1:7:A:LYS:HA	1:9:A:THR:HG23	15	7.4
(1,262)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD2	19	7.4
(1,262)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD3	19	7.4
(1,252)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:H	15	7.4
(1,250)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:H	9	7.4
(1,205)	1:1:A:ILE:HB	1:5:A:LYS:HA	9	7.4
(1,180)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD2	14	7.4
(1,180)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD3	14	7.4
(1,180)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD2	14	7.4
(1,180)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD3	14	7.4
(1,98)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:H	9	7.4
(1,78)	1:6:A:TRP:HB2	1:9:A:THR:H	4	7.4
(1,69)	1:6:A:TRP:HB2	1:9:A:THR:H	4	7.4
(1,152)	1:10:A:PRO:HB2	1:12:A:ARG:HE	7	7.39
(1,152)	1:10:A:PRO:HB3	1:12:A:ARG:HE	7	7.39
(1,121)	1:8:A:TRP:H	1:11:A:TRP:H	15	7.39
(1,95)	1:2:A:LEU:HB2	1:6:A:TRP:H	16	7.39
(1,306)	1:2:A:LEU:HD11	1:5:A:LYS:HA	13	7.38
(1,306)	1:2:A:LEU:HD12	1:5:A:LYS:HA	13	7.38
(1,306)	1:2:A:LEU:HD13	1:5:A:LYS:HA	13	7.38
(1,306)	1:2:A:LEU:HD21	1:5:A:LYS:HA	13	7.38
(1,306)	1:2:A:LEU:HD22	1:5:A:LYS:HA	13	7.38
(1,306)	1:2:A:LEU:HD23	1:5:A:LYS:HA	13	7.38
(1,254)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD2	6	7.38
(1,254)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD3	6	7.38
(1,197)	1:5:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB3	16	7.38
(1,121)	1:8:A:TRP:H	1:11:A:TRP:H	16	7.38
(1,265)	1:2:A:LEU:HB3	1:7:A:LYS:HA	2	7.37
(1,245)	1:10:A:PRO:HB2	1:12:A:ARG:HG2	4	7.37
(1,245)	1:10:A:PRO:HB3	1:12:A:ARG:HG2	4	7.37
(1,206)	1:1:A:ILE:HB	1:3:A:PRO:HA	8	7.37
(1,187)	1:4:A:TRP:HB3	1:6:A:TRP:H	2	7.37
(1,152)	1:10:A:PRO:HB2	1:12:A:ARG:HE	6	7.37
(1,152)	1:10:A:PRO:HB3	1:12:A:ARG:HE	6	7.37
(1,147)	1:6:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	15	7.37
(1,145)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	14	7.37
(1,145)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HE	14	7.37
(1,91)	1:4:A:TRP:HB3	1:6:A:TRP:H	2	7.37
(1,83)	1:4:A:TRP:HB3	1:6:A:TRP:H	2	7.37
(1,80)	1:4:A:TRP:HB2	1:6:A:TRP:H	15	7.37
(1,49)	1:12:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HG3	16	7.37

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,93)	1:1:A:ILE:HB	1:6:A:TRP:H	2	7.36
(1,71)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:H	3	7.36
(1,71)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:H	3	7.36
(1,205)	1:1:A:ILE:HB	1:5:A:LYS:HA	5	7.35
(1,205)	1:1:A:ILE:HB	1:5:A:LYS:HA	6	7.35
(1,167)	1:5:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB2	17	7.35
(1,42)	1:6:A:TRP:HB2	1:8:A:TRP:H	11	7.35
(1,262)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD2	8	7.34
(1,262)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD3	8	7.34
(1,128)	1:7:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:H	15	7.34
(1,18)	1:7:A:LYS:H	1:8:A:TRP:HB3	19	7.34
(1,170)	1:12:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD2	2	7.33
(1,170)	1:12:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD3	2	7.33
(1,80)	1:4:A:TRP:HB2	1:6:A:TRP:H	2	7.33
(1,157)	1:7:A:LYS:HD2	1:8:A:TRP:HB2	14	7.32
(1,157)	1:7:A:LYS:HD3	1:8:A:TRP:HB2	14	7.32
(1,2)	1:2:A:LEU:H	1:5:A:LYS:HA	10	7.32
(1,215)	1:8:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB2	14	7.31
(1,215)	1:8:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB3	14	7.31
(1,206)	1:1:A:ILE:HB	1:3:A:PRO:HA	16	7.31
(1,205)	1:1:A:ILE:HB	1:5:A:LYS:HA	15	7.31
(1,157)	1:7:A:LYS:HD2	1:8:A:TRP:HB2	10	7.31
(1,157)	1:7:A:LYS:HD3	1:8:A:TRP:HB2	10	7.31
(1,308)	1:1:A:ILE:HD11	1:3:A:PRO:HA	10	7.3
(1,308)	1:1:A:ILE:HD12	1:3:A:PRO:HA	10	7.3
(1,308)	1:1:A:ILE:HD13	1:3:A:PRO:HA	10	7.3
(1,216)	1:4:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB2	11	7.3
(1,216)	1:4:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB3	11	7.3
(1,214)	1:6:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB2	13	7.3
(1,214)	1:6:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB3	13	7.3
(1,80)	1:4:A:TRP:HB2	1:6:A:TRP:H	20	7.3
(1,39)	1:6:A:TRP:HB3	1:8:A:TRP:H	10	7.3
(1,298)	1:5:A:LYS:HG2	1:6:A:TRP:HB3	6	7.29
(1,298)	1:5:A:LYS:HG3	1:6:A:TRP:HB3	6	7.29
(1,280)	1:5:A:LYS:HD2	1:7:A:LYS:HA	13	7.29
(1,280)	1:5:A:LYS:HD3	1:7:A:LYS:HA	13	7.29
(1,209)	1:5:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB2	15	7.29
(1,209)	1:5:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB3	15	7.29
(1,200)	1:5:A:LYS:HG2	1:6:A:TRP:HB3	6	7.29
(1,200)	1:5:A:LYS:HG3	1:6:A:TRP:HB3	6	7.29
(1,170)	1:12:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD2	5	7.29
(1,170)	1:12:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD3	5	7.29

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,170)	1:12:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD2	13	7.29
(1,170)	1:12:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD3	13	7.29
(1,68)	1:11:A:TRP:HB2	1:13:A:ARG:HE	15	7.29
(1,68)	1:11:A:TRP:HB3	1:13:A:ARG:HE	15	7.29
(1,284)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HE	9	7.28
(1,284)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HE	9	7.28
(1,284)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HE	9	7.28
(1,279)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HD2	9	7.28
(1,279)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HD3	9	7.28
(1,254)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD2	13	7.28
(1,254)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD3	13	7.28
(1,216)	1:4:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB2	3	7.28
(1,216)	1:4:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB3	3	7.28
(1,196)	1:3:A:PRO:HA	1:6:A:TRP:HB3	17	7.28
(1,141)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HE	9	7.28
(1,141)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HE	9	7.28
(1,141)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HE	9	7.28
(1,279)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HD2	7	7.27
(1,279)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HD3	7	7.27
(1,205)	1:1:A:ILE:HB	1:5:A:LYS:HA	19	7.27
(1,158)	1:7:A:LYS:HD2	1:11:A:TRP:HB2	16	7.27
(1,158)	1:7:A:LYS:HD2	1:11:A:TRP:HB3	16	7.27
(1,158)	1:7:A:LYS:HD3	1:11:A:TRP:HB2	16	7.27
(1,158)	1:7:A:LYS:HD3	1:11:A:TRP:HB3	16	7.27
(1,94)	1:6:A:TRP:H	1:10:A:PRO:HB2	6	7.27
(1,94)	1:6:A:TRP:H	1:10:A:PRO:HB3	6	7.27
(1,77)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB2	5	7.27
(1,77)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB3	5	7.27
(1,67)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB2	5	7.27
(1,67)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB3	5	7.27
(1,298)	1:5:A:LYS:HG2	1:6:A:TRP:HB3	18	7.26
(1,298)	1:5:A:LYS:HG3	1:6:A:TRP:HB3	18	7.26
(1,232)	1:2:A:LEU:HB2	1:6:A:TRP:H	1	7.26
(1,205)	1:1:A:ILE:HB	1:5:A:LYS:HA	14	7.26
(1,200)	1:5:A:LYS:HG2	1:6:A:TRP:HB3	18	7.26
(1,200)	1:5:A:LYS:HG3	1:6:A:TRP:HB3	18	7.26
(1,145)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	1	7.26
(1,145)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HE	1	7.26
(1,118)	1:1:A:ILE:HG21	1:4:A:TRP:H	2	7.26
(1,118)	1:1:A:ILE:HG22	1:4:A:TRP:H	2	7.26
(1,118)	1:1:A:ILE:HG23	1:4:A:TRP:H	2	7.26
(1,295)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD2	15	7.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,295)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD3	15	7.25
(1,295)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD2	15	7.25
(1,295)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD3	15	7.25
(1,290)	1:1:A:ILE:HG21	1:3:A:PRO:HA	16	7.25
(1,290)	1:1:A:ILE:HG22	1:3:A:PRO:HA	16	7.25
(1,290)	1:1:A:ILE:HG23	1:3:A:PRO:HA	16	7.25
(1,226)	1:2:A:LEU:HB2	1:6:A:TRP:HB2	19	7.25
(1,133)	1:8:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:H	13	7.25
(1,92)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE2	19	7.25
(1,92)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE3	19	7.25
(1,250)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:H	10	7.24
(1,204)	1:6:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG21	7	7.24
(1,204)	1:6:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG22	7	7.24
(1,204)	1:6:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG23	7	7.24
(1,170)	1:12:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD2	4	7.24
(1,170)	1:12:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD3	4	7.24
(1,166)	1:5:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:HB2	3	7.24
(1,166)	1:5:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:HB3	3	7.24
(1,137)	1:12:A:ARG:HE	1:13:A:ARG:HG3	10	7.24
(1,133)	1:8:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:H	2	7.24
(1,133)	1:8:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:H	11	7.24
(1,98)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:H	10	7.24
(1,306)	1:2:A:LEU:HD11	1:5:A:LYS:HA	6	7.23
(1,306)	1:2:A:LEU:HD12	1:5:A:LYS:HA	6	7.23
(1,306)	1:2:A:LEU:HD13	1:5:A:LYS:HA	6	7.23
(1,306)	1:2:A:LEU:HD21	1:5:A:LYS:HA	6	7.23
(1,306)	1:2:A:LEU:HD22	1:5:A:LYS:HA	6	7.23
(1,306)	1:2:A:LEU:HD23	1:5:A:LYS:HA	6	7.23
(1,54)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB2	14	7.23
(1,302)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:HB2	7	7.22
(1,302)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:HB2	7	7.22
(1,302)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:HB2	7	7.22
(1,42)	1:6:A:TRP:HB2	1:8:A:TRP:H	9	7.22
(1,297)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD2	10	7.21
(1,297)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD3	10	7.21
(1,297)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD2	10	7.21
(1,297)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD3	10	7.21
(1,297)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD2	10	7.21
(1,297)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD3	10	7.21
(1,280)	1:5:A:LYS:HD2	1:7:A:LYS:HA	11	7.21
(1,280)	1:5:A:LYS:HD3	1:7:A:LYS:HA	11	7.21
(1,243)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HB3	7	7.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,182)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD2	10	7.21
(1,182)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD3	10	7.21
(1,182)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD2	10	7.21
(1,182)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD3	10	7.21
(1,182)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD2	10	7.21
(1,182)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD3	10	7.21
(1,92)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE2	20	7.21
(1,92)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE3	20	7.21
(1,302)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:HB2	12	7.19
(1,302)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:HB2	12	7.19
(1,302)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:HB2	12	7.19
(1,287)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HG2	9	7.19
(1,287)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HG3	9	7.19
(1,280)	1:5:A:LYS:HD2	1:7:A:LYS:HA	12	7.19
(1,280)	1:5:A:LYS:HD3	1:7:A:LYS:HA	12	7.19
(1,215)	1:8:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB2	19	7.19
(1,215)	1:8:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB3	19	7.19
(1,318)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:HB3	1	7.18
(1,318)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:HB3	1	7.18
(1,318)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:HB3	1	7.18
(1,318)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:HB3	18	7.18
(1,318)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:HB3	18	7.18
(1,318)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:HB3	18	7.18
(1,267)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:HB3	1	7.18
(1,267)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:HB3	1	7.18
(1,267)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:HB3	1	7.18
(1,267)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:HB3	18	7.18
(1,267)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:HB3	18	7.18
(1,267)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:HB3	18	7.18
(1,157)	1:7:A:LYS:HD2	1:8:A:TRP:HB2	1	7.18
(1,157)	1:7:A:LYS:HD3	1:8:A:TRP:HB2	1	7.18
(1,157)	1:7:A:LYS:HD2	1:8:A:TRP:HB2	20	7.18
(1,157)	1:7:A:LYS:HD3	1:8:A:TRP:HB2	20	7.18
(1,155)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HD2	9	7.18
(1,155)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HD3	9	7.18
(1,155)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HD2	13	7.18
(1,155)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HD3	13	7.18
(1,77)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB2	18	7.18
(1,77)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB3	18	7.18
(1,67)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB2	18	7.18
(1,67)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB3	18	7.18
(1,302)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:HB2	10	7.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,302)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:HB2	10	7.17
(1,302)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:HB2	10	7.17
(1,185)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB3	6	7.17
(1,170)	1:12:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD2	6	7.17
(1,170)	1:12:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD3	6	7.17
(1,155)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HD2	11	7.17
(1,155)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HD3	11	7.17
(1,57)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB3	6	7.17
(1,54)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB2	13	7.17
(1,51)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB3	6	7.17
(1,254)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD2	5	7.16
(1,254)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD3	5	7.16
(1,187)	1:4:A:TRP:HB3	1:6:A:TRP:H	4	7.16
(1,131)	1:7:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:HE	6	7.16
(1,131)	1:7:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:HE	6	7.16
(1,91)	1:4:A:TRP:HB3	1:6:A:TRP:H	4	7.16
(1,83)	1:4:A:TRP:HB3	1:6:A:TRP:H	4	7.16
(1,77)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB2	12	7.16
(1,77)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB3	12	7.16
(1,67)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB2	12	7.16
(1,67)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB3	12	7.16
(1,39)	1:6:A:TRP:HB3	1:8:A:TRP:H	8	7.16
(1,207)	1:10:A:PRO:HB2	1:12:A:ARG:HA	4	7.15
(1,207)	1:10:A:PRO:HB3	1:12:A:ARG:HA	4	7.15
(1,201)	1:5:A:LYS:HG2	1:7:A:LYS:HE2	19	7.15
(1,201)	1:5:A:LYS:HG2	1:7:A:LYS:HE3	19	7.15
(1,201)	1:5:A:LYS:HG3	1:7:A:LYS:HE2	19	7.15
(1,201)	1:5:A:LYS:HG3	1:7:A:LYS:HE3	19	7.15
(1,185)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB3	8	7.15
(1,173)	1:8:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HD2	3	7.15
(1,173)	1:8:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HD3	3	7.15
(1,57)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB3	8	7.15
(1,51)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB3	8	7.15
(1,49)	1:12:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HG3	9	7.15
(1,287)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HG2	6	7.14
(1,287)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HG3	6	7.14
(1,245)	1:10:A:PRO:HB2	1:12:A:ARG:HG2	19	7.14
(1,245)	1:10:A:PRO:HB3	1:12:A:ARG:HG2	19	7.14
(1,77)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB2	7	7.14
(1,77)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB3	7	7.14
(1,67)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB2	7	7.14
(1,67)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB3	7	7.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,185)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB3	15	7.13
(1,130)	1:9:A:THR:HB	1:12:A:ARG:HE	20	7.13
(1,57)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB3	15	7.13
(1,51)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB3	15	7.13
(1,280)	1:5:A:LYS:HD2	1:7:A:LYS:HA	3	7.12
(1,280)	1:5:A:LYS:HD3	1:7:A:LYS:HA	3	7.12
(1,262)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD2	4	7.11
(1,262)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD3	4	7.11
(1,226)	1:2:A:LEU:HB2	1:6:A:TRP:HB2	6	7.11
(1,204)	1:6:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG21	8	7.11
(1,204)	1:6:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG22	8	7.11
(1,204)	1:6:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG23	8	7.11
(1,132)	1:7:A:LYS:HE2	1:11:A:TRP:H	10	7.11
(1,132)	1:7:A:LYS:HE3	1:11:A:TRP:H	10	7.11
(1,68)	1:11:A:TRP:HB2	1:13:A:ARG:HE	14	7.11
(1,68)	1:11:A:TRP:HB3	1:13:A:ARG:HE	14	7.11
(1,252)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:H	4	7.1
(1,245)	1:10:A:PRO:HB2	1:12:A:ARG:HG2	11	7.1
(1,245)	1:10:A:PRO:HB3	1:12:A:ARG:HG2	11	7.1
(1,71)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:H	4	7.1
(1,71)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:H	4	7.1
(1,291)	1:7:A:LYS:HA	1:9:A:THR:HG21	5	7.09
(1,291)	1:7:A:LYS:HA	1:9:A:THR:HG22	5	7.09
(1,291)	1:7:A:LYS:HA	1:9:A:THR:HG23	5	7.09
(1,207)	1:10:A:PRO:HB2	1:12:A:ARG:HA	2	7.09
(1,207)	1:10:A:PRO:HB3	1:12:A:ARG:HA	2	7.09
(1,172)	1:5:A:LYS:HE2	1:8:A:TRP:H	19	7.09
(1,172)	1:5:A:LYS:HE3	1:8:A:TRP:H	19	7.09
(1,108)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE2	2	7.09
(1,108)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE3	2	7.09
(1,92)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE2	17	7.09
(1,92)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE3	17	7.09
(1,77)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB2	11	7.09
(1,77)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB3	11	7.09
(1,67)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB2	11	7.09
(1,67)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB3	11	7.09
(1,254)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD2	4	7.08
(1,254)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD3	4	7.08
(1,204)	1:6:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG21	13	7.08
(1,204)	1:6:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG22	13	7.08
(1,204)	1:6:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG23	13	7.08
(1,157)	1:7:A:LYS:HD2	1:8:A:TRP:HB2	8	7.08

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,157)	1:7:A:LYS:HD3	1:8:A:TRP:HB2	8	7.08
(1,130)	1:9:A:THR:HB	1:12:A:ARG:HE	14	7.08
(1,14)	1:7:A:LYS:H	1:11:A:TRP:H	13	7.08
(1,11)	1:2:A:LEU:H	1:4:A:TRP:HB2	11	7.08
(1,306)	1:2:A:LEU:HD11	1:5:A:LYS:HA	3	7.07
(1,306)	1:2:A:LEU:HD12	1:5:A:LYS:HA	3	7.07
(1,306)	1:2:A:LEU:HD13	1:5:A:LYS:HA	3	7.07
(1,306)	1:2:A:LEU:HD21	1:5:A:LYS:HA	3	7.07
(1,306)	1:2:A:LEU:HD22	1:5:A:LYS:HA	3	7.07
(1,306)	1:2:A:LEU:HD23	1:5:A:LYS:HA	3	7.07
(1,245)	1:10:A:PRO:HB2	1:12:A:ARG:HG2	6	7.07
(1,245)	1:10:A:PRO:HB3	1:12:A:ARG:HG2	6	7.07
(1,148)	1:8:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:H	8	7.07
(1,54)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB2	10	7.07
(1,291)	1:7:A:LYS:HA	1:9:A:THR:HG21	17	7.06
(1,291)	1:7:A:LYS:HA	1:9:A:THR:HG22	17	7.06
(1,291)	1:7:A:LYS:HA	1:9:A:THR:HG23	17	7.06
(1,252)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:H	6	7.06
(1,207)	1:10:A:PRO:HB2	1:12:A:ARG:HA	17	7.06
(1,207)	1:10:A:PRO:HB3	1:12:A:ARG:HA	17	7.06
(1,39)	1:6:A:TRP:HB3	1:8:A:TRP:H	15	7.06
(1,292)	1:5:A:LYS:HG2	1:7:A:LYS:HA	20	7.05
(1,292)	1:5:A:LYS:HG3	1:7:A:LYS:HA	20	7.05
(1,170)	1:12:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD2	1	7.05
(1,170)	1:12:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD3	1	7.05
(1,153)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:HB2	19	7.05
(1,170)	1:12:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD2	15	7.04
(1,170)	1:12:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD3	15	7.04
(1,118)	1:1:A:ILE:HG21	1:4:A:TRP:H	20	7.04
(1,118)	1:1:A:ILE:HG22	1:4:A:TRP:H	20	7.04
(1,118)	1:1:A:ILE:HG23	1:4:A:TRP:H	20	7.04
(1,54)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB2	12	7.04
(1,80)	1:4:A:TRP:HB2	1:6:A:TRP:H	14	7.03
(1,49)	1:12:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HG3	12	7.03
(1,287)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HG2	19	7.02
(1,287)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HG3	19	7.02
(1,280)	1:5:A:LYS:HD2	1:7:A:LYS:HA	4	7.02
(1,280)	1:5:A:LYS:HD3	1:7:A:LYS:HA	4	7.02
(1,170)	1:12:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD2	18	7.02
(1,170)	1:12:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD3	18	7.02
(1,133)	1:8:A:TRP:HB3	1:11:A:TRP:H	3	7.02
(1,244)	1:7:A:LYS:HD2	1:10:A:PRO:HB2	1	7.01

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,244)	1:7:A:LYS:HD2	1:10:A:PRO:HB3	1	7.01
(1,244)	1:7:A:LYS:HD3	1:10:A:PRO:HB2	1	7.01
(1,244)	1:7:A:LYS:HD3	1:10:A:PRO:HB3	1	7.01
(1,215)	1:8:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB2	7	7.01
(1,215)	1:8:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB3	7	7.01
(1,210)	1:7:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB2	6	7.01
(1,210)	1:7:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB3	6	7.01
(1,207)	1:10:A:PRO:HB2	1:12:A:ARG:HA	3	7.01
(1,207)	1:10:A:PRO:HB3	1:12:A:ARG:HA	3	7.01
(1,206)	1:1:A:ILE:HB	1:3:A:PRO:HA	4	7.01
(1,201)	1:5:A:LYS:HG2	1:7:A:LYS:HE2	3	7.01
(1,201)	1:5:A:LYS:HG2	1:7:A:LYS:HE3	3	7.01
(1,201)	1:5:A:LYS:HG3	1:7:A:LYS:HE2	3	7.01
(1,201)	1:5:A:LYS:HG3	1:7:A:LYS:HE3	3	7.01
(1,152)	1:10:A:PRO:HB2	1:12:A:ARG:HE	18	7.01
(1,152)	1:10:A:PRO:HB3	1:12:A:ARG:HE	18	7.01
(1,39)	1:6:A:TRP:HB3	1:8:A:TRP:H	7	7.01
(1,318)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:HB3	11	7.0
(1,318)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:HB3	11	7.0
(1,318)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:HB3	11	7.0
(1,308)	1:1:A:ILE:HD11	1:3:A:PRO:HA	1	7.0
(1,308)	1:1:A:ILE:HD12	1:3:A:PRO:HA	1	7.0
(1,308)	1:1:A:ILE:HD13	1:3:A:PRO:HA	1	7.0
(1,290)	1:1:A:ILE:HG21	1:3:A:PRO:HA	7	7.0
(1,290)	1:1:A:ILE:HG22	1:3:A:PRO:HA	7	7.0
(1,290)	1:1:A:ILE:HG23	1:3:A:PRO:HA	7	7.0
(1,267)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:HB3	11	7.0
(1,267)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:HB3	11	7.0
(1,267)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:HB3	11	7.0
(1,252)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:H	13	7.0
(1,237)	1:7:A:LYS:HB2	1:10:A:PRO:HB2	2	7.0
(1,237)	1:7:A:LYS:HB2	1:10:A:PRO:HB3	2	7.0
(1,237)	1:7:A:LYS:HB3	1:10:A:PRO:HB2	2	7.0
(1,237)	1:7:A:LYS:HB3	1:10:A:PRO:HB3	2	7.0
(1,172)	1:5:A:LYS:HE2	1:8:A:TRP:H	3	7.0
(1,172)	1:5:A:LYS:HE3	1:8:A:TRP:H	3	7.0
(1,318)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:HB3	13	6.99
(1,318)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:HB3	13	6.99
(1,318)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:HB3	13	6.99
(1,302)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:HB2	6	6.99
(1,302)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:HB2	6	6.99
(1,302)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:HB2	6	6.99

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,267)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:HB3	13	6.99
(1,267)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:HB3	13	6.99
(1,267)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:HB3	13	6.99
(1,298)	1:5:A:LYS:HG2	1:6:A:TRP:HB3	4	6.98
(1,298)	1:5:A:LYS:HG3	1:6:A:TRP:HB3	4	6.98
(1,298)	1:5:A:LYS:HG2	1:6:A:TRP:HB3	20	6.98
(1,298)	1:5:A:LYS:HG3	1:6:A:TRP:HB3	20	6.98
(1,292)	1:5:A:LYS:HG2	1:7:A:LYS:HA	11	6.98
(1,292)	1:5:A:LYS:HG3	1:7:A:LYS:HA	11	6.98
(1,280)	1:5:A:LYS:HD2	1:7:A:LYS:HA	5	6.98
(1,280)	1:5:A:LYS:HD3	1:7:A:LYS:HA	5	6.98
(1,200)	1:5:A:LYS:HG2	1:6:A:TRP:HB3	4	6.98
(1,200)	1:5:A:LYS:HG3	1:6:A:TRP:HB3	4	6.98
(1,200)	1:5:A:LYS:HG2	1:6:A:TRP:HB3	20	6.98
(1,200)	1:5:A:LYS:HG3	1:6:A:TRP:HB3	20	6.98
(1,187)	1:4:A:TRP:HB3	1:6:A:TRP:H	6	6.98
(1,91)	1:4:A:TRP:HB3	1:6:A:TRP:H	6	6.98
(1,83)	1:4:A:TRP:HB3	1:6:A:TRP:H	6	6.98
(1,68)	1:11:A:TRP:HB2	1:13:A:ARG:HE	5	6.98
(1,68)	1:11:A:TRP:HB3	1:13:A:ARG:HE	5	6.98
(1,49)	1:12:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HG3	14	6.98
(1,287)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HG2	1	6.97
(1,287)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HG3	1	6.97
(1,279)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HD2	14	6.97
(1,279)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HD3	14	6.97
(1,318)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:HB3	4	6.96
(1,318)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:HB3	4	6.96
(1,318)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:HB3	4	6.96
(1,290)	1:1:A:ILE:HG21	1:3:A:PRO:HA	2	6.96
(1,290)	1:1:A:ILE:HG22	1:3:A:PRO:HA	2	6.96
(1,290)	1:1:A:ILE:HG23	1:3:A:PRO:HA	2	6.96
(1,280)	1:5:A:LYS:HD2	1:7:A:LYS:HA	8	6.96
(1,280)	1:5:A:LYS:HD3	1:7:A:LYS:HA	8	6.96
(1,267)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:HB3	4	6.96
(1,267)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:HB3	4	6.96
(1,267)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:HB3	4	6.96
(1,232)	1:2:A:LEU:HB2	1:6:A:TRP:H	16	6.96
(1,195)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE2	10	6.96
(1,195)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE3	10	6.96
(1,167)	1:5:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB2	20	6.96
(1,157)	1:7:A:LYS:HD2	1:8:A:TRP:HB2	16	6.96
(1,157)	1:7:A:LYS:HD3	1:8:A:TRP:HB2	16	6.96

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,138)	1:11:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	15	6.96
(1,68)	1:11:A:TRP:HB2	1:13:A:ARG:HE	10	6.96
(1,68)	1:11:A:TRP:HB3	1:13:A:ARG:HE	10	6.96
(1,292)	1:5:A:LYS:HG2	1:7:A:LYS:HA	8	6.95
(1,292)	1:5:A:LYS:HG3	1:7:A:LYS:HA	8	6.95
(1,287)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HG2	2	6.95
(1,287)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HG3	2	6.95
(1,279)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HD2	6	6.95
(1,279)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HD3	6	6.95
(1,240)	1:1:A:ILE:HG21	1:2:A:LEU:HB2	6	6.95
(1,240)	1:1:A:ILE:HG22	1:2:A:LEU:HB2	6	6.95
(1,240)	1:1:A:ILE:HG23	1:2:A:LEU:HB2	6	6.95
(1,206)	1:1:A:ILE:HB	1:3:A:PRO:HA	11	6.95
(1,195)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE2	9	6.95
(1,195)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE3	9	6.95
(1,185)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB3	2	6.95
(1,167)	1:5:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB2	7	6.95
(1,78)	1:6:A:TRP:HB2	1:9:A:THR:H	20	6.95
(1,69)	1:6:A:TRP:HB2	1:9:A:THR:H	20	6.95
(1,57)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB3	2	6.95
(1,51)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB3	2	6.95
(1,18)	1:7:A:LYS:H	1:8:A:TRP:HB3	5	6.95
(1,243)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HB3	12	6.94
(1,126)	1:5:A:LYS:HA	1:11:A:TRP:H	3	6.94
(1,49)	1:12:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HG3	10	6.94
(1,292)	1:5:A:LYS:HG2	1:7:A:LYS:HA	18	6.93
(1,292)	1:5:A:LYS:HG3	1:7:A:LYS:HA	18	6.93
(1,243)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HB3	1	6.93
(1,138)	1:11:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	19	6.93
(1,95)	1:2:A:LEU:HB2	1:6:A:TRP:H	12	6.93
(1,92)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE2	13	6.93
(1,92)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE3	13	6.93
(1,18)	1:7:A:LYS:H	1:8:A:TRP:HB3	2	6.93
(1,290)	1:1:A:ILE:HG21	1:3:A:PRO:HA	6	6.92
(1,290)	1:1:A:ILE:HG22	1:3:A:PRO:HA	6	6.92
(1,290)	1:1:A:ILE:HG23	1:3:A:PRO:HA	6	6.92
(1,215)	1:8:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB2	12	6.92
(1,215)	1:8:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB3	12	6.92
(1,80)	1:4:A:TRP:HB2	1:6:A:TRP:H	19	6.92
(1,39)	1:6:A:TRP:HB3	1:8:A:TRP:H	14	6.92
(1,18)	1:7:A:LYS:H	1:8:A:TRP:HB3	10	6.92
(1,10)	1:2:A:LEU:H	1:6:A:TRP:HB2	6	6.92

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,313)	1:2:A:LEU:HD11	1:6:A:TRP:HB2	5	6.91
(1,313)	1:2:A:LEU:HD12	1:6:A:TRP:HB2	5	6.91
(1,313)	1:2:A:LEU:HD13	1:6:A:TRP:HB2	5	6.91
(1,313)	1:2:A:LEU:HD21	1:6:A:TRP:HB2	5	6.91
(1,313)	1:2:A:LEU:HD22	1:6:A:TRP:HB2	5	6.91
(1,313)	1:2:A:LEU:HD23	1:6:A:TRP:HB2	5	6.91
(1,297)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD2	4	6.91
(1,297)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD3	4	6.91
(1,297)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD2	4	6.91
(1,297)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD3	4	6.91
(1,297)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD2	4	6.91
(1,297)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD3	4	6.91
(1,260)	1:2:A:LEU:HB3	1:5:A:LYS:HA	19	6.91
(1,182)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD2	4	6.91
(1,182)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD3	4	6.91
(1,182)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD2	4	6.91
(1,182)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD3	4	6.91
(1,182)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD2	4	6.91
(1,182)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD3	4	6.91
(1,145)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	12	6.91
(1,145)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HE	12	6.91
(1,18)	1:7:A:LYS:H	1:8:A:TRP:HB3	4	6.91
(1,291)	1:7:A:LYS:HA	1:9:A:THR:HG21	13	6.9
(1,291)	1:7:A:LYS:HA	1:9:A:THR:HG22	13	6.9
(1,291)	1:7:A:LYS:HA	1:9:A:THR:HG23	13	6.9
(1,250)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:H	7	6.9
(1,98)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:H	7	6.9
(1,306)	1:2:A:LEU:HD11	1:5:A:LYS:HA	17	6.89
(1,306)	1:2:A:LEU:HD12	1:5:A:LYS:HA	17	6.89
(1,306)	1:2:A:LEU:HD13	1:5:A:LYS:HA	17	6.89
(1,306)	1:2:A:LEU:HD21	1:5:A:LYS:HA	17	6.89
(1,306)	1:2:A:LEU:HD22	1:5:A:LYS:HA	17	6.89
(1,306)	1:2:A:LEU:HD23	1:5:A:LYS:HA	17	6.89
(1,254)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD2	11	6.89
(1,254)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD3	11	6.89
(1,215)	1:8:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB2	11	6.89
(1,215)	1:8:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB3	11	6.89
(1,154)	1:2:A:LEU:HB3	1:4:A:TRP:HB2	2	6.89
(1,71)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:H	20	6.89
(1,71)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:H	20	6.89
(1,243)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HB3	18	6.88
(1,201)	1:5:A:LYS:HG2	1:7:A:LYS:HE2	11	6.88

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,201)	1:5:A:LYS:HG2	1:7:A:LYS:HE3	11	6.88
(1,201)	1:5:A:LYS:HG3	1:7:A:LYS:HE2	11	6.88
(1,201)	1:5:A:LYS:HG3	1:7:A:LYS:HE3	11	6.88
(1,201)	1:5:A:LYS:HG2	1:7:A:LYS:HE2	17	6.88
(1,201)	1:5:A:LYS:HG2	1:7:A:LYS:HE3	17	6.88
(1,201)	1:5:A:LYS:HG3	1:7:A:LYS:HE2	17	6.88
(1,201)	1:5:A:LYS:HG3	1:7:A:LYS:HE3	17	6.88
(1,170)	1:12:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD2	7	6.88
(1,170)	1:12:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD3	7	6.88
(1,54)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB2	11	6.88
(1,298)	1:5:A:LYS:HG2	1:6:A:TRP:HB3	9	6.87
(1,298)	1:5:A:LYS:HG3	1:6:A:TRP:HB3	9	6.87
(1,245)	1:10:A:PRO:HB2	1:12:A:ARG:HG2	17	6.87
(1,245)	1:10:A:PRO:HB3	1:12:A:ARG:HG2	17	6.87
(1,200)	1:5:A:LYS:HG2	1:6:A:TRP:HB3	9	6.87
(1,200)	1:5:A:LYS:HG3	1:6:A:TRP:HB3	9	6.87
(1,180)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD2	15	6.87
(1,180)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD3	15	6.87
(1,180)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD2	15	6.87
(1,180)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD3	15	6.87
(1,134)	1:8:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HE	6	6.87
(1,131)	1:7:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:HE	2	6.87
(1,131)	1:7:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:HE	2	6.87
(1,308)	1:1:A:ILE:HD11	1:3:A:PRO:HA	17	6.86
(1,308)	1:1:A:ILE:HD12	1:3:A:PRO:HA	17	6.86
(1,308)	1:1:A:ILE:HD13	1:3:A:PRO:HA	17	6.86
(1,287)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HG2	3	6.86
(1,287)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HG3	3	6.86
(1,262)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD2	20	6.85
(1,262)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD3	20	6.85
(1,154)	1:2:A:LEU:HB3	1:4:A:TRP:HB2	8	6.85
(1,154)	1:2:A:LEU:HB3	1:4:A:TRP:HB2	10	6.85
(1,137)	1:12:A:ARG:HE	1:13:A:ARG:HG3	4	6.85
(1,39)	1:6:A:TRP:HB3	1:8:A:TRP:H	12	6.85
(1,234)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG2	3	6.84
(1,206)	1:1:A:ILE:HB	1:3:A:PRO:HA	14	6.84
(1,96)	1:6:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG2	3	6.84
(1,77)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB2	13	6.84
(1,77)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB3	13	6.84
(1,74)	1:9:A:THR:HG21	1:13:A:ARG:HE	17	6.84
(1,74)	1:9:A:THR:HG22	1:13:A:ARG:HE	17	6.84
(1,74)	1:9:A:THR:HG23	1:13:A:ARG:HE	17	6.84

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,67)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB2	13	6.84
(1,67)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB3	13	6.84
(1,42)	1:6:A:TRP:HB2	1:8:A:TRP:H	19	6.84
(1,292)	1:5:A:LYS:HG2	1:7:A:LYS:HA	6	6.83
(1,292)	1:5:A:LYS:HG3	1:7:A:LYS:HA	6	6.83
(1,281)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HE	15	6.83
(1,281)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HE	15	6.83
(1,215)	1:8:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB2	17	6.83
(1,215)	1:8:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB3	17	6.83
(1,185)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB3	14	6.83
(1,108)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE2	4	6.83
(1,108)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE3	4	6.83
(1,57)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB3	14	6.83
(1,51)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB3	14	6.83
(1,18)	1:7:A:LYS:H	1:8:A:TRP:HB3	17	6.83
(1,318)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:HB3	3	6.82
(1,318)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:HB3	3	6.82
(1,318)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:HB3	3	6.82
(1,267)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:HB3	3	6.82
(1,267)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:HB3	3	6.82
(1,267)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:HB3	3	6.82
(1,245)	1:10:A:PRO:HB2	1:12:A:ARG:HG2	2	6.82
(1,245)	1:10:A:PRO:HB3	1:12:A:ARG:HG2	2	6.82
(1,199)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:HG21	1	6.82
(1,199)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:HG22	1	6.82
(1,199)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:HG23	1	6.82
(1,199)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:HG21	1	6.82
(1,199)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:HG22	1	6.82
(1,199)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:HG23	1	6.82
(1,185)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB3	19	6.82
(1,57)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB3	19	6.82
(1,51)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB3	19	6.82
(1,318)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:HB3	5	6.81
(1,318)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:HB3	5	6.81
(1,318)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:HB3	5	6.81
(1,267)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:HB3	5	6.81
(1,267)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:HB3	5	6.81
(1,267)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:HB3	5	6.81
(1,228)	1:2:A:LEU:HB2	1:4:A:TRP:HB2	2	6.81
(1,206)	1:1:A:ILE:HB	1:3:A:PRO:HA	7	6.81
(1,78)	1:6:A:TRP:HB2	1:9:A:THR:H	2	6.81
(1,69)	1:6:A:TRP:HB2	1:9:A:THR:H	2	6.81

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,279)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HD2	2	6.8
(1,279)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HD3	2	6.8
(1,165)	1:3:A:PRO:HA	1:6:A:TRP:HB2	17	6.8
(1,274)	1:5:A:LYS:HB2	1:12:A:ARG:HE	3	6.79
(1,274)	1:5:A:LYS:HB3	1:12:A:ARG:HE	3	6.79
(1,131)	1:7:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:HE	16	6.79
(1,131)	1:7:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:HE	16	6.79
(1,14)	1:7:A:LYS:H	1:11:A:TRP:H	2	6.79
(1,243)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HB3	20	6.78
(1,71)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:H	18	6.78
(1,71)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:H	18	6.78
(1,54)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB2	4	6.78
(1,207)	1:10:A:PRO:HB2	1:12:A:ARG:HA	19	6.77
(1,207)	1:10:A:PRO:HB3	1:12:A:ARG:HA	19	6.77
(1,206)	1:1:A:ILE:HB	1:3:A:PRO:HA	13	6.77
(1,206)	1:1:A:ILE:HB	1:3:A:PRO:HA	17	6.77
(1,37)	1:7:A:LYS:HE2	1:8:A:TRP:H	6	6.77
(1,37)	1:7:A:LYS:HE3	1:8:A:TRP:H	6	6.77
(1,206)	1:1:A:ILE:HB	1:3:A:PRO:HA	1	6.76
(1,199)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:HG21	16	6.76
(1,199)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:HG22	16	6.76
(1,199)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:HG23	16	6.76
(1,199)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:HG21	16	6.76
(1,199)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:HG22	16	6.76
(1,199)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:HG23	16	6.76
(1,318)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:HB3	2	6.75
(1,318)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:HB3	2	6.75
(1,318)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:HB3	2	6.75
(1,306)	1:2:A:LEU:HD11	1:5:A:LYS:HA	9	6.75
(1,306)	1:2:A:LEU:HD12	1:5:A:LYS:HA	9	6.75
(1,306)	1:2:A:LEU:HD13	1:5:A:LYS:HA	9	6.75
(1,306)	1:2:A:LEU:HD21	1:5:A:LYS:HA	9	6.75
(1,306)	1:2:A:LEU:HD22	1:5:A:LYS:HA	9	6.75
(1,306)	1:2:A:LEU:HD23	1:5:A:LYS:HA	9	6.75
(1,298)	1:5:A:LYS:HG2	1:6:A:TRP:HB3	16	6.75
(1,298)	1:5:A:LYS:HG3	1:6:A:TRP:HB3	16	6.75
(1,292)	1:5:A:LYS:HG2	1:7:A:LYS:HA	16	6.75
(1,292)	1:5:A:LYS:HG3	1:7:A:LYS:HA	16	6.75
(1,267)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:HB3	2	6.75
(1,267)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:HB3	2	6.75
(1,267)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:HB3	2	6.75
(1,200)	1:5:A:LYS:HG2	1:6:A:TRP:HB3	16	6.75

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,200)	1:5:A:LYS:HG3	1:6:A:TRP:HB3	16	6.75
(1,156)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HG2	15	6.75
(1,156)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HG2	15	6.75
(1,138)	1:11:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	2	6.75
(1,95)	1:2:A:LEU:HB2	1:6:A:TRP:H	18	6.75
(1,297)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD2	15	6.74
(1,297)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD3	15	6.74
(1,297)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD2	15	6.74
(1,297)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD3	15	6.74
(1,297)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD2	15	6.74
(1,297)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD3	15	6.74
(1,182)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD2	15	6.74
(1,182)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD3	15	6.74
(1,182)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD2	15	6.74
(1,182)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD3	15	6.74
(1,182)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD2	15	6.74
(1,182)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD3	15	6.74
(1,154)	1:2:A:LEU:HB3	1:4:A:TRP:HB2	14	6.74
(1,137)	1:12:A:ARG:HE	1:13:A:ARG:HG3	8	6.74
(1,313)	1:2:A:LEU:HD11	1:6:A:TRP:HB2	12	6.73
(1,313)	1:2:A:LEU:HD12	1:6:A:TRP:HB2	12	6.73
(1,313)	1:2:A:LEU:HD13	1:6:A:TRP:HB2	12	6.73
(1,313)	1:2:A:LEU:HD21	1:6:A:TRP:HB2	12	6.73
(1,313)	1:2:A:LEU:HD22	1:6:A:TRP:HB2	12	6.73
(1,313)	1:2:A:LEU:HD23	1:6:A:TRP:HB2	12	6.73
(1,243)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HB3	2	6.72
(1,192)	1:3:A:PRO:HA	1:4:A:TRP:HB3	2	6.71
(1,178)	1:3:A:PRO:HA	1:4:A:TRP:HB3	2	6.71
(1,118)	1:1:A:ILE:HG21	1:4:A:TRP:H	8	6.71
(1,118)	1:1:A:ILE:HG22	1:4:A:TRP:H	8	6.71
(1,118)	1:1:A:ILE:HG23	1:4:A:TRP:H	8	6.71
(1,68)	1:11:A:TRP:HB2	1:13:A:ARG:HE	2	6.71
(1,68)	1:11:A:TRP:HB3	1:13:A:ARG:HE	2	6.71
(1,287)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HG2	20	6.7
(1,287)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HG3	20	6.7
(1,192)	1:3:A:PRO:HA	1:4:A:TRP:HB3	8	6.7
(1,178)	1:3:A:PRO:HA	1:4:A:TRP:HB3	8	6.7
(1,291)	1:7:A:LYS:HA	1:9:A:THR:HG21	19	6.69
(1,291)	1:7:A:LYS:HA	1:9:A:THR:HG22	19	6.69
(1,291)	1:7:A:LYS:HA	1:9:A:THR:HG23	19	6.69
(1,145)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	16	6.68
(1,145)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HE	16	6.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,93)	1:1:A:ILE:HB	1:6:A:TRP:H	7	6.68
(1,313)	1:2:A:LEU:HD11	1:6:A:TRP:HB2	1	6.67
(1,313)	1:2:A:LEU:HD12	1:6:A:TRP:HB2	1	6.67
(1,313)	1:2:A:LEU:HD13	1:6:A:TRP:HB2	1	6.67
(1,313)	1:2:A:LEU:HD21	1:6:A:TRP:HB2	1	6.67
(1,313)	1:2:A:LEU:HD22	1:6:A:TRP:HB2	1	6.67
(1,313)	1:2:A:LEU:HD23	1:6:A:TRP:HB2	1	6.67
(1,250)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:H	8	6.67
(1,228)	1:2:A:LEU:HB2	1:4:A:TRP:HB2	8	6.67
(1,115)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD2	15	6.67
(1,115)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD3	15	6.67
(1,98)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:H	8	6.67
(1,80)	1:4:A:TRP:HB2	1:6:A:TRP:H	6	6.67
(1,14)	1:7:A:LYS:H	1:11:A:TRP:H	4	6.67
(1,309)	1:2:A:LEU:HD11	1:7:A:LYS:HA	8	6.66
(1,309)	1:2:A:LEU:HD12	1:7:A:LYS:HA	8	6.66
(1,309)	1:2:A:LEU:HD13	1:7:A:LYS:HA	8	6.66
(1,309)	1:2:A:LEU:HD21	1:7:A:LYS:HA	8	6.66
(1,309)	1:2:A:LEU:HD22	1:7:A:LYS:HA	8	6.66
(1,309)	1:2:A:LEU:HD23	1:7:A:LYS:HA	8	6.66
(1,206)	1:1:A:ILE:HB	1:3:A:PRO:HA	12	6.66
(1,199)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:HG21	20	6.66
(1,199)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:HG22	20	6.66
(1,199)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:HG23	20	6.66
(1,199)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:HG21	20	6.66
(1,199)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:HG22	20	6.66
(1,199)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:HG23	20	6.66
(1,195)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE2	12	6.66
(1,195)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE3	12	6.66
(1,18)	1:7:A:LYS:H	1:8:A:TRP:HB3	12	6.66
(1,318)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:HB3	9	6.65
(1,318)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:HB3	9	6.65
(1,318)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:HB3	9	6.65
(1,310)	1:2:A:LEU:HD11	1:12:A:ARG:HA	2	6.65
(1,310)	1:2:A:LEU:HD12	1:12:A:ARG:HA	2	6.65
(1,310)	1:2:A:LEU:HD13	1:12:A:ARG:HA	2	6.65
(1,310)	1:2:A:LEU:HD21	1:12:A:ARG:HA	2	6.65
(1,310)	1:2:A:LEU:HD22	1:12:A:ARG:HA	2	6.65
(1,310)	1:2:A:LEU:HD23	1:12:A:ARG:HA	2	6.65
(1,308)	1:1:A:ILE:HD11	1:3:A:PRO:HA	18	6.65
(1,308)	1:1:A:ILE:HD12	1:3:A:PRO:HA	18	6.65
(1,308)	1:1:A:ILE:HD13	1:3:A:PRO:HA	18	6.65

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,292)	1:5:A:LYS:HG2	1:7:A:LYS:HA	13	6.65
(1,292)	1:5:A:LYS:HG3	1:7:A:LYS:HA	13	6.65
(1,267)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:HB3	9	6.65
(1,267)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:HB3	9	6.65
(1,267)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:HB3	9	6.65
(1,308)	1:1:A:ILE:HD11	1:3:A:PRO:HA	6	6.64
(1,308)	1:1:A:ILE:HD12	1:3:A:PRO:HA	6	6.64
(1,308)	1:1:A:ILE:HD13	1:3:A:PRO:HA	6	6.64
(1,288)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HA	20	6.64
(1,288)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HA	20	6.64
(1,288)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HA	20	6.64
(1,287)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HG2	8	6.64
(1,287)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HG3	8	6.64
(1,243)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HB3	8	6.64
(1,163)	1:4:A:TRP:HB2	1:5:A:LYS:HA	4	6.64
(1,71)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:H	19	6.64
(1,71)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:H	19	6.64
(1,37)	1:7:A:LYS:HE2	1:8:A:TRP:H	12	6.64
(1,37)	1:7:A:LYS:HE3	1:8:A:TRP:H	12	6.64
(1,284)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HE	4	6.63
(1,284)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HE	4	6.63
(1,284)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HE	4	6.63
(1,192)	1:3:A:PRO:HA	1:4:A:TRP:HB3	19	6.63
(1,178)	1:3:A:PRO:HA	1:4:A:TRP:HB3	19	6.63
(1,141)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HE	4	6.63
(1,141)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HE	4	6.63
(1,141)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HE	4	6.63
(1,77)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB2	8	6.63
(1,77)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB3	8	6.63
(1,67)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB2	8	6.63
(1,67)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB3	8	6.63
(1,54)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB2	8	6.63
(1,11)	1:2:A:LEU:H	1:4:A:TRP:HB2	5	6.63
(1,187)	1:4:A:TRP:HB3	1:6:A:TRP:H	15	6.61
(1,112)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:HB3	17	6.61
(1,107)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:HB3	17	6.61
(1,91)	1:4:A:TRP:HB3	1:6:A:TRP:H	15	6.61
(1,83)	1:4:A:TRP:HB3	1:6:A:TRP:H	15	6.61
(1,18)	1:7:A:LYS:H	1:8:A:TRP:HB3	20	6.61
(1,314)	1:2:A:LEU:HD11	1:4:A:TRP:HB2	15	6.6
(1,314)	1:2:A:LEU:HD12	1:4:A:TRP:HB2	15	6.6
(1,314)	1:2:A:LEU:HD13	1:4:A:TRP:HB2	15	6.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,314)	1:2:A:LEU:HD21	1:4:A:TRP:HB2	15	6.6
(1,314)	1:2:A:LEU:HD22	1:4:A:TRP:HB2	15	6.6
(1,314)	1:2:A:LEU:HD23	1:4:A:TRP:HB2	15	6.6
(1,192)	1:3:A:PRO:HA	1:4:A:TRP:HB3	20	6.6
(1,178)	1:3:A:PRO:HA	1:4:A:TRP:HB3	20	6.6
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD11	8	6.59
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD12	8	6.59
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD13	8	6.59
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD21	8	6.59
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD22	8	6.59
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD23	8	6.59
(1,318)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:HB3	14	6.59
(1,318)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:HB3	14	6.59
(1,318)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:HB3	14	6.59
(1,291)	1:7:A:LYS:HA	1:9:A:THR:HG21	14	6.59
(1,291)	1:7:A:LYS:HA	1:9:A:THR:HG22	14	6.59
(1,291)	1:7:A:LYS:HA	1:9:A:THR:HG23	14	6.59
(1,267)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:HB3	14	6.59
(1,267)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:HB3	14	6.59
(1,267)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:HB3	14	6.59
(1,260)	1:2:A:LEU:HB3	1:5:A:LYS:HA	8	6.59
(1,185)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB3	20	6.59
(1,57)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB3	20	6.59
(1,51)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB3	20	6.59
(1,185)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB3	18	6.58
(1,57)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB3	18	6.58
(1,51)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB3	18	6.58
(1,11)	1:2:A:LEU:H	1:4:A:TRP:HB2	20	6.58
(1,314)	1:2:A:LEU:HD11	1:4:A:TRP:HB2	10	6.57
(1,314)	1:2:A:LEU:HD12	1:4:A:TRP:HB2	10	6.57
(1,314)	1:2:A:LEU:HD13	1:4:A:TRP:HB2	10	6.57
(1,314)	1:2:A:LEU:HD21	1:4:A:TRP:HB2	10	6.57
(1,314)	1:2:A:LEU:HD22	1:4:A:TRP:HB2	10	6.57
(1,314)	1:2:A:LEU:HD23	1:4:A:TRP:HB2	10	6.57
(1,296)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG2	3	6.57
(1,296)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG3	3	6.57
(1,290)	1:1:A:ILE:HG21	1:3:A:PRO:HA	3	6.57
(1,290)	1:1:A:ILE:HG22	1:3:A:PRO:HA	3	6.57
(1,290)	1:1:A:ILE:HG23	1:3:A:PRO:HA	3	6.57
(1,181)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG2	3	6.57
(1,181)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG3	3	6.57
(1,162)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HA	5	6.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,77)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB2	17	6.57
(1,77)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB3	17	6.57
(1,67)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB2	17	6.57
(1,67)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB3	17	6.57
(1,49)	1:12:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HG3	11	6.57
(1,282)	1:9:A:THR:HG21	1:11:A:TRP:H	19	6.56
(1,282)	1:9:A:THR:HG22	1:11:A:TRP:H	19	6.56
(1,282)	1:9:A:THR:HG23	1:11:A:TRP:H	19	6.56
(1,245)	1:10:A:PRO:HB2	1:12:A:ARG:HG2	20	6.56
(1,245)	1:10:A:PRO:HB3	1:12:A:ARG:HG2	20	6.56
(1,229)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HB2	1	6.56
(1,229)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HB3	1	6.56
(1,192)	1:3:A:PRO:HA	1:4:A:TRP:HB3	14	6.56
(1,178)	1:3:A:PRO:HA	1:4:A:TRP:HB3	14	6.56
(1,155)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HD2	14	6.56
(1,155)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HD3	14	6.56
(1,140)	1:9:A:THR:HG21	1:11:A:TRP:H	19	6.56
(1,140)	1:9:A:THR:HG22	1:11:A:TRP:H	19	6.56
(1,140)	1:9:A:THR:HG23	1:11:A:TRP:H	19	6.56
(1,120)	1:12:A:ARG:H	1:12:A:ARG:HE	17	6.55
(1,244)	1:7:A:LYS:HD2	1:10:A:PRO:HB2	15	6.54
(1,244)	1:7:A:LYS:HD2	1:10:A:PRO:HB3	15	6.54
(1,244)	1:7:A:LYS:HD3	1:10:A:PRO:HB2	15	6.54
(1,244)	1:7:A:LYS:HD3	1:10:A:PRO:HB3	15	6.54
(1,115)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD2	7	6.54
(1,115)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD3	7	6.54
(1,77)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB2	15	6.54
(1,77)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB3	15	6.54
(1,67)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB2	15	6.54
(1,67)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB3	15	6.54
(1,291)	1:7:A:LYS:HA	1:9:A:THR:HG21	8	6.53
(1,291)	1:7:A:LYS:HA	1:9:A:THR:HG22	8	6.53
(1,291)	1:7:A:LYS:HA	1:9:A:THR:HG23	8	6.53
(1,275)	1:5:A:LYS:HB2	1:11:A:TRP:H	3	6.53
(1,275)	1:5:A:LYS:HB3	1:11:A:TRP:H	3	6.53
(1,162)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HA	8	6.53
(1,136)	1:5:A:LYS:HB2	1:11:A:TRP:H	3	6.53
(1,136)	1:5:A:LYS:HB3	1:11:A:TRP:H	3	6.53
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD11	20	6.52
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD12	20	6.52
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD13	20	6.52
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD21	20	6.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD22	20	6.52
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD23	20	6.52
(1,262)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD2	12	6.52
(1,262)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD3	12	6.52
(1,215)	1:8:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB2	3	6.52
(1,215)	1:8:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB3	3	6.52
(1,215)	1:8:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB2	4	6.52
(1,215)	1:8:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB3	4	6.52
(1,49)	1:12:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HG3	8	6.52
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD11	2	6.51
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD12	2	6.51
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD13	2	6.51
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD21	2	6.51
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD22	2	6.51
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD23	2	6.51
(1,302)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:HB2	20	6.51
(1,302)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:HB2	20	6.51
(1,302)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:HB2	20	6.51
(1,237)	1:7:A:LYS:HB2	1:10:A:PRO:HB2	1	6.51
(1,237)	1:7:A:LYS:HB2	1:10:A:PRO:HB3	1	6.51
(1,237)	1:7:A:LYS:HB3	1:10:A:PRO:HB2	1	6.51
(1,237)	1:7:A:LYS:HB3	1:10:A:PRO:HB3	1	6.51
(1,192)	1:3:A:PRO:HA	1:4:A:TRP:HB3	10	6.51
(1,185)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB3	17	6.51
(1,178)	1:3:A:PRO:HA	1:4:A:TRP:HB3	10	6.51
(1,170)	1:12:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD2	9	6.51
(1,170)	1:12:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD3	9	6.51
(1,137)	1:12:A:ARG:HE	1:13:A:ARG:HG3	18	6.51
(1,120)	1:12:A:ARG:H	1:12:A:ARG:HE	10	6.51
(1,57)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB3	17	6.51
(1,51)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB3	17	6.51
(1,296)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG2	17	6.5
(1,296)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG3	17	6.5
(1,232)	1:2:A:LEU:HB2	1:6:A:TRP:H	12	6.5
(1,226)	1:2:A:LEU:HB2	1:6:A:TRP:HB2	17	6.5
(1,181)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG2	17	6.5
(1,181)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG3	17	6.5
(1,103)	1:6:A:TRP:H	1:9:A:THR:HG21	5	6.5
(1,103)	1:6:A:TRP:H	1:9:A:THR:HG22	5	6.5
(1,103)	1:6:A:TRP:H	1:9:A:THR:HG23	5	6.5
(1,95)	1:2:A:LEU:HB2	1:6:A:TRP:H	5	6.5
(1,54)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB2	19	6.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,152)	1:10:A:PRO:HB2	1:12:A:ARG:HE	16	6.49
(1,152)	1:10:A:PRO:HB3	1:12:A:ARG:HE	16	6.49
(1,297)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD2	1	6.48
(1,297)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD3	1	6.48
(1,297)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD2	1	6.48
(1,297)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD3	1	6.48
(1,297)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD2	1	6.48
(1,297)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD3	1	6.48
(1,290)	1:1:A:ILE:HG21	1:3:A:PRO:HA	5	6.48
(1,290)	1:1:A:ILE:HG22	1:3:A:PRO:HA	5	6.48
(1,290)	1:1:A:ILE:HG23	1:3:A:PRO:HA	5	6.48
(1,279)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HD2	1	6.48
(1,279)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HD3	1	6.48
(1,269)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HB2	1	6.48
(1,269)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HB3	1	6.48
(1,250)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:H	2	6.48
(1,215)	1:8:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB2	5	6.48
(1,215)	1:8:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB3	5	6.48
(1,207)	1:10:A:PRO:HB2	1:12:A:ARG:HA	14	6.48
(1,207)	1:10:A:PRO:HB3	1:12:A:ARG:HA	14	6.48
(1,207)	1:10:A:PRO:HB2	1:12:A:ARG:HA	16	6.48
(1,207)	1:10:A:PRO:HB3	1:12:A:ARG:HA	16	6.48
(1,182)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD2	1	6.48
(1,182)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD3	1	6.48
(1,182)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD2	1	6.48
(1,182)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD3	1	6.48
(1,182)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD2	1	6.48
(1,182)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD3	1	6.48
(1,156)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HG2	14	6.48
(1,156)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HG2	14	6.48
(1,138)	1:11:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	4	6.48
(1,103)	1:6:A:TRP:H	1:9:A:THR:HG21	3	6.48
(1,103)	1:6:A:TRP:H	1:9:A:THR:HG22	3	6.48
(1,103)	1:6:A:TRP:H	1:9:A:THR:HG23	3	6.48
(1,98)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:H	2	6.48
(1,18)	1:7:A:LYS:H	1:8:A:TRP:HB3	14	6.48
(1,302)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:HB2	13	6.47
(1,302)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:HB2	13	6.47
(1,302)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:HB2	13	6.47
(1,292)	1:5:A:LYS:HG2	1:7:A:LYS:HA	7	6.47
(1,292)	1:5:A:LYS:HG3	1:7:A:LYS:HA	7	6.47
(1,185)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB3	13	6.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,57)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB3	13	6.47
(1,51)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB3	13	6.47
(1,302)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:HB2	11	6.46
(1,302)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:HB2	11	6.46
(1,302)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:HB2	11	6.46
(1,261)	1:12:A:ARG:HA	1:13:A:ARG:HG3	13	6.46
(1,77)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB2	4	6.46
(1,77)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB3	4	6.46
(1,67)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB2	4	6.46
(1,67)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB3	4	6.46
(1,11)	1:2:A:LEU:H	1:4:A:TRP:HB2	19	6.46
(1,207)	1:10:A:PRO:HB2	1:12:A:ARG:HA	10	6.45
(1,207)	1:10:A:PRO:HB3	1:12:A:ARG:HA	10	6.45
(1,207)	1:10:A:PRO:HB2	1:12:A:ARG:HA	13	6.45
(1,207)	1:10:A:PRO:HB3	1:12:A:ARG:HA	13	6.45
(1,185)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB3	10	6.45
(1,57)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB3	10	6.45
(1,51)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB3	10	6.45
(1,39)	1:6:A:TRP:HB3	1:8:A:TRP:H	17	6.45
(1,37)	1:7:A:LYS:HE2	1:8:A:TRP:H	20	6.45
(1,37)	1:7:A:LYS:HE3	1:8:A:TRP:H	20	6.45
(1,9)	1:2:A:LEU:H	1:5:A:LYS:HG2	10	6.45
(1,9)	1:2:A:LEU:H	1:5:A:LYS:HG3	10	6.45
(1,302)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:HB2	4	6.44
(1,302)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:HB2	4	6.44
(1,302)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:HB2	4	6.44
(1,254)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD2	3	6.44
(1,254)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD3	3	6.44
(1,170)	1:12:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD2	16	6.44
(1,170)	1:12:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD3	16	6.44
(1,155)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HD2	18	6.44
(1,155)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HD3	18	6.44
(1,108)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE2	15	6.44
(1,108)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE3	15	6.44
(1,92)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE2	7	6.44
(1,92)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE3	7	6.44
(1,49)	1:12:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HG3	20	6.44
(1,37)	1:7:A:LYS:HE2	1:8:A:TRP:H	14	6.44
(1,37)	1:7:A:LYS:HE3	1:8:A:TRP:H	14	6.44
(1,254)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD2	19	6.43
(1,254)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD3	19	6.43
(1,296)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG2	5	6.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,296)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG3	5	6.42
(1,244)	1:7:A:LYS:HD2	1:10:A:PRO:HB2	3	6.42
(1,244)	1:7:A:LYS:HD2	1:10:A:PRO:HB3	3	6.42
(1,244)	1:7:A:LYS:HD3	1:10:A:PRO:HB2	3	6.42
(1,244)	1:7:A:LYS:HD3	1:10:A:PRO:HB3	3	6.42
(1,187)	1:4:A:TRP:HB3	1:6:A:TRP:H	12	6.42
(1,181)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG2	5	6.42
(1,181)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG3	5	6.42
(1,170)	1:12:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD2	11	6.42
(1,170)	1:12:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD3	11	6.42
(1,91)	1:4:A:TRP:HB3	1:6:A:TRP:H	12	6.42
(1,83)	1:4:A:TRP:HB3	1:6:A:TRP:H	12	6.42
(1,18)	1:7:A:LYS:H	1:8:A:TRP:HB3	11	6.42
(1,318)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:HB3	20	6.41
(1,318)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:HB3	20	6.41
(1,318)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:HB3	20	6.41
(1,267)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:HB3	20	6.41
(1,267)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:HB3	20	6.41
(1,267)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:HB3	20	6.41
(1,240)	1:1:A:ILE:HG21	1:2:A:LEU:HB2	7	6.41
(1,240)	1:1:A:ILE:HG22	1:2:A:LEU:HB2	7	6.41
(1,240)	1:1:A:ILE:HG23	1:2:A:LEU:HB2	7	6.41
(1,172)	1:5:A:LYS:HE2	1:8:A:TRP:H	17	6.41
(1,172)	1:5:A:LYS:HE3	1:8:A:TRP:H	17	6.41
(1,155)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HD2	19	6.41
(1,155)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HD3	19	6.41
(1,92)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE2	10	6.41
(1,92)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE3	10	6.41
(1,315)	1:1:A:ILE:HD11	1:6:A:TRP:HB2	9	6.4
(1,315)	1:1:A:ILE:HD12	1:6:A:TRP:HB2	9	6.4
(1,315)	1:1:A:ILE:HD13	1:6:A:TRP:HB2	9	6.4
(1,306)	1:2:A:LEU:HD11	1:5:A:LYS:HA	15	6.4
(1,306)	1:2:A:LEU:HD12	1:5:A:LYS:HA	15	6.4
(1,306)	1:2:A:LEU:HD13	1:5:A:LYS:HA	15	6.4
(1,306)	1:2:A:LEU:HD21	1:5:A:LYS:HA	15	6.4
(1,306)	1:2:A:LEU:HD22	1:5:A:LYS:HA	15	6.4
(1,306)	1:2:A:LEU:HD23	1:5:A:LYS:HA	15	6.4
(1,298)	1:5:A:LYS:HG2	1:6:A:TRP:HB3	19	6.4
(1,298)	1:5:A:LYS:HG3	1:6:A:TRP:HB3	19	6.4
(1,280)	1:5:A:LYS:HD2	1:7:A:LYS:HA	17	6.4
(1,280)	1:5:A:LYS:HD3	1:7:A:LYS:HA	17	6.4
(1,200)	1:5:A:LYS:HG2	1:6:A:TRP:HB3	19	6.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,200)	1:5:A:LYS:HG3	1:6:A:TRP:HB3	19	6.4
(1,11)	1:2:A:LEU:H	1:4:A:TRP:HB2	4	6.4
(1,284)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HE	15	6.39
(1,284)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HE	15	6.39
(1,284)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HE	15	6.39
(1,243)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HB3	11	6.39
(1,231)	1:11:A:TRP:HB2	1:13:A:ARG:HG2	18	6.39
(1,231)	1:11:A:TRP:HB3	1:13:A:ARG:HG2	18	6.39
(1,185)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB3	3	6.39
(1,141)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HE	15	6.39
(1,141)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HE	15	6.39
(1,141)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HE	15	6.39
(1,138)	1:11:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	1	6.39
(1,57)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB3	3	6.39
(1,51)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB3	3	6.39
(1,298)	1:5:A:LYS:HG2	1:6:A:TRP:HB3	1	6.38
(1,298)	1:5:A:LYS:HG3	1:6:A:TRP:HB3	1	6.38
(1,229)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HB2	9	6.38
(1,229)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HB3	9	6.38
(1,200)	1:5:A:LYS:HG2	1:6:A:TRP:HB3	1	6.38
(1,200)	1:5:A:LYS:HG3	1:6:A:TRP:HB3	1	6.38
(1,130)	1:9:A:THR:HB	1:12:A:ARG:HE	11	6.38
(1,54)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB2	2	6.38
(1,42)	1:6:A:TRP:HB2	1:8:A:TRP:H	6	6.38
(1,318)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:HB3	15	6.37
(1,318)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:HB3	15	6.37
(1,318)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:HB3	15	6.37
(1,290)	1:1:A:ILE:HG21	1:3:A:PRO:HA	8	6.37
(1,290)	1:1:A:ILE:HG22	1:3:A:PRO:HA	8	6.37
(1,290)	1:1:A:ILE:HG23	1:3:A:PRO:HA	8	6.37
(1,267)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:HB3	15	6.37
(1,267)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:HB3	15	6.37
(1,267)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:HB3	15	6.37
(1,163)	1:4:A:TRP:HB2	1:5:A:LYS:HA	7	6.37
(1,94)	1:6:A:TRP:H	1:10:A:PRO:HB2	19	6.37
(1,94)	1:6:A:TRP:H	1:10:A:PRO:HB3	19	6.37
(1,14)	1:7:A:LYS:H	1:11:A:TRP:H	16	6.37
(1,302)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:HB2	2	6.36
(1,302)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:HB2	2	6.36
(1,302)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:HB2	2	6.36
(1,170)	1:12:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD2	14	6.36
(1,170)	1:12:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD3	14	6.36

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,78)	1:6:A:TRP:HB2	1:9:A:THR:H	14	6.36
(1,69)	1:6:A:TRP:HB2	1:9:A:THR:H	14	6.36
(1,302)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:HB2	15	6.35
(1,302)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:HB2	15	6.35
(1,302)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:HB2	15	6.35
(1,287)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HG2	13	6.35
(1,287)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HG3	13	6.35
(1,245)	1:10:A:PRO:HB2	1:12:A:ARG:HG2	7	6.35
(1,245)	1:10:A:PRO:HB3	1:12:A:ARG:HG2	7	6.35
(1,125)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HA	13	6.35
(1,68)	1:11:A:TRP:HB2	1:13:A:ARG:HE	7	6.34
(1,68)	1:11:A:TRP:HB3	1:13:A:ARG:HE	7	6.34
(1,318)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:HB3	6	6.33
(1,318)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:HB3	6	6.33
(1,318)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:HB3	6	6.33
(1,269)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HB2	8	6.33
(1,269)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HB3	8	6.33
(1,267)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:HB3	6	6.33
(1,267)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:HB3	6	6.33
(1,267)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:HB3	6	6.33
(1,192)	1:3:A:PRO:HA	1:4:A:TRP:HB3	7	6.33
(1,178)	1:3:A:PRO:HA	1:4:A:TRP:HB3	7	6.33
(1,172)	1:5:A:LYS:HE2	1:8:A:TRP:H	8	6.33
(1,172)	1:5:A:LYS:HE3	1:8:A:TRP:H	8	6.33
(1,158)	1:7:A:LYS:HD2	1:11:A:TRP:HB2	1	6.33
(1,158)	1:7:A:LYS:HD2	1:11:A:TRP:HB3	1	6.33
(1,158)	1:7:A:LYS:HD3	1:11:A:TRP:HB2	1	6.33
(1,158)	1:7:A:LYS:HD3	1:11:A:TRP:HB3	1	6.33
(1,125)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HA	3	6.33
(1,78)	1:6:A:TRP:HB2	1:9:A:THR:H	10	6.33
(1,78)	1:6:A:TRP:HB2	1:9:A:THR:H	15	6.33
(1,69)	1:6:A:TRP:HB2	1:9:A:THR:H	10	6.33
(1,69)	1:6:A:TRP:HB2	1:9:A:THR:H	15	6.33
(1,68)	1:11:A:TRP:HB2	1:13:A:ARG:HE	1	6.33
(1,68)	1:11:A:TRP:HB3	1:13:A:ARG:HE	1	6.33
(1,18)	1:7:A:LYS:H	1:8:A:TRP:HB3	9	6.33
(1,262)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD2	7	6.32
(1,262)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD3	7	6.32
(1,232)	1:2:A:LEU:HB2	1:6:A:TRP:H	18	6.32
(1,207)	1:10:A:PRO:HB2	1:12:A:ARG:HA	15	6.32
(1,207)	1:10:A:PRO:HB3	1:12:A:ARG:HA	15	6.32
(1,187)	1:4:A:TRP:HB3	1:6:A:TRP:H	18	6.32

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,91)	1:4:A:TRP:HB3	1:6:A:TRP:H	18	6.32
(1,83)	1:4:A:TRP:HB3	1:6:A:TRP:H	18	6.32
(1,298)	1:5:A:LYS:HG2	1:6:A:TRP:HB3	3	6.31
(1,298)	1:5:A:LYS:HG3	1:6:A:TRP:HB3	3	6.31
(1,242)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HD2	1	6.31
(1,242)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HD3	1	6.31
(1,229)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HB2	6	6.31
(1,229)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HB3	6	6.31
(1,206)	1:1:A:ILE:HB	1:3:A:PRO:HA	18	6.31
(1,200)	1:5:A:LYS:HG2	1:6:A:TRP:HB3	3	6.31
(1,200)	1:5:A:LYS:HG3	1:6:A:TRP:HB3	3	6.31
(1,185)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB3	12	6.31
(1,170)	1:12:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD2	10	6.31
(1,170)	1:12:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD3	10	6.31
(1,112)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:HB3	7	6.31
(1,107)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:HB3	7	6.31
(1,57)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB3	12	6.31
(1,52)	1:5:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HE2	13	6.31
(1,52)	1:5:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HE3	13	6.31
(1,51)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB3	12	6.31
(1,306)	1:2:A:LEU:HD11	1:5:A:LYS:HA	4	6.3
(1,306)	1:2:A:LEU:HD12	1:5:A:LYS:HA	4	6.3
(1,306)	1:2:A:LEU:HD13	1:5:A:LYS:HA	4	6.3
(1,306)	1:2:A:LEU:HD21	1:5:A:LYS:HA	4	6.3
(1,306)	1:2:A:LEU:HD22	1:5:A:LYS:HA	4	6.3
(1,306)	1:2:A:LEU:HD23	1:5:A:LYS:HA	4	6.3
(1,291)	1:7:A:LYS:HA	1:9:A:THR:HG21	18	6.3
(1,291)	1:7:A:LYS:HA	1:9:A:THR:HG22	18	6.3
(1,291)	1:7:A:LYS:HA	1:9:A:THR:HG23	18	6.3
(1,157)	1:7:A:LYS:HD2	1:8:A:TRP:HB2	2	6.3
(1,157)	1:7:A:LYS:HD3	1:8:A:TRP:HB2	2	6.3
(1,318)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:HB3	10	6.29
(1,318)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:HB3	10	6.29
(1,318)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:HB3	10	6.29
(1,267)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:HB3	10	6.29
(1,267)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:HB3	10	6.29
(1,267)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:HB3	10	6.29
(1,233)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HB2	12	6.29
(1,233)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HB3	12	6.29
(1,170)	1:12:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD2	3	6.29
(1,170)	1:12:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD3	3	6.29
(1,125)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HA	19	6.29

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,54)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB2	16	6.29
(1,302)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:HB2	3	6.27
(1,302)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:HB2	3	6.27
(1,302)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:HB2	3	6.27
(1,291)	1:7:A:LYS:HA	1:9:A:THR:HG21	9	6.27
(1,291)	1:7:A:LYS:HA	1:9:A:THR:HG22	9	6.27
(1,291)	1:7:A:LYS:HA	1:9:A:THR:HG23	9	6.27
(1,262)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD2	1	6.27
(1,262)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD3	1	6.27
(1,233)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HB2	13	6.27
(1,233)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HB3	13	6.27
(1,230)	1:6:A:TRP:HB2	1:13:A:ARG:HG2	3	6.27
(1,199)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:HG21	11	6.27
(1,199)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:HG22	11	6.27
(1,199)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:HG23	11	6.27
(1,199)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:HG21	11	6.27
(1,199)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:HG22	11	6.27
(1,199)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:HG23	11	6.27
(1,80)	1:4:A:TRP:HB2	1:6:A:TRP:H	8	6.27
(1,35)	1:7:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:H	10	6.27
(1,35)	1:7:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:H	10	6.27
(1,204)	1:6:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG21	2	6.26
(1,204)	1:6:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG22	2	6.26
(1,204)	1:6:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG23	2	6.26
(1,157)	1:7:A:LYS:HD2	1:8:A:TRP:HB2	13	6.26
(1,157)	1:7:A:LYS:HD3	1:8:A:TRP:HB2	13	6.26
(1,139)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HE	11	6.26
(1,139)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HE	11	6.26
(1,80)	1:4:A:TRP:HB2	1:6:A:TRP:H	5	6.26
(1,306)	1:2:A:LEU:HD11	1:5:A:LYS:HA	20	6.25
(1,306)	1:2:A:LEU:HD12	1:5:A:LYS:HA	20	6.25
(1,306)	1:2:A:LEU:HD13	1:5:A:LYS:HA	20	6.25
(1,306)	1:2:A:LEU:HD21	1:5:A:LYS:HA	20	6.25
(1,306)	1:2:A:LEU:HD22	1:5:A:LYS:HA	20	6.25
(1,306)	1:2:A:LEU:HD23	1:5:A:LYS:HA	20	6.25
(1,302)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:HB2	17	6.25
(1,302)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:HB2	17	6.25
(1,302)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:HB2	17	6.25
(1,262)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD2	16	6.25
(1,262)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD3	16	6.25
(1,243)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HB3	13	6.25
(1,77)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB2	16	6.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,77)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB3	16	6.25
(1,67)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB2	16	6.25
(1,67)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB3	16	6.25
(1,52)	1:5:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HE2	15	6.25
(1,52)	1:5:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HE3	15	6.25
(1,302)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:HB2	5	6.24
(1,302)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:HB2	5	6.24
(1,302)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:HB2	5	6.24
(1,297)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD2	17	6.24
(1,297)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD3	17	6.24
(1,297)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD2	17	6.24
(1,297)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD3	17	6.24
(1,297)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD2	17	6.24
(1,297)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD3	17	6.24
(1,252)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:H	20	6.24
(1,182)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD2	17	6.24
(1,182)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD3	17	6.24
(1,182)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD2	17	6.24
(1,182)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD3	17	6.24
(1,182)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD2	17	6.24
(1,182)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD3	17	6.24
(1,156)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HG2	10	6.24
(1,156)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HG2	10	6.24
(1,154)	1:2:A:LEU:HB3	1:4:A:TRP:HB2	19	6.24
(1,121)	1:8:A:TRP:H	1:11:A:TRP:H	3	6.24
(1,92)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE2	11	6.24
(1,92)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE3	11	6.24
(1,49)	1:12:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HG3	15	6.24
(1,37)	1:7:A:LYS:HE2	1:8:A:TRP:H	2	6.24
(1,37)	1:7:A:LYS:HE3	1:8:A:TRP:H	2	6.24
(1,258)	1:2:A:LEU:HB3	1:3:A:PRO:HA	10	6.23
(1,243)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HB3	4	6.23
(1,191)	1:7:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB3	3	6.23
(1,157)	1:7:A:LYS:HD2	1:8:A:TRP:HB2	11	6.23
(1,157)	1:7:A:LYS:HD3	1:8:A:TRP:HB2	11	6.23
(1,14)	1:7:A:LYS:H	1:11:A:TRP:H	11	6.23
(1,269)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HB2	13	6.22
(1,269)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HB3	13	6.22
(1,229)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HB2	4	6.22
(1,229)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HB3	4	6.22
(1,210)	1:7:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB2	10	6.22
(1,210)	1:7:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB3	10	6.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,163)	1:4:A:TRP:HB2	1:5:A:LYS:HA	2	6.22
(1,269)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HB2	20	6.21
(1,269)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HB3	20	6.21
(1,258)	1:2:A:LEU:HB3	1:3:A:PRO:HA	14	6.21
(1,252)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:H	1	6.21
(1,243)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HB3	17	6.21
(1,145)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	6	6.21
(1,145)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HE	6	6.21
(1,39)	1:6:A:TRP:HB3	1:8:A:TRP:H	9	6.21
(1,291)	1:7:A:LYS:HA	1:9:A:THR:HG21	6	6.2
(1,291)	1:7:A:LYS:HA	1:9:A:THR:HG22	6	6.2
(1,291)	1:7:A:LYS:HA	1:9:A:THR:HG23	6	6.2
(1,280)	1:5:A:LYS:HD2	1:7:A:LYS:HA	14	6.2
(1,280)	1:5:A:LYS:HD3	1:7:A:LYS:HA	14	6.2
(1,269)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HB2	18	6.2
(1,269)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HB3	18	6.2
(1,138)	1:11:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	11	6.2
(1,37)	1:7:A:LYS:HE2	1:8:A:TRP:H	16	6.2
(1,37)	1:7:A:LYS:HE3	1:8:A:TRP:H	16	6.2
(1,204)	1:6:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG21	18	6.19
(1,204)	1:6:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG22	18	6.19
(1,204)	1:6:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG23	18	6.19
(1,156)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HG2	5	6.19
(1,156)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HG2	5	6.19
(1,52)	1:5:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HE2	2	6.19
(1,52)	1:5:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HE3	2	6.19
(1,42)	1:6:A:TRP:HB2	1:8:A:TRP:H	3	6.19
(1,269)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HB2	15	6.18
(1,269)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HB3	15	6.18
(1,262)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD2	17	6.18
(1,262)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD3	17	6.18
(1,207)	1:10:A:PRO:HB2	1:12:A:ARG:HA	18	6.18
(1,207)	1:10:A:PRO:HB3	1:12:A:ARG:HA	18	6.18
(1,172)	1:5:A:LYS:HE2	1:8:A:TRP:H	14	6.18
(1,172)	1:5:A:LYS:HE3	1:8:A:TRP:H	14	6.18
(1,170)	1:12:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD2	12	6.18
(1,170)	1:12:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD3	12	6.18
(1,163)	1:4:A:TRP:HB2	1:5:A:LYS:HA	9	6.18
(1,302)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:HB2	9	6.17
(1,302)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:HB2	9	6.17
(1,302)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:HB2	9	6.17
(1,269)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HB2	10	6.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,269)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HB3	10	6.17
(1,162)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HA	1	6.17
(1,318)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:HB3	17	6.16
(1,318)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:HB3	17	6.16
(1,318)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:HB3	17	6.16
(1,269)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HB2	17	6.16
(1,269)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HB3	17	6.16
(1,267)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:HB3	17	6.16
(1,267)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:HB3	17	6.16
(1,267)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:HB3	17	6.16
(1,201)	1:5:A:LYS:HG2	1:7:A:LYS:HE2	16	6.16
(1,201)	1:5:A:LYS:HG2	1:7:A:LYS:HE3	16	6.16
(1,201)	1:5:A:LYS:HG3	1:7:A:LYS:HE2	16	6.16
(1,201)	1:5:A:LYS:HG3	1:7:A:LYS:HE3	16	6.16
(1,156)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HG2	17	6.16
(1,156)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HG2	17	6.16
(1,54)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB2	6	6.16
(1,14)	1:7:A:LYS:H	1:11:A:TRP:H	6	6.16
(1,231)	1:11:A:TRP:HB2	1:13:A:ARG:HG2	4	6.15
(1,231)	1:11:A:TRP:HB3	1:13:A:ARG:HG2	4	6.15
(1,203)	1:1:A:ILE:HG21	1:7:A:LYS:HE2	4	6.15
(1,203)	1:1:A:ILE:HG21	1:7:A:LYS:HE3	4	6.15
(1,203)	1:1:A:ILE:HG22	1:7:A:LYS:HE2	4	6.15
(1,203)	1:1:A:ILE:HG22	1:7:A:LYS:HE3	4	6.15
(1,203)	1:1:A:ILE:HG23	1:7:A:LYS:HE2	4	6.15
(1,203)	1:1:A:ILE:HG23	1:7:A:LYS:HE3	4	6.15
(1,201)	1:5:A:LYS:HG2	1:7:A:LYS:HE2	1	6.15
(1,201)	1:5:A:LYS:HG2	1:7:A:LYS:HE3	1	6.15
(1,201)	1:5:A:LYS:HG3	1:7:A:LYS:HE2	1	6.15
(1,201)	1:5:A:LYS:HG3	1:7:A:LYS:HE3	1	6.15
(1,132)	1:7:A:LYS:HE2	1:11:A:TRP:H	19	6.15
(1,132)	1:7:A:LYS:HE3	1:11:A:TRP:H	19	6.15
(1,92)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE2	12	6.15
(1,92)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE3	12	6.15
(1,54)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB2	18	6.15
(1,14)	1:7:A:LYS:H	1:11:A:TRP:H	9	6.15
(1,205)	1:1:A:ILE:HB	1:5:A:LYS:HA	10	6.14
(1,153)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:HB2	14	6.14
(1,138)	1:11:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	3	6.14
(1,118)	1:1:A:ILE:HG21	1:4:A:TRP:H	1	6.14
(1,118)	1:1:A:ILE:HG22	1:4:A:TRP:H	1	6.14
(1,118)	1:1:A:ILE:HG23	1:4:A:TRP:H	1	6.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,49)	1:12:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HG3	4	6.14
(1,258)	1:2:A:LEU:HB3	1:3:A:PRO:HA	6	6.13
(1,233)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HB2	2	6.13
(1,233)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HB3	2	6.13
(1,138)	1:11:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	20	6.13
(1,118)	1:1:A:ILE:HG21	1:4:A:TRP:H	4	6.13
(1,118)	1:1:A:ILE:HG22	1:4:A:TRP:H	4	6.13
(1,118)	1:1:A:ILE:HG23	1:4:A:TRP:H	4	6.13
(1,95)	1:2:A:LEU:HB2	1:6:A:TRP:H	6	6.13
(1,302)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:HB2	18	6.12
(1,302)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:HB2	18	6.12
(1,302)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:HB2	18	6.12
(1,290)	1:1:A:ILE:HG21	1:3:A:PRO:HA	15	6.12
(1,290)	1:1:A:ILE:HG22	1:3:A:PRO:HA	15	6.12
(1,290)	1:1:A:ILE:HG23	1:3:A:PRO:HA	15	6.12
(1,233)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HB2	20	6.12
(1,233)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HB3	20	6.12
(1,206)	1:1:A:ILE:HB	1:3:A:PRO:HA	6	6.12
(1,189)	1:6:A:TRP:HB3	1:7:A:LYS:HA	16	6.12
(1,189)	1:6:A:TRP:HB3	1:7:A:LYS:HA	19	6.12
(1,54)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB2	5	6.12
(1,37)	1:7:A:LYS:HE2	1:8:A:TRP:H	1	6.12
(1,37)	1:7:A:LYS:HE3	1:8:A:TRP:H	1	6.12
(1,288)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HA	11	6.11
(1,288)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HA	11	6.11
(1,288)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HA	11	6.11
(1,138)	1:11:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	17	6.11
(1,80)	1:4:A:TRP:HB2	1:6:A:TRP:H	3	6.11
(1,49)	1:12:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HG3	2	6.11
(1,13)	1:2:A:LEU:H	1:7:A:LYS:HD2	4	6.11
(1,13)	1:2:A:LEU:H	1:7:A:LYS:HD3	4	6.11
(1,302)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:HB2	1	6.1
(1,302)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:HB2	1	6.1
(1,302)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:HB2	1	6.1
(1,243)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HB3	5	6.1
(1,233)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HB2	18	6.1
(1,233)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HB3	18	6.1
(1,189)	1:6:A:TRP:HB3	1:7:A:LYS:HA	11	6.1
(1,52)	1:5:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HE2	1	6.1
(1,52)	1:5:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HE3	1	6.1
(1,308)	1:1:A:ILE:HD11	1:3:A:PRO:HA	3	6.09
(1,308)	1:1:A:ILE:HD12	1:3:A:PRO:HA	3	6.09

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,308)	1:1:A:ILE:HD13	1:3:A:PRO:HA	3	6.09
(1,233)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HB2	14	6.09
(1,233)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HB3	14	6.09
(1,191)	1:7:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB3	4	6.09
(1,190)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HA	4	6.09
(1,187)	1:4:A:TRP:HB3	1:6:A:TRP:H	10	6.09
(1,177)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HA	4	6.09
(1,91)	1:4:A:TRP:HB3	1:6:A:TRP:H	10	6.09
(1,83)	1:4:A:TRP:HB3	1:6:A:TRP:H	10	6.09
(1,145)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	3	6.08
(1,145)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HE	3	6.08
(1,49)	1:12:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HG3	5	6.08
(1,49)	1:12:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HG3	6	6.08
(1,254)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD2	8	6.07
(1,254)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD3	8	6.07
(1,232)	1:2:A:LEU:HB2	1:6:A:TRP:H	5	6.07
(1,78)	1:6:A:TRP:HB2	1:9:A:THR:H	12	6.07
(1,69)	1:6:A:TRP:HB2	1:9:A:THR:H	12	6.07
(1,42)	1:6:A:TRP:HB2	1:8:A:TRP:H	5	6.07
(1,314)	1:2:A:LEU:HD11	1:4:A:TRP:HB2	14	6.06
(1,314)	1:2:A:LEU:HD12	1:4:A:TRP:HB2	14	6.06
(1,314)	1:2:A:LEU:HD13	1:4:A:TRP:HB2	14	6.06
(1,314)	1:2:A:LEU:HD21	1:4:A:TRP:HB2	14	6.06
(1,314)	1:2:A:LEU:HD22	1:4:A:TRP:HB2	14	6.06
(1,314)	1:2:A:LEU:HD23	1:4:A:TRP:HB2	14	6.06
(1,298)	1:5:A:LYS:HG2	1:6:A:TRP:HB3	8	6.06
(1,298)	1:5:A:LYS:HG3	1:6:A:TRP:HB3	8	6.06
(1,287)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HG2	11	6.06
(1,287)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HG3	11	6.06
(1,227)	1:7:A:LYS:HB2	1:8:A:TRP:HB2	4	6.06
(1,227)	1:7:A:LYS:HB3	1:8:A:TRP:HB2	4	6.06
(1,200)	1:5:A:LYS:HG2	1:6:A:TRP:HB3	8	6.06
(1,200)	1:5:A:LYS:HG3	1:6:A:TRP:HB3	8	6.06
(1,163)	1:4:A:TRP:HB2	1:5:A:LYS:HA	17	6.06
(1,191)	1:7:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB3	13	6.05
(1,189)	1:6:A:TRP:HB3	1:7:A:LYS:HA	13	6.05
(1,197)	1:5:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB3	7	6.04
(1,185)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB3	11	6.04
(1,88)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HA	2	6.04
(1,71)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:H	14	6.04
(1,71)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:H	14	6.04
(1,57)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB3	11	6.04

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,51)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB3	11	6.04
(1,163)	1:4:A:TRP:HB2	1:5:A:LYS:HA	5	6.03
(1,162)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HA	3	6.03
(1,95)	1:2:A:LEU:HB2	1:6:A:TRP:H	17	6.03
(1,11)	1:2:A:LEU:H	1:4:A:TRP:HB2	13	6.03
(1,190)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HA	6	6.02
(1,177)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HA	6	6.02
(1,189)	1:6:A:TRP:HB3	1:7:A:LYS:HA	8	6.01
(1,187)	1:4:A:TRP:HB3	1:6:A:TRP:H	13	6.01
(1,163)	1:4:A:TRP:HB2	1:5:A:LYS:HA	11	6.01
(1,91)	1:4:A:TRP:HB3	1:6:A:TRP:H	13	6.01
(1,83)	1:4:A:TRP:HB3	1:6:A:TRP:H	13	6.01
(1,240)	1:1:A:ILE:HG21	1:2:A:LEU:HB2	15	6.0
(1,240)	1:1:A:ILE:HG22	1:2:A:LEU:HB2	15	6.0
(1,240)	1:1:A:ILE:HG23	1:2:A:LEU:HB2	15	6.0
(1,163)	1:4:A:TRP:HB2	1:5:A:LYS:HA	6	6.0
(1,89)	1:3:A:PRO:HA	1:6:A:TRP:H	17	6.0
(1,252)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:H	11	5.99
(1,228)	1:2:A:LEU:HB2	1:4:A:TRP:HB2	10	5.99
(1,227)	1:7:A:LYS:HB2	1:8:A:TRP:HB2	20	5.99
(1,227)	1:7:A:LYS:HB3	1:8:A:TRP:HB2	20	5.99
(1,191)	1:7:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB3	19	5.99
(1,92)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE2	2	5.99
(1,92)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE3	2	5.99
(1,11)	1:2:A:LEU:H	1:4:A:TRP:HB2	18	5.99
(1,269)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HB2	7	5.98
(1,269)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HB3	7	5.98
(1,306)	1:2:A:LEU:HD11	1:5:A:LYS:HA	11	5.97
(1,306)	1:2:A:LEU:HD12	1:5:A:LYS:HA	11	5.97
(1,306)	1:2:A:LEU:HD13	1:5:A:LYS:HA	11	5.97
(1,306)	1:2:A:LEU:HD21	1:5:A:LYS:HA	11	5.97
(1,306)	1:2:A:LEU:HD22	1:5:A:LYS:HA	11	5.97
(1,306)	1:2:A:LEU:HD23	1:5:A:LYS:HA	11	5.97
(1,243)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HB3	9	5.97
(1,154)	1:2:A:LEU:HB3	1:4:A:TRP:HB2	16	5.97
(1,135)	1:5:A:LYS:HB2	1:12:A:ARG:HE	15	5.97
(1,135)	1:5:A:LYS:HB3	1:12:A:ARG:HE	15	5.97
(1,287)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HG2	18	5.96
(1,287)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HG3	18	5.96
(1,247)	1:7:A:LYS:HD2	1:8:A:TRP:H	13	5.96
(1,247)	1:7:A:LYS:HD3	1:8:A:TRP:H	13	5.96
(1,229)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HB2	8	5.96

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,229)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HB3	8	5.96
(1,207)	1:10:A:PRO:HB2	1:12:A:ARG:HA	9	5.96
(1,207)	1:10:A:PRO:HB3	1:12:A:ARG:HA	9	5.96
(1,118)	1:1:A:ILE:HG21	1:4:A:TRP:H	11	5.96
(1,118)	1:1:A:ILE:HG22	1:4:A:TRP:H	11	5.96
(1,118)	1:1:A:ILE:HG23	1:4:A:TRP:H	11	5.96
(1,47)	1:7:A:LYS:HD2	1:8:A:TRP:H	13	5.96
(1,47)	1:7:A:LYS:HD3	1:8:A:TRP:H	13	5.96
(1,42)	1:6:A:TRP:HB2	1:8:A:TRP:H	10	5.96
(1,254)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD2	9	5.95
(1,254)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD3	9	5.95
(1,170)	1:12:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD2	17	5.95
(1,170)	1:12:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD3	17	5.95
(1,155)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HD2	17	5.95
(1,155)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HD3	17	5.95
(1,120)	1:12:A:ARG:H	1:12:A:ARG:HE	6	5.95
(1,290)	1:1:A:ILE:HG21	1:3:A:PRO:HA	9	5.94
(1,290)	1:1:A:ILE:HG22	1:3:A:PRO:HA	9	5.94
(1,290)	1:1:A:ILE:HG23	1:3:A:PRO:HA	9	5.94
(1,228)	1:2:A:LEU:HB2	1:4:A:TRP:HB2	19	5.94
(1,42)	1:6:A:TRP:HB2	1:8:A:TRP:H	18	5.94
(1,308)	1:1:A:ILE:HD11	1:3:A:PRO:HA	2	5.93
(1,308)	1:1:A:ILE:HD12	1:3:A:PRO:HA	2	5.93
(1,308)	1:1:A:ILE:HD13	1:3:A:PRO:HA	2	5.93
(1,298)	1:5:A:LYS:HG2	1:6:A:TRP:HB3	13	5.93
(1,298)	1:5:A:LYS:HG3	1:6:A:TRP:HB3	13	5.93
(1,298)	1:5:A:LYS:HG2	1:6:A:TRP:HB3	15	5.93
(1,298)	1:5:A:LYS:HG3	1:6:A:TRP:HB3	15	5.93
(1,200)	1:5:A:LYS:HG2	1:6:A:TRP:HB3	13	5.93
(1,200)	1:5:A:LYS:HG3	1:6:A:TRP:HB3	13	5.93
(1,200)	1:5:A:LYS:HG2	1:6:A:TRP:HB3	15	5.93
(1,200)	1:5:A:LYS:HG3	1:6:A:TRP:HB3	15	5.93
(1,189)	1:6:A:TRP:HB3	1:7:A:LYS:HA	5	5.93
(1,152)	1:10:A:PRO:HB2	1:12:A:ARG:HE	12	5.93
(1,152)	1:10:A:PRO:HB3	1:12:A:ARG:HE	12	5.93
(1,71)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:H	17	5.93
(1,71)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:H	17	5.93
(1,269)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HB2	16	5.92
(1,269)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HB3	16	5.92
(1,215)	1:8:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB2	13	5.92
(1,215)	1:8:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB3	13	5.92
(1,192)	1:3:A:PRO:HA	1:4:A:TRP:HB3	12	5.92

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,185)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB3	5	5.92
(1,178)	1:3:A:PRO:HA	1:4:A:TRP:HB3	12	5.92
(1,156)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HG2	2	5.92
(1,156)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HG2	2	5.92
(1,57)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB3	5	5.92
(1,51)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB3	5	5.92
(1,284)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HE	11	5.91
(1,284)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HE	11	5.91
(1,284)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HE	11	5.91
(1,191)	1:7:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB3	20	5.91
(1,145)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	13	5.91
(1,145)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HE	13	5.91
(1,141)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HE	11	5.91
(1,141)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HE	11	5.91
(1,141)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HE	11	5.91
(1,92)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE2	3	5.91
(1,92)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE3	3	5.91
(1,88)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HA	8	5.91
(1,203)	1:1:A:ILE:HG21	1:7:A:LYS:HE2	1	5.9
(1,203)	1:1:A:ILE:HG21	1:7:A:LYS:HE3	1	5.9
(1,203)	1:1:A:ILE:HG22	1:7:A:LYS:HE2	1	5.9
(1,203)	1:1:A:ILE:HG22	1:7:A:LYS:HE3	1	5.9
(1,203)	1:1:A:ILE:HG23	1:7:A:LYS:HE2	1	5.9
(1,203)	1:1:A:ILE:HG23	1:7:A:LYS:HE3	1	5.9
(1,191)	1:7:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB3	5	5.9
(1,162)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HA	9	5.9
(1,39)	1:6:A:TRP:HB3	1:8:A:TRP:H	18	5.9
(1,261)	1:12:A:ARG:HA	1:13:A:ARG:HG3	19	5.89
(1,247)	1:7:A:LYS:HD2	1:8:A:TRP:H	4	5.89
(1,247)	1:7:A:LYS:HD3	1:8:A:TRP:H	4	5.89
(1,240)	1:1:A:ILE:HG21	1:2:A:LEU:HB2	3	5.89
(1,240)	1:1:A:ILE:HG22	1:2:A:LEU:HB2	3	5.89
(1,240)	1:1:A:ILE:HG23	1:2:A:LEU:HB2	3	5.89
(1,164)	1:3:A:PRO:HA	1:4:A:TRP:HB2	2	5.89
(1,47)	1:7:A:LYS:HD2	1:8:A:TRP:H	4	5.89
(1,47)	1:7:A:LYS:HD3	1:8:A:TRP:H	4	5.89
(1,292)	1:5:A:LYS:HG2	1:7:A:LYS:HA	15	5.88
(1,292)	1:5:A:LYS:HG3	1:7:A:LYS:HA	15	5.88
(1,240)	1:1:A:ILE:HG21	1:2:A:LEU:HB2	5	5.88
(1,240)	1:1:A:ILE:HG22	1:2:A:LEU:HB2	5	5.88
(1,240)	1:1:A:ILE:HG23	1:2:A:LEU:HB2	5	5.88
(1,233)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HB2	9	5.88

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,233)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HB3	9	5.88
(1,187)	1:4:A:TRP:HB3	1:6:A:TRP:H	8	5.88
(1,162)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HA	19	5.88
(1,125)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HA	9	5.88
(1,91)	1:4:A:TRP:HB3	1:6:A:TRP:H	8	5.88
(1,88)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HA	15	5.88
(1,83)	1:4:A:TRP:HB3	1:6:A:TRP:H	8	5.88
(1,18)	1:7:A:LYS:H	1:8:A:TRP:HB3	6	5.88
(1,11)	1:2:A:LEU:H	1:4:A:TRP:HB2	17	5.88
(1,297)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD2	2	5.87
(1,297)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD3	2	5.87
(1,297)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD2	2	5.87
(1,297)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD3	2	5.87
(1,297)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD2	2	5.87
(1,297)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD3	2	5.87
(1,262)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD2	10	5.87
(1,262)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD3	10	5.87
(1,182)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD2	2	5.87
(1,182)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD3	2	5.87
(1,182)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD2	2	5.87
(1,182)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD3	2	5.87
(1,182)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD2	2	5.87
(1,182)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD3	2	5.87
(1,157)	1:7:A:LYS:HD2	1:8:A:TRP:HB2	19	5.87
(1,157)	1:7:A:LYS:HD3	1:8:A:TRP:HB2	19	5.87
(1,125)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HA	20	5.87
(1,290)	1:1:A:ILE:HG21	1:3:A:PRO:HA	20	5.86
(1,290)	1:1:A:ILE:HG22	1:3:A:PRO:HA	20	5.86
(1,290)	1:1:A:ILE:HG23	1:3:A:PRO:HA	20	5.86
(1,288)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HA	10	5.86
(1,288)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HA	10	5.86
(1,288)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HA	10	5.86
(1,269)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HB2	2	5.86
(1,269)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HB3	2	5.86
(1,231)	1:11:A:TRP:HB2	1:13:A:ARG:HG2	3	5.86
(1,231)	1:11:A:TRP:HB3	1:13:A:ARG:HG2	3	5.86
(1,54)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB2	20	5.86
(1,49)	1:12:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HG3	1	5.86
(1,269)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HB2	14	5.85
(1,269)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HB3	14	5.85
(1,269)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HB2	19	5.85
(1,269)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HB3	19	5.85

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,190)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HA	2	5.85
(1,177)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HA	2	5.85
(1,37)	1:7:A:LYS:HE2	1:8:A:TRP:H	19	5.85
(1,37)	1:7:A:LYS:HE3	1:8:A:TRP:H	19	5.85
(1,164)	1:3:A:PRO:HA	1:4:A:TRP:HB2	8	5.84
(1,88)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HA	9	5.84
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD11	3	5.83
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD12	3	5.83
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD13	3	5.83
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD21	3	5.83
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD22	3	5.83
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD23	3	5.83
(1,247)	1:7:A:LYS:HD2	1:8:A:TRP:H	9	5.83
(1,247)	1:7:A:LYS:HD3	1:8:A:TRP:H	9	5.83
(1,193)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE2	6	5.83
(1,193)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE3	6	5.83
(1,47)	1:7:A:LYS:HD2	1:8:A:TRP:H	9	5.83
(1,47)	1:7:A:LYS:HD3	1:8:A:TRP:H	9	5.83
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD11	4	5.82
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD12	4	5.82
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD13	4	5.82
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD21	4	5.82
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD22	4	5.82
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD23	4	5.82
(1,261)	1:12:A:ARG:HA	1:13:A:ARG:HG3	20	5.82
(1,243)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HB3	14	5.82
(1,11)	1:2:A:LEU:H	1:4:A:TRP:HB2	7	5.82
(1,282)	1:9:A:THR:HG21	1:11:A:TRP:H	10	5.81
(1,282)	1:9:A:THR:HG22	1:11:A:TRP:H	10	5.81
(1,282)	1:9:A:THR:HG23	1:11:A:TRP:H	10	5.81
(1,233)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HB2	15	5.81
(1,233)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HB3	15	5.81
(1,163)	1:4:A:TRP:HB2	1:5:A:LYS:HA	15	5.81
(1,140)	1:9:A:THR:HG21	1:11:A:TRP:H	10	5.81
(1,140)	1:9:A:THR:HG22	1:11:A:TRP:H	10	5.81
(1,140)	1:9:A:THR:HG23	1:11:A:TRP:H	10	5.81
(1,18)	1:7:A:LYS:H	1:8:A:TRP:HB3	8	5.81
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD11	11	5.8
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD12	11	5.8
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD13	11	5.8
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD21	11	5.8
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD22	11	5.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD23	11	5.8
(1,313)	1:2:A:LEU:HD11	1:6:A:TRP:HB2	13	5.8
(1,313)	1:2:A:LEU:HD12	1:6:A:TRP:HB2	13	5.8
(1,313)	1:2:A:LEU:HD13	1:6:A:TRP:HB2	13	5.8
(1,313)	1:2:A:LEU:HD21	1:6:A:TRP:HB2	13	5.8
(1,313)	1:2:A:LEU:HD22	1:6:A:TRP:HB2	13	5.8
(1,313)	1:2:A:LEU:HD23	1:6:A:TRP:HB2	13	5.8
(1,269)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HB2	9	5.8
(1,269)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HB3	9	5.8
(1,240)	1:1:A:ILE:HG21	1:2:A:LEU:HB2	9	5.8
(1,240)	1:1:A:ILE:HG22	1:2:A:LEU:HB2	9	5.8
(1,240)	1:1:A:ILE:HG23	1:2:A:LEU:HB2	9	5.8
(1,193)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE2	14	5.8
(1,193)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE3	14	5.8
(1,192)	1:3:A:PRO:HA	1:4:A:TRP:HB3	9	5.8
(1,189)	1:6:A:TRP:HB3	1:7:A:LYS:HA	14	5.8
(1,178)	1:3:A:PRO:HA	1:4:A:TRP:HB3	9	5.8
(1,298)	1:5:A:LYS:HG2	1:6:A:TRP:HB3	17	5.79
(1,298)	1:5:A:LYS:HG3	1:6:A:TRP:HB3	17	5.79
(1,207)	1:10:A:PRO:HB2	1:12:A:ARG:HA	8	5.79
(1,207)	1:10:A:PRO:HB3	1:12:A:ARG:HA	8	5.79
(1,200)	1:5:A:LYS:HG2	1:6:A:TRP:HB3	17	5.79
(1,200)	1:5:A:LYS:HG3	1:6:A:TRP:HB3	17	5.79
(1,192)	1:3:A:PRO:HA	1:4:A:TRP:HB3	1	5.79
(1,178)	1:3:A:PRO:HA	1:4:A:TRP:HB3	1	5.79
(1,18)	1:7:A:LYS:H	1:8:A:TRP:HB3	3	5.79
(1,279)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HD2	16	5.78
(1,279)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HD3	16	5.78
(1,252)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:H	16	5.78
(1,231)	1:11:A:TRP:HB2	1:13:A:ARG:HG2	9	5.78
(1,231)	1:11:A:TRP:HB3	1:13:A:ARG:HG2	9	5.78
(1,77)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB2	3	5.78
(1,77)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB3	3	5.78
(1,71)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:H	16	5.78
(1,71)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:H	16	5.78
(1,67)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB2	3	5.78
(1,67)	1:9:A:THR:H	1:11:A:TRP:HB3	3	5.78
(1,37)	1:7:A:LYS:HE2	1:8:A:TRP:H	10	5.78
(1,37)	1:7:A:LYS:HE3	1:8:A:TRP:H	10	5.78
(1,260)	1:2:A:LEU:HB3	1:5:A:LYS:HA	14	5.77
(1,207)	1:10:A:PRO:HB2	1:12:A:ARG:HA	20	5.77
(1,207)	1:10:A:PRO:HB3	1:12:A:ARG:HA	20	5.77

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,189)	1:6:A:TRP:HB3	1:7:A:LYS:HA	12	5.77
(1,187)	1:4:A:TRP:HB3	1:6:A:TRP:H	20	5.77
(1,157)	1:7:A:LYS:HD2	1:8:A:TRP:HB2	15	5.77
(1,157)	1:7:A:LYS:HD3	1:8:A:TRP:HB2	15	5.77
(1,143)	1:1:A:ILE:HG21	1:12:A:ARG:HE	2	5.77
(1,143)	1:1:A:ILE:HG22	1:12:A:ARG:HE	2	5.77
(1,143)	1:1:A:ILE:HG23	1:12:A:ARG:HE	2	5.77
(1,139)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HE	6	5.77
(1,139)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HE	6	5.77
(1,120)	1:12:A:ARG:H	1:12:A:ARG:HE	13	5.77
(1,91)	1:4:A:TRP:HB3	1:6:A:TRP:H	20	5.77
(1,89)	1:3:A:PRO:HA	1:6:A:TRP:H	2	5.77
(1,83)	1:4:A:TRP:HB3	1:6:A:TRP:H	20	5.77
(1,37)	1:7:A:LYS:HE2	1:8:A:TRP:H	4	5.77
(1,37)	1:7:A:LYS:HE3	1:8:A:TRP:H	4	5.77
(1,37)	1:7:A:LYS:HE2	1:8:A:TRP:H	8	5.77
(1,37)	1:7:A:LYS:HE3	1:8:A:TRP:H	8	5.77
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD11	13	5.76
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD12	13	5.76
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD13	13	5.76
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD21	13	5.76
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD22	13	5.76
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD23	13	5.76
(1,313)	1:2:A:LEU:HD11	1:6:A:TRP:HB2	15	5.76
(1,313)	1:2:A:LEU:HD12	1:6:A:TRP:HB2	15	5.76
(1,313)	1:2:A:LEU:HD13	1:6:A:TRP:HB2	15	5.76
(1,313)	1:2:A:LEU:HD21	1:6:A:TRP:HB2	15	5.76
(1,313)	1:2:A:LEU:HD22	1:6:A:TRP:HB2	15	5.76
(1,313)	1:2:A:LEU:HD23	1:6:A:TRP:HB2	15	5.76
(1,233)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HB2	10	5.76
(1,233)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HB3	10	5.76
(1,215)	1:8:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB2	9	5.76
(1,215)	1:8:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB3	9	5.76
(1,192)	1:3:A:PRO:HA	1:4:A:TRP:HB3	6	5.76
(1,178)	1:3:A:PRO:HA	1:4:A:TRP:HB3	6	5.76
(1,42)	1:6:A:TRP:HB2	1:8:A:TRP:H	2	5.76
(1,298)	1:5:A:LYS:HG2	1:6:A:TRP:HB3	10	5.75
(1,298)	1:5:A:LYS:HG3	1:6:A:TRP:HB3	10	5.75
(1,287)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HG2	5	5.75
(1,287)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HG3	5	5.75
(1,243)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HB3	3	5.75
(1,243)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HB3	10	5.75

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,228)	1:2:A:LEU:HB2	1:4:A:TRP:HB2	13	5.75
(1,200)	1:5:A:LYS:HG2	1:6:A:TRP:HB3	10	5.75
(1,200)	1:5:A:LYS:HG3	1:6:A:TRP:HB3	10	5.75
(1,164)	1:3:A:PRO:HA	1:4:A:TRP:HB2	3	5.75
(1,163)	1:4:A:TRP:HB2	1:5:A:LYS:HA	13	5.75
(1,155)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HD2	8	5.75
(1,155)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HD3	8	5.75
(1,37)	1:7:A:LYS:HE2	1:8:A:TRP:H	7	5.75
(1,37)	1:7:A:LYS:HE3	1:8:A:TRP:H	7	5.75
(1,18)	1:7:A:LYS:H	1:8:A:TRP:HB3	16	5.75
(1,191)	1:7:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB3	2	5.74
(1,287)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HG2	12	5.73
(1,287)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HG3	12	5.73
(1,228)	1:2:A:LEU:HB2	1:4:A:TRP:HB2	11	5.73
(1,192)	1:3:A:PRO:HA	1:4:A:TRP:HB3	15	5.73
(1,185)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB3	7	5.73
(1,178)	1:3:A:PRO:HA	1:4:A:TRP:HB3	15	5.73
(1,125)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HA	8	5.73
(1,57)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB3	7	5.73
(1,54)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB2	1	5.73
(1,51)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB3	7	5.73
(1,49)	1:12:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HG3	7	5.73
(1,298)	1:5:A:LYS:HG2	1:6:A:TRP:HB3	12	5.72
(1,298)	1:5:A:LYS:HG3	1:6:A:TRP:HB3	12	5.72
(1,233)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HB2	8	5.72
(1,233)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HB3	8	5.72
(1,200)	1:5:A:LYS:HG2	1:6:A:TRP:HB3	12	5.72
(1,200)	1:5:A:LYS:HG3	1:6:A:TRP:HB3	12	5.72
(1,189)	1:6:A:TRP:HB3	1:7:A:LYS:HA	10	5.72
(1,167)	1:5:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB2	16	5.72
(1,14)	1:7:A:LYS:H	1:11:A:TRP:H	1	5.72
(1,296)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG2	13	5.71
(1,296)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG3	13	5.71
(1,282)	1:9:A:THR:HG21	1:11:A:TRP:H	12	5.71
(1,282)	1:9:A:THR:HG22	1:11:A:TRP:H	12	5.71
(1,282)	1:9:A:THR:HG23	1:11:A:TRP:H	12	5.71
(1,229)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HB2	5	5.71
(1,229)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HB3	5	5.71
(1,192)	1:3:A:PRO:HA	1:4:A:TRP:HB3	11	5.71
(1,191)	1:7:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB3	12	5.71
(1,181)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG2	13	5.71
(1,181)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG3	13	5.71

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,178)	1:3:A:PRO:HA	1:4:A:TRP:HB3	11	5.71
(1,140)	1:9:A:THR:HG21	1:11:A:TRP:H	12	5.71
(1,140)	1:9:A:THR:HG22	1:11:A:TRP:H	12	5.71
(1,140)	1:9:A:THR:HG23	1:11:A:TRP:H	12	5.71
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD11	17	5.7
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD12	17	5.7
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD13	17	5.7
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD21	17	5.7
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD22	17	5.7
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD23	17	5.7
(1,232)	1:2:A:LEU:HB2	1:6:A:TRP:H	6	5.7
(1,161)	1:7:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB2	8	5.7
(1,155)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HD2	16	5.7
(1,155)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HD3	16	5.7
(1,152)	1:10:A:PRO:HB2	1:12:A:ARG:HE	8	5.7
(1,152)	1:10:A:PRO:HB3	1:12:A:ARG:HE	8	5.7
(1,314)	1:2:A:LEU:HD11	1:4:A:TRP:HB2	6	5.69
(1,314)	1:2:A:LEU:HD12	1:4:A:TRP:HB2	6	5.69
(1,314)	1:2:A:LEU:HD13	1:4:A:TRP:HB2	6	5.69
(1,314)	1:2:A:LEU:HD21	1:4:A:TRP:HB2	6	5.69
(1,314)	1:2:A:LEU:HD22	1:4:A:TRP:HB2	6	5.69
(1,314)	1:2:A:LEU:HD23	1:4:A:TRP:HB2	6	5.69
(1,244)	1:7:A:LYS:HD2	1:10:A:PRO:HB2	4	5.69
(1,244)	1:7:A:LYS:HD2	1:10:A:PRO:HB3	4	5.69
(1,244)	1:7:A:LYS:HD3	1:10:A:PRO:HB2	4	5.69
(1,244)	1:7:A:LYS:HD3	1:10:A:PRO:HB3	4	5.69
(1,190)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HA	3	5.69
(1,177)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HA	3	5.69
(1,162)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HA	7	5.69
(1,78)	1:6:A:TRP:HB2	1:9:A:THR:H	13	5.69
(1,69)	1:6:A:TRP:HB2	1:9:A:THR:H	13	5.69
(1,39)	1:6:A:TRP:HB3	1:8:A:TRP:H	3	5.69
(1,39)	1:6:A:TRP:HB3	1:8:A:TRP:H	6	5.69
(1,147)	1:6:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	6	5.68
(1,304)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:H	7	5.67
(1,304)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:H	7	5.67
(1,304)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:H	7	5.67
(1,195)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE2	2	5.67
(1,195)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE3	2	5.67
(1,195)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE2	15	5.67
(1,195)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE3	15	5.67
(1,191)	1:7:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB3	10	5.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,162)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HA	6	5.67
(1,138)	1:11:A:TRP:H	1:13:A:ARG:HG3	7	5.67
(1,120)	1:12:A:ARG:H	1:12:A:ARG:HE	18	5.67
(1,298)	1:5:A:LYS:HG2	1:6:A:TRP:HB3	5	5.66
(1,298)	1:5:A:LYS:HG3	1:6:A:TRP:HB3	5	5.66
(1,279)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HD2	13	5.66
(1,279)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HD3	13	5.66
(1,269)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HB2	6	5.66
(1,269)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HB3	6	5.66
(1,261)	1:12:A:ARG:HA	1:13:A:ARG:HG3	11	5.66
(1,261)	1:12:A:ARG:HA	1:13:A:ARG:HG3	16	5.66
(1,206)	1:1:A:ILE:HB	1:3:A:PRO:HA	3	5.66
(1,200)	1:5:A:LYS:HG2	1:6:A:TRP:HB3	5	5.66
(1,200)	1:5:A:LYS:HG3	1:6:A:TRP:HB3	5	5.66
(1,103)	1:6:A:TRP:H	1:9:A:THR:HG21	11	5.66
(1,103)	1:6:A:TRP:H	1:9:A:THR:HG22	11	5.66
(1,103)	1:6:A:TRP:H	1:9:A:THR:HG23	11	5.66
(1,252)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:H	12	5.65
(1,247)	1:7:A:LYS:HD2	1:8:A:TRP:H	18	5.65
(1,247)	1:7:A:LYS:HD3	1:8:A:TRP:H	18	5.65
(1,243)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HB3	6	5.65
(1,163)	1:4:A:TRP:HB2	1:5:A:LYS:HA	18	5.65
(1,153)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:HB2	10	5.65
(1,47)	1:7:A:LYS:HD2	1:8:A:TRP:H	18	5.65
(1,47)	1:7:A:LYS:HD3	1:8:A:TRP:H	18	5.65
(1,11)	1:2:A:LEU:H	1:4:A:TRP:HB2	12	5.65
(1,296)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG2	10	5.64
(1,296)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG3	10	5.64
(1,254)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD2	16	5.64
(1,254)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD3	16	5.64
(1,192)	1:3:A:PRO:HA	1:4:A:TRP:HB3	16	5.64
(1,181)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG2	10	5.64
(1,181)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG3	10	5.64
(1,178)	1:3:A:PRO:HA	1:4:A:TRP:HB3	16	5.64
(1,164)	1:3:A:PRO:HA	1:4:A:TRP:HB2	19	5.64
(1,162)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HA	17	5.64
(1,296)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG2	12	5.63
(1,296)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG3	12	5.63
(1,228)	1:2:A:LEU:HB2	1:4:A:TRP:HB2	4	5.63
(1,181)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG2	12	5.63
(1,181)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG3	12	5.63
(1,164)	1:3:A:PRO:HA	1:4:A:TRP:HB2	10	5.63

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,120)	1:12:A:ARG:H	1:12:A:ARG:HE	2	5.63
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD11	15	5.62
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD12	15	5.62
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD13	15	5.62
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD21	15	5.62
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD22	15	5.62
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD23	15	5.62
(1,295)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD2	16	5.62
(1,295)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD3	16	5.62
(1,295)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD2	16	5.62
(1,295)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD3	16	5.62
(1,164)	1:3:A:PRO:HA	1:4:A:TRP:HB2	11	5.62
(1,110)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:HB2	17	5.62
(1,88)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HA	14	5.62
(1,54)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB2	17	5.62
(1,240)	1:1:A:ILE:HG21	1:2:A:LEU:HB2	10	5.61
(1,240)	1:1:A:ILE:HG22	1:2:A:LEU:HB2	10	5.61
(1,240)	1:1:A:ILE:HG23	1:2:A:LEU:HB2	10	5.61
(1,212)	1:10:A:PRO:HB2	1:11:A:TRP:HB2	13	5.61
(1,212)	1:10:A:PRO:HB2	1:11:A:TRP:HB3	13	5.61
(1,212)	1:10:A:PRO:HB3	1:11:A:TRP:HB2	13	5.61
(1,212)	1:10:A:PRO:HB3	1:11:A:TRP:HB3	13	5.61
(1,199)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:HG21	12	5.61
(1,199)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:HG22	12	5.61
(1,199)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:HG23	12	5.61
(1,199)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:HG21	12	5.61
(1,199)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:HG22	12	5.61
(1,199)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:HG23	12	5.61
(1,156)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HG2	11	5.61
(1,156)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HG2	11	5.61
(1,287)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HG2	10	5.6
(1,287)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HG3	10	5.6
(1,254)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD2	17	5.6
(1,254)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD3	17	5.6
(1,232)	1:2:A:LEU:HB2	1:6:A:TRP:H	17	5.6
(1,190)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HA	9	5.6
(1,177)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HA	9	5.6
(1,156)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HG2	20	5.6
(1,156)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HG2	20	5.6
(1,306)	1:2:A:LEU:HD11	1:5:A:LYS:HA	2	5.59
(1,306)	1:2:A:LEU:HD12	1:5:A:LYS:HA	2	5.59
(1,306)	1:2:A:LEU:HD13	1:5:A:LYS:HA	2	5.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,306)	1:2:A:LEU:HD21	1:5:A:LYS:HA	2	5.59
(1,306)	1:2:A:LEU:HD22	1:5:A:LYS:HA	2	5.59
(1,306)	1:2:A:LEU:HD23	1:5:A:LYS:HA	2	5.59
(1,125)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HA	7	5.59
(1,125)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HA	16	5.59
(1,296)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG2	1	5.58
(1,296)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG3	1	5.58
(1,296)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG2	18	5.58
(1,296)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG3	18	5.58
(1,269)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HB2	4	5.58
(1,269)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HB3	4	5.58
(1,233)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HB2	6	5.58
(1,233)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HB3	6	5.58
(1,233)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HB2	19	5.58
(1,233)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HB3	19	5.58
(1,212)	1:10:A:PRO:HB2	1:11:A:TRP:HB2	16	5.58
(1,212)	1:10:A:PRO:HB2	1:11:A:TRP:HB3	16	5.58
(1,212)	1:10:A:PRO:HB3	1:11:A:TRP:HB2	16	5.58
(1,212)	1:10:A:PRO:HB3	1:11:A:TRP:HB3	16	5.58
(1,187)	1:4:A:TRP:HB3	1:6:A:TRP:H	14	5.58
(1,181)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG2	1	5.58
(1,181)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG3	1	5.58
(1,181)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG2	18	5.58
(1,181)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG3	18	5.58
(1,91)	1:4:A:TRP:HB3	1:6:A:TRP:H	14	5.58
(1,83)	1:4:A:TRP:HB3	1:6:A:TRP:H	14	5.58
(1,18)	1:7:A:LYS:H	1:8:A:TRP:HB3	1	5.58
(1,282)	1:9:A:THR:HG21	1:11:A:TRP:H	2	5.57
(1,282)	1:9:A:THR:HG22	1:11:A:TRP:H	2	5.57
(1,282)	1:9:A:THR:HG23	1:11:A:TRP:H	2	5.57
(1,229)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HB2	7	5.57
(1,229)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HB3	7	5.57
(1,229)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HB2	18	5.57
(1,229)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HB3	18	5.57
(1,227)	1:7:A:LYS:HB2	1:8:A:TRP:HB2	11	5.57
(1,227)	1:7:A:LYS:HB3	1:8:A:TRP:HB2	11	5.57
(1,140)	1:9:A:THR:HG21	1:11:A:TRP:H	2	5.57
(1,140)	1:9:A:THR:HG22	1:11:A:TRP:H	2	5.57
(1,140)	1:9:A:THR:HG23	1:11:A:TRP:H	2	5.57
(1,39)	1:6:A:TRP:HB3	1:8:A:TRP:H	2	5.57
(1,172)	1:5:A:LYS:HE2	1:8:A:TRP:H	16	5.56
(1,172)	1:5:A:LYS:HE3	1:8:A:TRP:H	16	5.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,164)	1:3:A:PRO:HA	1:4:A:TRP:HB2	14	5.56
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD11	19	5.55
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD12	19	5.55
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD13	19	5.55
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD21	19	5.55
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD22	19	5.55
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD23	19	5.55
(1,281)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HE	11	5.55
(1,281)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HE	11	5.55
(1,233)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HB2	7	5.55
(1,233)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HB3	7	5.55
(1,228)	1:2:A:LEU:HB2	1:4:A:TRP:HB2	14	5.55
(1,164)	1:3:A:PRO:HA	1:4:A:TRP:HB2	20	5.55
(1,282)	1:9:A:THR:HG21	1:11:A:TRP:H	11	5.54
(1,282)	1:9:A:THR:HG22	1:11:A:TRP:H	11	5.54
(1,282)	1:9:A:THR:HG23	1:11:A:TRP:H	11	5.54
(1,229)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HB2	17	5.54
(1,229)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HB3	17	5.54
(1,163)	1:4:A:TRP:HB2	1:5:A:LYS:HA	14	5.54
(1,140)	1:9:A:THR:HG21	1:11:A:TRP:H	11	5.54
(1,140)	1:9:A:THR:HG22	1:11:A:TRP:H	11	5.54
(1,140)	1:9:A:THR:HG23	1:11:A:TRP:H	11	5.54
(1,118)	1:1:A:ILE:HG21	1:4:A:TRP:H	13	5.54
(1,118)	1:1:A:ILE:HG22	1:4:A:TRP:H	13	5.54
(1,118)	1:1:A:ILE:HG23	1:4:A:TRP:H	13	5.54
(1,14)	1:7:A:LYS:H	1:11:A:TRP:H	12	5.54
(1,298)	1:5:A:LYS:HG2	1:6:A:TRP:HB3	11	5.53
(1,298)	1:5:A:LYS:HG3	1:6:A:TRP:HB3	11	5.53
(1,261)	1:12:A:ARG:HA	1:13:A:ARG:HG3	12	5.53
(1,201)	1:5:A:LYS:HG2	1:7:A:LYS:HE2	12	5.53
(1,201)	1:5:A:LYS:HG2	1:7:A:LYS:HE3	12	5.53
(1,201)	1:5:A:LYS:HG3	1:7:A:LYS:HE2	12	5.53
(1,201)	1:5:A:LYS:HG3	1:7:A:LYS:HE3	12	5.53
(1,200)	1:5:A:LYS:HG2	1:6:A:TRP:HB3	11	5.53
(1,200)	1:5:A:LYS:HG3	1:6:A:TRP:HB3	11	5.53
(1,292)	1:5:A:LYS:HG2	1:7:A:LYS:HA	4	5.52
(1,292)	1:5:A:LYS:HG3	1:7:A:LYS:HA	4	5.52
(1,212)	1:10:A:PRO:HB2	1:11:A:TRP:HB2	12	5.52
(1,212)	1:10:A:PRO:HB2	1:11:A:TRP:HB3	12	5.52
(1,212)	1:10:A:PRO:HB3	1:11:A:TRP:HB2	12	5.52
(1,212)	1:10:A:PRO:HB3	1:11:A:TRP:HB3	12	5.52
(1,193)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE2	16	5.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,193)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE3	16	5.52
(1,28)	1:13:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD2	13	5.52
(1,28)	1:13:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD3	13	5.52
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD11	16	5.51
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD12	16	5.51
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD13	16	5.51
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD21	16	5.51
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD22	16	5.51
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD23	16	5.51
(1,282)	1:9:A:THR:HG21	1:11:A:TRP:H	14	5.51
(1,282)	1:9:A:THR:HG22	1:11:A:TRP:H	14	5.51
(1,282)	1:9:A:THR:HG23	1:11:A:TRP:H	14	5.51
(1,187)	1:4:A:TRP:HB3	1:6:A:TRP:H	19	5.51
(1,163)	1:4:A:TRP:HB2	1:5:A:LYS:HA	10	5.51
(1,140)	1:9:A:THR:HG21	1:11:A:TRP:H	14	5.51
(1,140)	1:9:A:THR:HG22	1:11:A:TRP:H	14	5.51
(1,140)	1:9:A:THR:HG23	1:11:A:TRP:H	14	5.51
(1,118)	1:1:A:ILE:HG21	1:4:A:TRP:H	17	5.51
(1,118)	1:1:A:ILE:HG22	1:4:A:TRP:H	17	5.51
(1,118)	1:1:A:ILE:HG23	1:4:A:TRP:H	17	5.51
(1,91)	1:4:A:TRP:HB3	1:6:A:TRP:H	19	5.51
(1,83)	1:4:A:TRP:HB3	1:6:A:TRP:H	19	5.51
(1,237)	1:7:A:LYS:HB2	1:10:A:PRO:HB2	15	5.5
(1,237)	1:7:A:LYS:HB2	1:10:A:PRO:HB3	15	5.5
(1,237)	1:7:A:LYS:HB3	1:10:A:PRO:HB2	15	5.5
(1,237)	1:7:A:LYS:HB3	1:10:A:PRO:HB3	15	5.5
(1,212)	1:10:A:PRO:HB2	1:11:A:TRP:HB2	8	5.5
(1,212)	1:10:A:PRO:HB2	1:11:A:TRP:HB3	8	5.5
(1,212)	1:10:A:PRO:HB3	1:11:A:TRP:HB2	8	5.5
(1,212)	1:10:A:PRO:HB3	1:11:A:TRP:HB3	8	5.5
(1,156)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HG2	1	5.5
(1,156)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HG2	1	5.5
(1,18)	1:7:A:LYS:H	1:8:A:TRP:HB3	18	5.5
(1,189)	1:6:A:TRP:HB3	1:7:A:LYS:HA	15	5.49
(1,125)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HA	15	5.49
(1,118)	1:1:A:ILE:HG21	1:4:A:TRP:H	10	5.49
(1,118)	1:1:A:ILE:HG22	1:4:A:TRP:H	10	5.49
(1,118)	1:1:A:ILE:HG23	1:4:A:TRP:H	10	5.49
(1,37)	1:7:A:LYS:HE2	1:8:A:TRP:H	15	5.49
(1,37)	1:7:A:LYS:HE3	1:8:A:TRP:H	15	5.49
(1,252)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:H	5	5.48
(1,252)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:H	18	5.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,211)	1:1:A:ILE:HB	1:6:A:TRP:HB2	7	5.48
(1,49)	1:12:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HG3	18	5.48
(1,296)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG2	19	5.47
(1,296)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG3	19	5.47
(1,181)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG2	19	5.47
(1,181)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG3	19	5.47
(1,118)	1:1:A:ILE:HG21	1:4:A:TRP:H	14	5.47
(1,118)	1:1:A:ILE:HG22	1:4:A:TRP:H	14	5.47
(1,118)	1:1:A:ILE:HG23	1:4:A:TRP:H	14	5.47
(1,42)	1:6:A:TRP:HB2	1:8:A:TRP:H	12	5.47
(1,42)	1:6:A:TRP:HB2	1:8:A:TRP:H	15	5.47
(1,210)	1:7:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB2	3	5.46
(1,210)	1:7:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB3	3	5.46
(1,115)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD2	1	5.46
(1,115)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD3	1	5.46
(1,247)	1:7:A:LYS:HD2	1:8:A:TRP:H	10	5.45
(1,247)	1:7:A:LYS:HD3	1:8:A:TRP:H	10	5.45
(1,228)	1:2:A:LEU:HB2	1:4:A:TRP:HB2	17	5.45
(1,162)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HA	4	5.45
(1,160)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HA	10	5.45
(1,160)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HA	10	5.45
(1,47)	1:7:A:LYS:HD2	1:8:A:TRP:H	10	5.45
(1,47)	1:7:A:LYS:HD3	1:8:A:TRP:H	10	5.45
(1,37)	1:7:A:LYS:HE2	1:8:A:TRP:H	11	5.45
(1,37)	1:7:A:LYS:HE3	1:8:A:TRP:H	11	5.45
(1,215)	1:8:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB2	20	5.44
(1,215)	1:8:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB3	20	5.44
(1,162)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HA	20	5.44
(1,154)	1:2:A:LEU:HB3	1:4:A:TRP:HB2	11	5.44
(1,137)	1:12:A:ARG:HE	1:13:A:ARG:HG3	14	5.44
(1,262)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD2	15	5.43
(1,262)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD3	15	5.43
(1,37)	1:7:A:LYS:HE2	1:8:A:TRP:H	13	5.43
(1,37)	1:7:A:LYS:HE3	1:8:A:TRP:H	13	5.43
(1,269)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HB2	11	5.42
(1,269)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HB3	11	5.42
(1,247)	1:7:A:LYS:HD2	1:8:A:TRP:H	12	5.42
(1,247)	1:7:A:LYS:HD3	1:8:A:TRP:H	12	5.42
(1,245)	1:10:A:PRO:HB2	1:12:A:ARG:HG2	9	5.42
(1,245)	1:10:A:PRO:HB3	1:12:A:ARG:HG2	9	5.42
(1,229)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HB2	20	5.42
(1,229)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HB3	20	5.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,163)	1:4:A:TRP:HB2	1:5:A:LYS:HA	8	5.42
(1,88)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HA	19	5.42
(1,47)	1:7:A:LYS:HD2	1:8:A:TRP:H	12	5.42
(1,47)	1:7:A:LYS:HD3	1:8:A:TRP:H	12	5.42
(1,231)	1:11:A:TRP:HB2	1:13:A:ARG:HG2	6	5.41
(1,231)	1:11:A:TRP:HB3	1:13:A:ARG:HG2	6	5.41
(1,88)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HA	11	5.41
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD11	2	5.4
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD12	2	5.4
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD13	2	5.4
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD21	2	5.4
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD22	2	5.4
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD23	2	5.4
(1,261)	1:12:A:ARG:HA	1:13:A:ARG:HG3	10	5.4
(1,199)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:HG21	2	5.4
(1,199)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:HG22	2	5.4
(1,199)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:HG23	2	5.4
(1,199)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:HG21	2	5.4
(1,199)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:HG22	2	5.4
(1,199)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:HG23	2	5.4
(1,118)	1:1:A:ILE:HG21	1:4:A:TRP:H	12	5.4
(1,118)	1:1:A:ILE:HG22	1:4:A:TRP:H	12	5.4
(1,118)	1:1:A:ILE:HG23	1:4:A:TRP:H	12	5.4
(1,88)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HA	12	5.4
(1,52)	1:5:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HE2	10	5.4
(1,52)	1:5:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HE3	10	5.4
(1,32)	1:12:A:ARG:HG2	1:13:A:ARG:H	15	5.4
(1,88)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HA	10	5.39
(1,68)	1:11:A:TRP:HB2	1:13:A:ARG:HE	17	5.39
(1,68)	1:11:A:TRP:HB3	1:13:A:ARG:HE	17	5.39
(1,212)	1:10:A:PRO:HB2	1:11:A:TRP:HB2	15	5.38
(1,212)	1:10:A:PRO:HB2	1:11:A:TRP:HB3	15	5.38
(1,212)	1:10:A:PRO:HB3	1:11:A:TRP:HB2	15	5.38
(1,212)	1:10:A:PRO:HB3	1:11:A:TRP:HB3	15	5.38
(1,190)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HA	7	5.38
(1,177)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HA	7	5.38
(1,163)	1:4:A:TRP:HB2	1:5:A:LYS:HA	16	5.38
(1,157)	1:7:A:LYS:HD2	1:8:A:TRP:HB2	7	5.38
(1,157)	1:7:A:LYS:HD3	1:8:A:TRP:HB2	7	5.38
(1,155)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HD2	15	5.38
(1,155)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HD3	15	5.38
(1,125)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HA	12	5.38

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,68)	1:11:A:TRP:HB2	1:13:A:ARG:HE	20	5.38
(1,68)	1:11:A:TRP:HB3	1:13:A:ARG:HE	20	5.38
(1,282)	1:9:A:THR:HG21	1:11:A:TRP:H	7	5.37
(1,282)	1:9:A:THR:HG22	1:11:A:TRP:H	7	5.37
(1,282)	1:9:A:THR:HG23	1:11:A:TRP:H	7	5.37
(1,214)	1:6:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB2	10	5.37
(1,214)	1:6:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB3	10	5.37
(1,140)	1:9:A:THR:HG21	1:11:A:TRP:H	7	5.37
(1,140)	1:9:A:THR:HG22	1:11:A:TRP:H	7	5.37
(1,140)	1:9:A:THR:HG23	1:11:A:TRP:H	7	5.37
(1,261)	1:12:A:ARG:HA	1:13:A:ARG:HG3	9	5.36
(1,258)	1:2:A:LEU:HB3	1:3:A:PRO:HA	13	5.36
(1,240)	1:1:A:ILE:HG21	1:2:A:LEU:HB2	14	5.36
(1,240)	1:1:A:ILE:HG22	1:2:A:LEU:HB2	14	5.36
(1,240)	1:1:A:ILE:HG23	1:2:A:LEU:HB2	14	5.36
(1,207)	1:10:A:PRO:HB2	1:12:A:ARG:HA	12	5.36
(1,207)	1:10:A:PRO:HB3	1:12:A:ARG:HA	12	5.36
(1,18)	1:7:A:LYS:H	1:8:A:TRP:HB3	13	5.36
(1,212)	1:10:A:PRO:HB2	1:11:A:TRP:HB2	3	5.35
(1,212)	1:10:A:PRO:HB2	1:11:A:TRP:HB3	3	5.35
(1,212)	1:10:A:PRO:HB3	1:11:A:TRP:HB2	3	5.35
(1,212)	1:10:A:PRO:HB3	1:11:A:TRP:HB3	3	5.35
(1,212)	1:10:A:PRO:HB2	1:11:A:TRP:HB2	19	5.35
(1,212)	1:10:A:PRO:HB2	1:11:A:TRP:HB3	19	5.35
(1,212)	1:10:A:PRO:HB3	1:11:A:TRP:HB2	19	5.35
(1,212)	1:10:A:PRO:HB3	1:11:A:TRP:HB3	19	5.35
(1,206)	1:1:A:ILE:HB	1:3:A:PRO:HA	5	5.35
(1,195)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE2	16	5.35
(1,195)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE3	16	5.35
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD11	3	5.34
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD12	3	5.34
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD13	3	5.34
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD21	3	5.34
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD22	3	5.34
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD23	3	5.34
(1,258)	1:2:A:LEU:HB3	1:3:A:PRO:HA	17	5.34
(1,258)	1:2:A:LEU:HB3	1:3:A:PRO:HA	19	5.34
(1,254)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD2	20	5.34
(1,254)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD3	20	5.34
(1,227)	1:7:A:LYS:HB2	1:8:A:TRP:HB2	9	5.34
(1,227)	1:7:A:LYS:HB3	1:8:A:TRP:HB2	9	5.34
(1,210)	1:7:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB2	19	5.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,210)	1:7:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB3	19	5.34
(1,163)	1:4:A:TRP:HB2	1:5:A:LYS:HA	12	5.34
(1,156)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HG2	18	5.34
(1,156)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HG2	18	5.34
(1,88)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HA	13	5.34
(1,32)	1:12:A:ARG:HG2	1:13:A:ARG:H	11	5.34
(1,247)	1:7:A:LYS:HD2	1:8:A:TRP:H	15	5.33
(1,247)	1:7:A:LYS:HD3	1:8:A:TRP:H	15	5.33
(1,201)	1:5:A:LYS:HG2	1:7:A:LYS:HE2	15	5.33
(1,201)	1:5:A:LYS:HG2	1:7:A:LYS:HE3	15	5.33
(1,201)	1:5:A:LYS:HG3	1:7:A:LYS:HE2	15	5.33
(1,201)	1:5:A:LYS:HG3	1:7:A:LYS:HE3	15	5.33
(1,193)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE2	4	5.33
(1,193)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE3	4	5.33
(1,120)	1:12:A:ARG:H	1:12:A:ARG:HE	12	5.33
(1,80)	1:4:A:TRP:HB2	1:6:A:TRP:H	17	5.33
(1,47)	1:7:A:LYS:HD2	1:8:A:TRP:H	15	5.33
(1,47)	1:7:A:LYS:HD3	1:8:A:TRP:H	15	5.33
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD11	8	5.32
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD12	8	5.32
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD13	8	5.32
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD21	8	5.32
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD22	8	5.32
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD23	8	5.32
(1,258)	1:2:A:LEU:HB3	1:3:A:PRO:HA	8	5.32
(1,247)	1:7:A:LYS:HD2	1:8:A:TRP:H	7	5.32
(1,247)	1:7:A:LYS:HD3	1:8:A:TRP:H	7	5.32
(1,185)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB3	1	5.32
(1,57)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB3	1	5.32
(1,51)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB3	1	5.32
(1,47)	1:7:A:LYS:HD2	1:8:A:TRP:H	7	5.32
(1,47)	1:7:A:LYS:HD3	1:8:A:TRP:H	7	5.32
(1,227)	1:7:A:LYS:HB2	1:8:A:TRP:HB2	14	5.31
(1,227)	1:7:A:LYS:HB3	1:8:A:TRP:HB2	14	5.31
(1,212)	1:10:A:PRO:HB2	1:11:A:TRP:HB2	5	5.31
(1,212)	1:10:A:PRO:HB2	1:11:A:TRP:HB3	5	5.31
(1,212)	1:10:A:PRO:HB3	1:11:A:TRP:HB2	5	5.31
(1,212)	1:10:A:PRO:HB3	1:11:A:TRP:HB3	5	5.31
(1,42)	1:6:A:TRP:HB2	1:8:A:TRP:H	14	5.31
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD11	17	5.3
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD12	17	5.3
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD13	17	5.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD21	17	5.3
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD22	17	5.3
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD23	17	5.3
(1,269)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HB2	12	5.3
(1,269)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HB3	12	5.3
(1,258)	1:2:A:LEU:HB3	1:3:A:PRO:HA	11	5.3
(1,227)	1:7:A:LYS:HB2	1:8:A:TRP:HB2	12	5.3
(1,227)	1:7:A:LYS:HB3	1:8:A:TRP:HB2	12	5.3
(1,160)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HA	3	5.3
(1,160)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HA	3	5.3
(1,14)	1:7:A:LYS:H	1:11:A:TRP:H	19	5.3
(1,296)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG2	16	5.29
(1,296)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG3	16	5.29
(1,262)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD2	2	5.29
(1,262)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD3	2	5.29
(1,258)	1:2:A:LEU:HB3	1:3:A:PRO:HA	15	5.29
(1,229)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HB2	2	5.29
(1,229)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HB3	2	5.29
(1,181)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG2	16	5.29
(1,181)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG3	16	5.29
(1,120)	1:12:A:ARG:H	1:12:A:ARG:HE	5	5.29
(1,88)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HA	16	5.29
(1,88)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HA	17	5.29
(1,68)	1:11:A:TRP:HB2	1:13:A:ARG:HE	12	5.29
(1,68)	1:11:A:TRP:HB3	1:13:A:ARG:HE	12	5.29
(1,32)	1:12:A:ARG:HG2	1:13:A:ARG:H	17	5.29
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD11	13	5.28
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD12	13	5.28
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD13	13	5.28
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD21	13	5.28
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD22	13	5.28
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD23	13	5.28
(1,258)	1:2:A:LEU:HB3	1:3:A:PRO:HA	2	5.28
(1,247)	1:7:A:LYS:HD2	1:8:A:TRP:H	6	5.28
(1,247)	1:7:A:LYS:HD3	1:8:A:TRP:H	6	5.28
(1,243)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HB3	15	5.28
(1,231)	1:11:A:TRP:HB2	1:13:A:ARG:HG2	16	5.28
(1,231)	1:11:A:TRP:HB3	1:13:A:ARG:HG2	16	5.28
(1,227)	1:7:A:LYS:HB2	1:8:A:TRP:HB2	8	5.28
(1,227)	1:7:A:LYS:HB3	1:8:A:TRP:HB2	8	5.28
(1,120)	1:12:A:ARG:H	1:12:A:ARG:HE	11	5.28
(1,80)	1:4:A:TRP:HB2	1:6:A:TRP:H	1	5.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,47)	1:7:A:LYS:HD2	1:8:A:TRP:H	6	5.28
(1,47)	1:7:A:LYS:HD3	1:8:A:TRP:H	6	5.28
(1,32)	1:12:A:ARG:HG2	1:13:A:ARG:H	20	5.28
(1,291)	1:7:A:LYS:HA	1:9:A:THR:HG21	20	5.27
(1,291)	1:7:A:LYS:HA	1:9:A:THR:HG22	20	5.27
(1,291)	1:7:A:LYS:HA	1:9:A:THR:HG23	20	5.27
(1,258)	1:2:A:LEU:HB3	1:3:A:PRO:HA	4	5.27
(1,254)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD2	1	5.27
(1,254)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD3	1	5.27
(1,240)	1:1:A:ILE:HG21	1:2:A:LEU:HB2	16	5.27
(1,240)	1:1:A:ILE:HG22	1:2:A:LEU:HB2	16	5.27
(1,240)	1:1:A:ILE:HG23	1:2:A:LEU:HB2	16	5.27
(1,157)	1:7:A:LYS:HD2	1:8:A:TRP:HB2	18	5.27
(1,157)	1:7:A:LYS:HD3	1:8:A:TRP:HB2	18	5.27
(1,156)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HG2	16	5.27
(1,156)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HG2	16	5.27
(1,118)	1:1:A:ILE:HG21	1:4:A:TRP:H	18	5.27
(1,118)	1:1:A:ILE:HG22	1:4:A:TRP:H	18	5.27
(1,118)	1:1:A:ILE:HG23	1:4:A:TRP:H	18	5.27
(1,280)	1:5:A:LYS:HD2	1:7:A:LYS:HA	19	5.26
(1,280)	1:5:A:LYS:HD3	1:7:A:LYS:HA	19	5.26
(1,163)	1:4:A:TRP:HB2	1:5:A:LYS:HA	1	5.26
(1,145)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	20	5.26
(1,145)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HE	20	5.26
(1,125)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HA	2	5.26
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD11	11	5.25
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD12	11	5.25
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD13	11	5.25
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD21	11	5.25
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD22	11	5.25
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD23	11	5.25
(1,228)	1:2:A:LEU:HB2	1:4:A:TRP:HB2	20	5.25
(1,190)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HA	15	5.25
(1,177)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HA	15	5.25
(1,156)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HG2	7	5.25
(1,156)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HG2	7	5.25
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD11	15	5.24
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD12	15	5.24
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD13	15	5.24
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD21	15	5.24
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD22	15	5.24
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD23	15	5.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD11	20	5.24
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD12	20	5.24
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD13	20	5.24
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD21	20	5.24
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD22	20	5.24
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD23	20	5.24
(1,291)	1:7:A:LYS:HA	1:9:A:THR:HG21	11	5.24
(1,291)	1:7:A:LYS:HA	1:9:A:THR:HG22	11	5.24
(1,291)	1:7:A:LYS:HA	1:9:A:THR:HG23	11	5.24
(1,258)	1:2:A:LEU:HB3	1:3:A:PRO:HA	20	5.24
(1,254)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD2	12	5.24
(1,254)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD3	12	5.24
(1,226)	1:2:A:LEU:HB2	1:6:A:TRP:HB2	14	5.24
(1,180)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD2	16	5.24
(1,180)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD3	16	5.24
(1,180)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD2	16	5.24
(1,180)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD3	16	5.24
(1,163)	1:4:A:TRP:HB2	1:5:A:LYS:HA	20	5.24
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD11	4	5.23
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD12	4	5.23
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD13	4	5.23
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD21	4	5.23
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD22	4	5.23
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD23	4	5.23
(1,302)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:HB2	8	5.23
(1,302)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:HB2	8	5.23
(1,302)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:HB2	8	5.23
(1,258)	1:2:A:LEU:HB3	1:3:A:PRO:HA	18	5.23
(1,240)	1:1:A:ILE:HG21	1:2:A:LEU:HB2	19	5.23
(1,240)	1:1:A:ILE:HG22	1:2:A:LEU:HB2	19	5.23
(1,240)	1:1:A:ILE:HG23	1:2:A:LEU:HB2	19	5.23
(1,135)	1:5:A:LYS:HB2	1:12:A:ARG:HE	17	5.23
(1,135)	1:5:A:LYS:HB3	1:12:A:ARG:HE	17	5.23
(1,52)	1:5:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HE2	12	5.23
(1,52)	1:5:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HE3	12	5.23
(1,28)	1:13:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD2	18	5.23
(1,28)	1:13:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD3	18	5.23
(1,304)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:H	12	5.22
(1,304)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:H	12	5.22
(1,304)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:H	12	5.22
(1,258)	1:2:A:LEU:HB3	1:3:A:PRO:HA	16	5.22
(1,207)	1:10:A:PRO:HB2	1:12:A:ARG:HA	7	5.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,207)	1:10:A:PRO:HB3	1:12:A:ARG:HA	7	5.22
(1,155)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HD2	20	5.22
(1,155)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HD3	20	5.22
(1,304)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:H	13	5.21
(1,304)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:H	13	5.21
(1,304)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:H	13	5.21
(1,304)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:H	14	5.21
(1,304)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:H	14	5.21
(1,304)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:H	14	5.21
(1,231)	1:11:A:TRP:HB2	1:13:A:ARG:HG2	19	5.21
(1,231)	1:11:A:TRP:HB3	1:13:A:ARG:HG2	19	5.21
(1,229)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HB2	10	5.21
(1,229)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HB3	10	5.21
(1,229)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HB2	14	5.21
(1,229)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HB3	14	5.21
(1,80)	1:4:A:TRP:HB2	1:6:A:TRP:H	16	5.21
(1,304)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:H	4	5.2
(1,304)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:H	4	5.2
(1,304)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:H	4	5.2
(1,212)	1:10:A:PRO:HB2	1:11:A:TRP:HB2	9	5.2
(1,212)	1:10:A:PRO:HB2	1:11:A:TRP:HB3	9	5.2
(1,212)	1:10:A:PRO:HB3	1:11:A:TRP:HB2	9	5.2
(1,212)	1:10:A:PRO:HB3	1:11:A:TRP:HB3	9	5.2
(1,164)	1:3:A:PRO:HA	1:4:A:TRP:HB2	7	5.2
(1,162)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HA	16	5.2
(1,103)	1:6:A:TRP:H	1:9:A:THR:HG21	7	5.2
(1,103)	1:6:A:TRP:H	1:9:A:THR:HG22	7	5.2
(1,103)	1:6:A:TRP:H	1:9:A:THR:HG23	7	5.2
(1,292)	1:5:A:LYS:HG2	1:7:A:LYS:HA	17	5.19
(1,292)	1:5:A:LYS:HG3	1:7:A:LYS:HA	17	5.19
(1,258)	1:2:A:LEU:HB3	1:3:A:PRO:HA	3	5.19
(1,42)	1:6:A:TRP:HB2	1:8:A:TRP:H	1	5.19
(1,229)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HB2	3	5.18
(1,229)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HB3	3	5.18
(1,229)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HB2	15	5.18
(1,229)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HB3	15	5.18
(1,191)	1:7:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB3	18	5.18
(1,189)	1:6:A:TRP:HB3	1:7:A:LYS:HA	4	5.18
(1,187)	1:4:A:TRP:HB3	1:6:A:TRP:H	9	5.18
(1,94)	1:6:A:TRP:H	1:10:A:PRO:HB2	15	5.18
(1,94)	1:6:A:TRP:H	1:10:A:PRO:HB3	15	5.18
(1,91)	1:4:A:TRP:HB3	1:6:A:TRP:H	9	5.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,88)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HA	20	5.18
(1,83)	1:4:A:TRP:HB3	1:6:A:TRP:H	9	5.18
(1,37)	1:7:A:LYS:HE2	1:8:A:TRP:H	3	5.18
(1,37)	1:7:A:LYS:HE3	1:8:A:TRP:H	3	5.18
(1,314)	1:2:A:LEU:HD11	1:4:A:TRP:HB2	3	5.17
(1,314)	1:2:A:LEU:HD12	1:4:A:TRP:HB2	3	5.17
(1,314)	1:2:A:LEU:HD13	1:4:A:TRP:HB2	3	5.17
(1,314)	1:2:A:LEU:HD21	1:4:A:TRP:HB2	3	5.17
(1,314)	1:2:A:LEU:HD22	1:4:A:TRP:HB2	3	5.17
(1,314)	1:2:A:LEU:HD23	1:4:A:TRP:HB2	3	5.17
(1,247)	1:7:A:LYS:HD2	1:8:A:TRP:H	14	5.17
(1,247)	1:7:A:LYS:HD3	1:8:A:TRP:H	14	5.17
(1,191)	1:7:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB3	6	5.17
(1,189)	1:6:A:TRP:HB3	1:7:A:LYS:HA	1	5.17
(1,125)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HA	14	5.17
(1,47)	1:7:A:LYS:HD2	1:8:A:TRP:H	14	5.17
(1,47)	1:7:A:LYS:HD3	1:8:A:TRP:H	14	5.17
(1,92)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE2	15	5.16
(1,92)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE3	15	5.16
(1,279)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HD2	19	5.15
(1,279)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HD3	19	5.15
(1,233)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HB2	4	5.15
(1,233)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HB3	4	5.15
(1,125)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HA	5	5.15
(1,88)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HA	18	5.15
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD11	18	5.14
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD12	18	5.14
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD13	18	5.14
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD21	18	5.14
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD22	18	5.14
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD23	18	5.14
(1,296)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG2	20	5.14
(1,296)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG3	20	5.14
(1,282)	1:9:A:THR:HG21	1:11:A:TRP:H	5	5.14
(1,282)	1:9:A:THR:HG22	1:11:A:TRP:H	5	5.14
(1,282)	1:9:A:THR:HG23	1:11:A:TRP:H	5	5.14
(1,274)	1:5:A:LYS:HB2	1:12:A:ARG:HE	15	5.14
(1,274)	1:5:A:LYS:HB3	1:12:A:ARG:HE	15	5.14
(1,192)	1:3:A:PRO:HA	1:4:A:TRP:HB3	18	5.14
(1,191)	1:7:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB3	15	5.14
(1,189)	1:6:A:TRP:HB3	1:7:A:LYS:HA	3	5.14
(1,181)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG2	20	5.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,181)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG3	20	5.14
(1,178)	1:3:A:PRO:HA	1:4:A:TRP:HB3	18	5.14
(1,140)	1:9:A:THR:HG21	1:11:A:TRP:H	5	5.14
(1,140)	1:9:A:THR:HG22	1:11:A:TRP:H	5	5.14
(1,140)	1:9:A:THR:HG23	1:11:A:TRP:H	5	5.14
(1,49)	1:12:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HG3	19	5.14
(1,226)	1:2:A:LEU:HB2	1:6:A:TRP:HB2	9	5.13
(1,153)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:HB2	17	5.13
(1,32)	1:12:A:ARG:HG2	1:13:A:ARG:H	7	5.13
(1,32)	1:12:A:ARG:HG2	1:13:A:ARG:H	12	5.13
(1,32)	1:12:A:ARG:HG2	1:13:A:ARG:H	13	5.13
(1,304)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:H	11	5.12
(1,304)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:H	11	5.12
(1,304)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:H	11	5.12
(1,258)	1:2:A:LEU:HB3	1:3:A:PRO:HA	1	5.12
(1,258)	1:2:A:LEU:HB3	1:3:A:PRO:HA	12	5.12
(1,282)	1:9:A:THR:HG21	1:11:A:TRP:H	18	5.11
(1,282)	1:9:A:THR:HG22	1:11:A:TRP:H	18	5.11
(1,282)	1:9:A:THR:HG23	1:11:A:TRP:H	18	5.11
(1,282)	1:9:A:THR:HG21	1:11:A:TRP:H	20	5.11
(1,282)	1:9:A:THR:HG22	1:11:A:TRP:H	20	5.11
(1,282)	1:9:A:THR:HG23	1:11:A:TRP:H	20	5.11
(1,162)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HA	11	5.11
(1,162)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HA	18	5.11
(1,140)	1:9:A:THR:HG21	1:11:A:TRP:H	18	5.11
(1,140)	1:9:A:THR:HG22	1:11:A:TRP:H	18	5.11
(1,140)	1:9:A:THR:HG23	1:11:A:TRP:H	18	5.11
(1,140)	1:9:A:THR:HG21	1:11:A:TRP:H	20	5.11
(1,140)	1:9:A:THR:HG22	1:11:A:TRP:H	20	5.11
(1,140)	1:9:A:THR:HG23	1:11:A:TRP:H	20	5.11
(1,80)	1:4:A:TRP:HB2	1:6:A:TRP:H	7	5.11
(1,313)	1:2:A:LEU:HD11	1:6:A:TRP:HB2	6	5.1
(1,313)	1:2:A:LEU:HD12	1:6:A:TRP:HB2	6	5.1
(1,313)	1:2:A:LEU:HD13	1:6:A:TRP:HB2	6	5.1
(1,313)	1:2:A:LEU:HD21	1:6:A:TRP:HB2	6	5.1
(1,313)	1:2:A:LEU:HD22	1:6:A:TRP:HB2	6	5.1
(1,313)	1:2:A:LEU:HD23	1:6:A:TRP:HB2	6	5.1
(1,313)	1:2:A:LEU:HD11	1:6:A:TRP:HB2	18	5.1
(1,313)	1:2:A:LEU:HD12	1:6:A:TRP:HB2	18	5.1
(1,313)	1:2:A:LEU:HD13	1:6:A:TRP:HB2	18	5.1
(1,313)	1:2:A:LEU:HD21	1:6:A:TRP:HB2	18	5.1
(1,313)	1:2:A:LEU:HD22	1:6:A:TRP:HB2	18	5.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,313)	1:2:A:LEU:HD23	1:6:A:TRP:HB2	18	5.1
(1,240)	1:1:A:ILE:HG21	1:2:A:LEU:HB2	20	5.1
(1,240)	1:1:A:ILE:HG22	1:2:A:LEU:HB2	20	5.1
(1,240)	1:1:A:ILE:HG23	1:2:A:LEU:HB2	20	5.1
(1,120)	1:12:A:ARG:H	1:12:A:ARG:HE	16	5.1
(1,37)	1:7:A:LYS:HE2	1:8:A:TRP:H	9	5.1
(1,37)	1:7:A:LYS:HE3	1:8:A:TRP:H	9	5.1
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD11	1	5.09
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD12	1	5.09
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD13	1	5.09
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD21	1	5.09
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD22	1	5.09
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD23	1	5.09
(1,296)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG2	11	5.09
(1,296)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG3	11	5.09
(1,295)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD2	18	5.09
(1,295)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD3	18	5.09
(1,295)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD2	18	5.09
(1,295)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD3	18	5.09
(1,192)	1:3:A:PRO:HA	1:4:A:TRP:HB3	4	5.09
(1,192)	1:3:A:PRO:HA	1:4:A:TRP:HB3	17	5.09
(1,181)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG2	11	5.09
(1,181)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG3	11	5.09
(1,178)	1:3:A:PRO:HA	1:4:A:TRP:HB3	4	5.09
(1,178)	1:3:A:PRO:HA	1:4:A:TRP:HB3	17	5.09
(1,32)	1:12:A:ARG:HG2	1:13:A:ARG:H	4	5.09
(1,292)	1:5:A:LYS:HG2	1:7:A:LYS:HA	3	5.08
(1,292)	1:5:A:LYS:HG3	1:7:A:LYS:HA	3	5.08
(1,227)	1:7:A:LYS:HB2	1:8:A:TRP:HB2	16	5.08
(1,227)	1:7:A:LYS:HB3	1:8:A:TRP:HB2	16	5.08
(1,179)	1:3:A:PRO:HA	1:12:A:ARG:HD2	11	5.08
(1,179)	1:3:A:PRO:HA	1:12:A:ARG:HD3	11	5.08
(1,37)	1:7:A:LYS:HE2	1:8:A:TRP:H	5	5.08
(1,37)	1:7:A:LYS:HE3	1:8:A:TRP:H	5	5.08
(1,32)	1:12:A:ARG:HG2	1:13:A:ARG:H	9	5.08
(1,229)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HB2	13	5.07
(1,229)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HB3	13	5.07
(1,120)	1:12:A:ARG:H	1:12:A:ARG:HE	7	5.07
(1,296)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG2	8	5.06
(1,296)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG3	8	5.06
(1,281)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HE	6	5.06
(1,281)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HE	6	5.06

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,269)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HB2	3	5.06
(1,269)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HB3	3	5.06
(1,190)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HA	11	5.06
(1,181)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG2	8	5.06
(1,181)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG3	8	5.06
(1,177)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HA	11	5.06
(1,295)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD2	6	5.05
(1,295)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD3	6	5.05
(1,295)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD2	6	5.05
(1,295)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD3	6	5.05
(1,237)	1:7:A:LYS:HB2	1:10:A:PRO:HB2	10	5.05
(1,237)	1:7:A:LYS:HB2	1:10:A:PRO:HB3	10	5.05
(1,237)	1:7:A:LYS:HB3	1:10:A:PRO:HB2	10	5.05
(1,237)	1:7:A:LYS:HB3	1:10:A:PRO:HB3	10	5.05
(1,191)	1:7:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB3	7	5.05
(1,190)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HA	17	5.05
(1,177)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HA	17	5.05
(1,95)	1:2:A:LEU:HB2	1:6:A:TRP:H	19	5.05
(1,189)	1:6:A:TRP:HB3	1:7:A:LYS:HA	7	5.04
(1,187)	1:4:A:TRP:HB3	1:6:A:TRP:H	5	5.04
(1,156)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HG2	12	5.04
(1,156)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HG2	12	5.04
(1,120)	1:12:A:ARG:H	1:12:A:ARG:HE	19	5.04
(1,91)	1:4:A:TRP:HB3	1:6:A:TRP:H	5	5.04
(1,83)	1:4:A:TRP:HB3	1:6:A:TRP:H	5	5.04
(1,313)	1:2:A:LEU:HD11	1:6:A:TRP:HB2	11	5.03
(1,313)	1:2:A:LEU:HD12	1:6:A:TRP:HB2	11	5.03
(1,313)	1:2:A:LEU:HD13	1:6:A:TRP:HB2	11	5.03
(1,313)	1:2:A:LEU:HD21	1:6:A:TRP:HB2	11	5.03
(1,313)	1:2:A:LEU:HD22	1:6:A:TRP:HB2	11	5.03
(1,313)	1:2:A:LEU:HD23	1:6:A:TRP:HB2	11	5.03
(1,284)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HE	2	5.03
(1,284)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HE	2	5.03
(1,284)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HE	2	5.03
(1,284)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HE	14	5.03
(1,284)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HE	14	5.03
(1,284)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HE	14	5.03
(1,261)	1:12:A:ARG:HA	1:13:A:ARG:HG3	3	5.03
(1,227)	1:7:A:LYS:HB2	1:8:A:TRP:HB2	1	5.03
(1,227)	1:7:A:LYS:HB3	1:8:A:TRP:HB2	1	5.03
(1,196)	1:3:A:PRO:HA	1:6:A:TRP:HB3	9	5.03
(1,141)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HE	2	5.03

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,141)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HE	2	5.03
(1,141)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HE	2	5.03
(1,141)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HE	14	5.03
(1,141)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HE	14	5.03
(1,141)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HE	14	5.03
(1,125)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HA	1	5.03
(1,112)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:HB3	9	5.03
(1,107)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:HB3	9	5.03
(1,89)	1:3:A:PRO:HA	1:6:A:TRP:H	9	5.03
(1,233)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HB2	16	5.02
(1,233)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HB3	16	5.02
(1,120)	1:12:A:ARG:H	1:12:A:ARG:HE	1	5.02
(1,314)	1:2:A:LEU:HD11	1:4:A:TRP:HB2	16	5.01
(1,314)	1:2:A:LEU:HD12	1:4:A:TRP:HB2	16	5.01
(1,314)	1:2:A:LEU:HD13	1:4:A:TRP:HB2	16	5.01
(1,314)	1:2:A:LEU:HD21	1:4:A:TRP:HB2	16	5.01
(1,314)	1:2:A:LEU:HD22	1:4:A:TRP:HB2	16	5.01
(1,314)	1:2:A:LEU:HD23	1:4:A:TRP:HB2	16	5.01
(1,240)	1:1:A:ILE:HG21	1:2:A:LEU:HB2	8	5.01
(1,240)	1:1:A:ILE:HG22	1:2:A:LEU:HB2	8	5.01
(1,240)	1:1:A:ILE:HG23	1:2:A:LEU:HB2	8	5.01
(1,192)	1:3:A:PRO:HA	1:4:A:TRP:HB3	13	5.01
(1,178)	1:3:A:PRO:HA	1:4:A:TRP:HB3	13	5.01
(1,160)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HA	18	5.01
(1,160)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HA	18	5.01
(1,28)	1:13:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD2	10	5.01
(1,28)	1:13:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD3	10	5.01
(1,258)	1:2:A:LEU:HB3	1:3:A:PRO:HA	5	5.0
(1,206)	1:1:A:ILE:HB	1:3:A:PRO:HA	15	5.0
(1,189)	1:6:A:TRP:HB3	1:7:A:LYS:HA	6	5.0
(1,157)	1:7:A:LYS:HD2	1:8:A:TRP:HB2	6	5.0
(1,157)	1:7:A:LYS:HD3	1:8:A:TRP:HB2	6	5.0
(1,135)	1:5:A:LYS:HB2	1:12:A:ARG:HE	11	5.0
(1,135)	1:5:A:LYS:HB3	1:12:A:ARG:HE	11	5.0
(1,32)	1:12:A:ARG:HG2	1:13:A:ARG:H	19	5.0
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD11	14	4.99
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD12	14	4.99
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD13	14	4.99
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD21	14	4.99
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD22	14	4.99
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD23	14	4.99
(1,261)	1:12:A:ARG:HA	1:13:A:ARG:HG3	14	4.99

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,164)	1:3:A:PRO:HA	1:4:A:TRP:HB2	18	4.99
(1,32)	1:12:A:ARG:HG2	1:13:A:ARG:H	5	4.99
(1,308)	1:1:A:ILE:HD11	1:3:A:PRO:HA	20	4.98
(1,308)	1:1:A:ILE:HD12	1:3:A:PRO:HA	20	4.98
(1,308)	1:1:A:ILE:HD13	1:3:A:PRO:HA	20	4.98
(1,282)	1:9:A:THR:HG21	1:11:A:TRP:H	1	4.98
(1,282)	1:9:A:THR:HG22	1:11:A:TRP:H	1	4.98
(1,282)	1:9:A:THR:HG23	1:11:A:TRP:H	1	4.98
(1,258)	1:2:A:LEU:HB3	1:3:A:PRO:HA	9	4.98
(1,254)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD2	15	4.98
(1,254)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD3	15	4.98
(1,233)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HB2	5	4.98
(1,233)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HB3	5	4.98
(1,140)	1:9:A:THR:HG21	1:11:A:TRP:H	1	4.98
(1,140)	1:9:A:THR:HG22	1:11:A:TRP:H	1	4.98
(1,140)	1:9:A:THR:HG23	1:11:A:TRP:H	1	4.98
(1,88)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HA	1	4.98
(1,78)	1:6:A:TRP:HB2	1:9:A:THR:H	18	4.98
(1,69)	1:6:A:TRP:HB2	1:9:A:THR:H	18	4.98
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD11	6	4.97
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD12	6	4.97
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD13	6	4.97
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD21	6	4.97
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD22	6	4.97
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD23	6	4.97
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD11	12	4.97
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD12	12	4.97
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD13	12	4.97
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD21	12	4.97
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD22	12	4.97
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD23	12	4.97
(1,314)	1:2:A:LEU:HD11	1:4:A:TRP:HB2	5	4.97
(1,314)	1:2:A:LEU:HD12	1:4:A:TRP:HB2	5	4.97
(1,314)	1:2:A:LEU:HD13	1:4:A:TRP:HB2	5	4.97
(1,314)	1:2:A:LEU:HD21	1:4:A:TRP:HB2	5	4.97
(1,314)	1:2:A:LEU:HD22	1:4:A:TRP:HB2	5	4.97
(1,314)	1:2:A:LEU:HD23	1:4:A:TRP:HB2	5	4.97
(1,292)	1:5:A:LYS:HG2	1:7:A:LYS:HA	12	4.97
(1,292)	1:5:A:LYS:HG3	1:7:A:LYS:HA	12	4.97
(1,161)	1:7:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB2	13	4.97
(1,156)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HG2	9	4.97
(1,156)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HG2	9	4.97

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,120)	1:12:A:ARG:H	1:12:A:ARG:HE	14	4.97
(1,32)	1:12:A:ARG:HG2	1:13:A:ARG:H	16	4.97
(1,288)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HA	2	4.96
(1,288)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HA	2	4.96
(1,288)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HA	2	4.96
(1,195)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE2	1	4.96
(1,195)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE3	1	4.96
(1,162)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HA	13	4.96
(1,160)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HA	5	4.96
(1,160)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HA	5	4.96
(1,92)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE2	16	4.96
(1,92)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE3	16	4.96
(1,88)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HA	7	4.96
(1,297)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD2	20	4.95
(1,297)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD3	20	4.95
(1,297)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD2	20	4.95
(1,297)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD3	20	4.95
(1,297)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD2	20	4.95
(1,297)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD3	20	4.95
(1,247)	1:7:A:LYS:HD2	1:8:A:TRP:H	17	4.95
(1,247)	1:7:A:LYS:HD3	1:8:A:TRP:H	17	4.95
(1,242)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HD2	7	4.95
(1,242)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HD3	7	4.95
(1,192)	1:3:A:PRO:HA	1:4:A:TRP:HB3	3	4.95
(1,187)	1:4:A:TRP:HB3	1:6:A:TRP:H	7	4.95
(1,185)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB3	16	4.95
(1,182)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD2	20	4.95
(1,182)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD3	20	4.95
(1,182)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD2	20	4.95
(1,182)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD3	20	4.95
(1,182)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD2	20	4.95
(1,182)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD3	20	4.95
(1,178)	1:3:A:PRO:HA	1:4:A:TRP:HB3	3	4.95
(1,170)	1:12:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD2	20	4.95
(1,170)	1:12:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD3	20	4.95
(1,115)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD2	4	4.95
(1,115)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD3	4	4.95
(1,91)	1:4:A:TRP:HB3	1:6:A:TRP:H	7	4.95
(1,83)	1:4:A:TRP:HB3	1:6:A:TRP:H	7	4.95
(1,57)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB3	16	4.95
(1,54)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB2	3	4.95
(1,51)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB3	16	4.95

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,47)	1:7:A:LYS:HD2	1:8:A:TRP:H	17	4.95
(1,47)	1:7:A:LYS:HD3	1:8:A:TRP:H	17	4.95
(1,258)	1:2:A:LEU:HB3	1:3:A:PRO:HA	7	4.94
(1,240)	1:1:A:ILE:HG21	1:2:A:LEU:HB2	13	4.94
(1,240)	1:1:A:ILE:HG22	1:2:A:LEU:HB2	13	4.94
(1,240)	1:1:A:ILE:HG23	1:2:A:LEU:HB2	13	4.94
(1,240)	1:1:A:ILE:HG21	1:2:A:LEU:HB2	17	4.94
(1,240)	1:1:A:ILE:HG22	1:2:A:LEU:HB2	17	4.94
(1,240)	1:1:A:ILE:HG23	1:2:A:LEU:HB2	17	4.94
(1,228)	1:2:A:LEU:HB2	1:4:A:TRP:HB2	5	4.94
(1,156)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HG2	6	4.94
(1,156)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HG2	6	4.94
(1,247)	1:7:A:LYS:HD2	1:8:A:TRP:H	16	4.93
(1,247)	1:7:A:LYS:HD3	1:8:A:TRP:H	16	4.93
(1,227)	1:7:A:LYS:HB2	1:8:A:TRP:HB2	17	4.93
(1,227)	1:7:A:LYS:HB3	1:8:A:TRP:HB2	17	4.93
(1,161)	1:7:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB2	3	4.93
(1,160)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HA	7	4.93
(1,160)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HA	7	4.93
(1,47)	1:7:A:LYS:HD2	1:8:A:TRP:H	16	4.93
(1,47)	1:7:A:LYS:HD3	1:8:A:TRP:H	16	4.93
(1,39)	1:6:A:TRP:HB3	1:8:A:TRP:H	1	4.93
(1,298)	1:5:A:LYS:HG2	1:6:A:TRP:HB3	14	4.92
(1,298)	1:5:A:LYS:HG3	1:6:A:TRP:HB3	14	4.92
(1,240)	1:1:A:ILE:HG21	1:2:A:LEU:HB2	4	4.92
(1,240)	1:1:A:ILE:HG22	1:2:A:LEU:HB2	4	4.92
(1,240)	1:1:A:ILE:HG23	1:2:A:LEU:HB2	4	4.92
(1,233)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HB2	1	4.92
(1,233)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HB3	1	4.92
(1,200)	1:5:A:LYS:HG2	1:6:A:TRP:HB3	14	4.92
(1,200)	1:5:A:LYS:HG3	1:6:A:TRP:HB3	14	4.92
(1,32)	1:12:A:ARG:HG2	1:13:A:ARG:H	18	4.92
(1,231)	1:11:A:TRP:HB2	1:13:A:ARG:HG2	12	4.91
(1,231)	1:11:A:TRP:HB3	1:13:A:ARG:HG2	12	4.91
(1,191)	1:7:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB3	11	4.91
(1,160)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HA	20	4.91
(1,160)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HA	20	4.91
(1,32)	1:12:A:ARG:HG2	1:13:A:ARG:H	6	4.91
(1,261)	1:12:A:ARG:HA	1:13:A:ARG:HG3	17	4.9
(1,191)	1:7:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB3	1	4.9
(1,161)	1:7:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB2	4	4.9
(1,125)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HA	6	4.9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,110)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:HB2	7	4.9
(1,318)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:HB3	16	4.89
(1,318)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:HB3	16	4.89
(1,318)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:HB3	16	4.89
(1,267)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:HB3	16	4.89
(1,267)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:HB3	16	4.89
(1,267)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:HB3	16	4.89
(1,254)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD2	2	4.89
(1,254)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD3	2	4.89
(1,254)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD2	10	4.89
(1,254)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD3	10	4.89
(1,190)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HA	5	4.89
(1,187)	1:4:A:TRP:HB3	1:6:A:TRP:H	1	4.89
(1,177)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HA	5	4.89
(1,165)	1:3:A:PRO:HA	1:6:A:TRP:HB2	9	4.89
(1,157)	1:7:A:LYS:HD2	1:8:A:TRP:HB2	3	4.89
(1,157)	1:7:A:LYS:HD3	1:8:A:TRP:HB2	3	4.89
(1,91)	1:4:A:TRP:HB3	1:6:A:TRP:H	1	4.89
(1,83)	1:4:A:TRP:HB3	1:6:A:TRP:H	1	4.89
(1,37)	1:7:A:LYS:HE2	1:8:A:TRP:H	18	4.88
(1,37)	1:7:A:LYS:HE3	1:8:A:TRP:H	18	4.88
(1,247)	1:7:A:LYS:HD2	1:8:A:TRP:H	20	4.87
(1,247)	1:7:A:LYS:HD3	1:8:A:TRP:H	20	4.87
(1,229)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HB2	19	4.87
(1,229)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HB3	19	4.87
(1,163)	1:4:A:TRP:HB2	1:5:A:LYS:HA	19	4.87
(1,161)	1:7:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB2	20	4.87
(1,88)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HA	4	4.87
(1,78)	1:6:A:TRP:HB2	1:9:A:THR:H	6	4.87
(1,69)	1:6:A:TRP:HB2	1:9:A:THR:H	6	4.87
(1,47)	1:7:A:LYS:HD2	1:8:A:TRP:H	20	4.87
(1,47)	1:7:A:LYS:HD3	1:8:A:TRP:H	20	4.87
(1,32)	1:12:A:ARG:HG2	1:13:A:ARG:H	3	4.87
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD11	10	4.86
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD12	10	4.86
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD13	10	4.86
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD21	10	4.86
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD22	10	4.86
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD23	10	4.86
(1,192)	1:3:A:PRO:HA	1:4:A:TRP:HB3	5	4.86
(1,190)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HA	8	4.86
(1,178)	1:3:A:PRO:HA	1:4:A:TRP:HB3	5	4.86

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,177)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HA	8	4.86
(1,160)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HA	13	4.86
(1,160)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HA	13	4.86
(1,282)	1:9:A:THR:HG21	1:11:A:TRP:H	4	4.85
(1,282)	1:9:A:THR:HG22	1:11:A:TRP:H	4	4.85
(1,282)	1:9:A:THR:HG23	1:11:A:TRP:H	4	4.85
(1,231)	1:11:A:TRP:HB2	1:13:A:ARG:HG2	14	4.85
(1,231)	1:11:A:TRP:HB3	1:13:A:ARG:HG2	14	4.85
(1,140)	1:9:A:THR:HG21	1:11:A:TRP:H	4	4.85
(1,140)	1:9:A:THR:HG22	1:11:A:TRP:H	4	4.85
(1,140)	1:9:A:THR:HG23	1:11:A:TRP:H	4	4.85
(1,290)	1:1:A:ILE:HG21	1:3:A:PRO:HA	10	4.84
(1,290)	1:1:A:ILE:HG22	1:3:A:PRO:HA	10	4.84
(1,290)	1:1:A:ILE:HG23	1:3:A:PRO:HA	10	4.84
(1,170)	1:12:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD2	19	4.84
(1,170)	1:12:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD3	19	4.84
(1,125)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HA	11	4.84
(1,240)	1:1:A:ILE:HG21	1:2:A:LEU:HB2	11	4.83
(1,240)	1:1:A:ILE:HG22	1:2:A:LEU:HB2	11	4.83
(1,240)	1:1:A:ILE:HG23	1:2:A:LEU:HB2	11	4.83
(1,212)	1:10:A:PRO:HB2	1:11:A:TRP:HB2	18	4.83
(1,212)	1:10:A:PRO:HB2	1:11:A:TRP:HB3	18	4.83
(1,212)	1:10:A:PRO:HB3	1:11:A:TRP:HB2	18	4.83
(1,212)	1:10:A:PRO:HB3	1:11:A:TRP:HB3	18	4.83
(1,193)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE2	1	4.83
(1,193)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE3	1	4.83
(1,49)	1:12:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HG3	3	4.83
(1,18)	1:7:A:LYS:H	1:8:A:TRP:HB3	7	4.83
(1,262)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD2	9	4.82
(1,262)	1:5:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD3	9	4.82
(1,247)	1:7:A:LYS:HD2	1:8:A:TRP:H	1	4.82
(1,247)	1:7:A:LYS:HD3	1:8:A:TRP:H	1	4.82
(1,161)	1:7:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB2	19	4.82
(1,47)	1:7:A:LYS:HD2	1:8:A:TRP:H	1	4.82
(1,47)	1:7:A:LYS:HD3	1:8:A:TRP:H	1	4.82
(1,260)	1:2:A:LEU:HB3	1:5:A:LYS:HA	10	4.81
(1,243)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HB3	16	4.81
(1,189)	1:6:A:TRP:HB3	1:7:A:LYS:HA	9	4.81
(1,164)	1:3:A:PRO:HA	1:4:A:TRP:HB2	12	4.81
(1,80)	1:4:A:TRP:HB2	1:6:A:TRP:H	9	4.81
(1,240)	1:1:A:ILE:HG21	1:2:A:LEU:HB2	1	4.8
(1,240)	1:1:A:ILE:HG22	1:2:A:LEU:HB2	1	4.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,240)	1:1:A:ILE:HG23	1:2:A:LEU:HB2	1	4.8
(1,212)	1:10:A:PRO:HB2	1:11:A:TRP:HB2	4	4.8
(1,212)	1:10:A:PRO:HB2	1:11:A:TRP:HB3	4	4.8
(1,212)	1:10:A:PRO:HB3	1:11:A:TRP:HB2	4	4.8
(1,212)	1:10:A:PRO:HB3	1:11:A:TRP:HB3	4	4.8
(1,32)	1:12:A:ARG:HG2	1:13:A:ARG:H	8	4.8
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD11	19	4.79
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD12	19	4.79
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD13	19	4.79
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD21	19	4.79
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD22	19	4.79
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD23	19	4.79
(1,279)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HD2	3	4.79
(1,279)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HD3	3	4.79
(1,226)	1:2:A:LEU:HB2	1:6:A:TRP:HB2	10	4.79
(1,185)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB3	9	4.79
(1,164)	1:3:A:PRO:HA	1:4:A:TRP:HB2	4	4.79
(1,161)	1:7:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB2	15	4.79
(1,125)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HA	10	4.79
(1,57)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB3	9	4.79
(1,51)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB3	9	4.79
(1,152)	1:10:A:PRO:HB2	1:12:A:ARG:HE	20	4.78
(1,152)	1:10:A:PRO:HB3	1:12:A:ARG:HE	20	4.78
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD11	16	4.77
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD12	16	4.77
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD13	16	4.77
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD21	16	4.77
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD22	16	4.77
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD23	16	4.77
(1,240)	1:1:A:ILE:HG21	1:2:A:LEU:HB2	12	4.77
(1,240)	1:1:A:ILE:HG22	1:2:A:LEU:HB2	12	4.77
(1,240)	1:1:A:ILE:HG23	1:2:A:LEU:HB2	12	4.77
(1,212)	1:10:A:PRO:HB2	1:11:A:TRP:HB2	17	4.77
(1,212)	1:10:A:PRO:HB2	1:11:A:TRP:HB3	17	4.77
(1,212)	1:10:A:PRO:HB3	1:11:A:TRP:HB2	17	4.77
(1,212)	1:10:A:PRO:HB3	1:11:A:TRP:HB3	17	4.77
(1,206)	1:1:A:ILE:HB	1:3:A:PRO:HA	9	4.77
(1,193)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE2	12	4.77
(1,193)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE3	12	4.77
(1,32)	1:12:A:ARG:HG2	1:13:A:ARG:H	1	4.77
(1,212)	1:10:A:PRO:HB2	1:11:A:TRP:HB2	7	4.76
(1,212)	1:10:A:PRO:HB2	1:11:A:TRP:HB3	7	4.76

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,212)	1:10:A:PRO:HB3	1:11:A:TRP:HB2	7	4.76
(1,212)	1:10:A:PRO:HB3	1:11:A:TRP:HB3	7	4.76
(1,93)	1:1:A:ILE:HB	1:6:A:TRP:H	9	4.76
(1,32)	1:12:A:ARG:HG2	1:13:A:ARG:H	2	4.76
(1,28)	1:13:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD2	16	4.76
(1,28)	1:13:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD3	16	4.76
(1,160)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HA	1	4.75
(1,160)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HA	1	4.75
(1,146)	1:6:A:TRP:HB2	1:11:A:TRP:H	15	4.75
(1,28)	1:13:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD2	8	4.74
(1,28)	1:13:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD3	8	4.74
(1,244)	1:7:A:LYS:HD2	1:10:A:PRO:HB2	19	4.73
(1,244)	1:7:A:LYS:HD2	1:10:A:PRO:HB3	19	4.73
(1,244)	1:7:A:LYS:HD3	1:10:A:PRO:HB2	19	4.73
(1,244)	1:7:A:LYS:HD3	1:10:A:PRO:HB3	19	4.73
(1,189)	1:6:A:TRP:HB3	1:7:A:LYS:HA	18	4.73
(1,28)	1:13:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD2	12	4.73
(1,28)	1:13:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD3	12	4.73
(1,18)	1:7:A:LYS:H	1:8:A:TRP:HB3	15	4.73
(1,288)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HA	17	4.72
(1,288)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HA	17	4.72
(1,288)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HA	17	4.72
(1,247)	1:7:A:LYS:HD2	1:8:A:TRP:H	3	4.72
(1,247)	1:7:A:LYS:HD3	1:8:A:TRP:H	3	4.72
(1,227)	1:7:A:LYS:HB2	1:8:A:TRP:HB2	2	4.72
(1,227)	1:7:A:LYS:HB3	1:8:A:TRP:HB2	2	4.72
(1,47)	1:7:A:LYS:HD2	1:8:A:TRP:H	3	4.72
(1,47)	1:7:A:LYS:HD3	1:8:A:TRP:H	3	4.72
(1,318)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:HB3	8	4.71
(1,318)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:HB3	8	4.71
(1,318)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:HB3	8	4.71
(1,282)	1:9:A:THR:HG21	1:11:A:TRP:H	16	4.71
(1,282)	1:9:A:THR:HG22	1:11:A:TRP:H	16	4.71
(1,282)	1:9:A:THR:HG23	1:11:A:TRP:H	16	4.71
(1,267)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:HB3	8	4.71
(1,267)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:HB3	8	4.71
(1,267)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:HB3	8	4.71
(1,243)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HB3	19	4.71
(1,180)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD2	18	4.71
(1,180)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD3	18	4.71
(1,180)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD2	18	4.71
(1,180)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD3	18	4.71

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,140)	1:9:A:THR:HG21	1:11:A:TRP:H	16	4.71
(1,140)	1:9:A:THR:HG22	1:11:A:TRP:H	16	4.71
(1,140)	1:9:A:THR:HG23	1:11:A:TRP:H	16	4.71
(1,28)	1:13:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD2	15	4.71
(1,28)	1:13:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD3	15	4.71
(1,279)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HD2	10	4.7
(1,279)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HD3	10	4.7
(1,279)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HD2	20	4.7
(1,279)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HD3	20	4.7
(1,229)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HB2	16	4.7
(1,229)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HB3	16	4.7
(1,190)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HA	1	4.7
(1,177)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HA	1	4.7
(1,164)	1:3:A:PRO:HA	1:4:A:TRP:HB2	6	4.7
(1,229)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HB2	11	4.69
(1,229)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HB3	11	4.69
(1,212)	1:10:A:PRO:HB2	1:11:A:TRP:HB2	1	4.69
(1,212)	1:10:A:PRO:HB2	1:11:A:TRP:HB3	1	4.69
(1,212)	1:10:A:PRO:HB3	1:11:A:TRP:HB2	1	4.69
(1,212)	1:10:A:PRO:HB3	1:11:A:TRP:HB3	1	4.69
(1,161)	1:7:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB2	2	4.69
(1,161)	1:7:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB2	7	4.69
(1,154)	1:2:A:LEU:HB3	1:4:A:TRP:HB2	4	4.69
(1,32)	1:12:A:ARG:HG2	1:13:A:ARG:H	14	4.69
(1,240)	1:1:A:ILE:HG21	1:2:A:LEU:HB2	18	4.68
(1,240)	1:1:A:ILE:HG22	1:2:A:LEU:HB2	18	4.68
(1,240)	1:1:A:ILE:HG23	1:2:A:LEU:HB2	18	4.68
(1,145)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	15	4.68
(1,145)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HE	15	4.68
(1,92)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE2	1	4.68
(1,92)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE3	1	4.68
(1,309)	1:2:A:LEU:HD11	1:7:A:LYS:HA	2	4.67
(1,309)	1:2:A:LEU:HD12	1:7:A:LYS:HA	2	4.67
(1,309)	1:2:A:LEU:HD13	1:7:A:LYS:HA	2	4.67
(1,309)	1:2:A:LEU:HD21	1:7:A:LYS:HA	2	4.67
(1,309)	1:2:A:LEU:HD22	1:7:A:LYS:HA	2	4.67
(1,309)	1:2:A:LEU:HD23	1:7:A:LYS:HA	2	4.67
(1,304)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:H	6	4.67
(1,304)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:H	6	4.67
(1,304)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:H	6	4.67
(1,287)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HG2	16	4.67
(1,287)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HG3	16	4.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,240)	1:1:A:ILE:HG21	1:2:A:LEU:HB2	2	4.67
(1,240)	1:1:A:ILE:HG22	1:2:A:LEU:HB2	2	4.67
(1,240)	1:1:A:ILE:HG23	1:2:A:LEU:HB2	2	4.67
(1,180)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD2	6	4.67
(1,180)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD3	6	4.67
(1,180)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD2	6	4.67
(1,180)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD3	6	4.67
(1,164)	1:3:A:PRO:HA	1:4:A:TRP:HB2	9	4.67
(1,318)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:HB3	19	4.66
(1,318)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:HB3	19	4.66
(1,318)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:HB3	19	4.66
(1,313)	1:2:A:LEU:HD11	1:6:A:TRP:HB2	4	4.66
(1,313)	1:2:A:LEU:HD12	1:6:A:TRP:HB2	4	4.66
(1,313)	1:2:A:LEU:HD13	1:6:A:TRP:HB2	4	4.66
(1,313)	1:2:A:LEU:HD21	1:6:A:TRP:HB2	4	4.66
(1,313)	1:2:A:LEU:HD22	1:6:A:TRP:HB2	4	4.66
(1,313)	1:2:A:LEU:HD23	1:6:A:TRP:HB2	4	4.66
(1,296)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG2	7	4.66
(1,296)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG3	7	4.66
(1,267)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:HB3	19	4.66
(1,267)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:HB3	19	4.66
(1,267)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:HB3	19	4.66
(1,191)	1:7:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB3	8	4.66
(1,181)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG2	7	4.66
(1,181)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG3	7	4.66
(1,161)	1:7:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB2	6	4.66
(1,161)	1:7:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB2	18	4.66
(1,152)	1:10:A:PRO:HB2	1:12:A:ARG:HE	15	4.66
(1,152)	1:10:A:PRO:HB3	1:12:A:ARG:HE	15	4.66
(1,17)	1:6:A:TRP:HB3	1:7:A:LYS:H	11	4.66
(1,291)	1:7:A:LYS:HA	1:9:A:THR:HG21	1	4.65
(1,291)	1:7:A:LYS:HA	1:9:A:THR:HG22	1	4.65
(1,291)	1:7:A:LYS:HA	1:9:A:THR:HG23	1	4.65
(1,193)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE2	13	4.65
(1,193)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE3	13	4.65
(1,164)	1:3:A:PRO:HA	1:4:A:TRP:HB2	17	4.65
(1,160)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HA	2	4.65
(1,160)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HA	2	4.65
(1,88)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HA	6	4.65
(1,189)	1:6:A:TRP:HB3	1:7:A:LYS:HA	20	4.64
(1,139)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HE	17	4.64
(1,139)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HE	17	4.64

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,308)	1:1:A:ILE:HD11	1:3:A:PRO:HA	15	4.63
(1,308)	1:1:A:ILE:HD12	1:3:A:PRO:HA	15	4.63
(1,308)	1:1:A:ILE:HD13	1:3:A:PRO:HA	15	4.63
(1,279)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HD2	11	4.63
(1,279)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HD3	11	4.63
(1,261)	1:12:A:ARG:HA	1:13:A:ARG:HG3	8	4.63
(1,261)	1:12:A:ARG:HA	1:13:A:ARG:HG3	15	4.63
(1,215)	1:8:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB2	8	4.63
(1,215)	1:8:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB3	8	4.63
(1,207)	1:10:A:PRO:HB2	1:12:A:ARG:HA	5	4.63
(1,207)	1:10:A:PRO:HB3	1:12:A:ARG:HA	5	4.63
(1,193)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE2	7	4.63
(1,193)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE3	7	4.63
(1,161)	1:7:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB2	1	4.63
(1,160)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HA	15	4.63
(1,160)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HA	15	4.63
(1,88)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HA	3	4.63
(1,54)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB2	7	4.63
(1,32)	1:12:A:ARG:HG2	1:13:A:ARG:H	10	4.63
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD11	7	4.62
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD12	7	4.62
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD13	7	4.62
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD21	7	4.62
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD22	7	4.62
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD23	7	4.62
(1,292)	1:5:A:LYS:HG2	1:7:A:LYS:HA	14	4.62
(1,292)	1:5:A:LYS:HG3	1:7:A:LYS:HA	14	4.62
(1,232)	1:2:A:LEU:HB2	1:6:A:TRP:H	19	4.62
(1,193)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE2	5	4.62
(1,193)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE3	5	4.62
(1,162)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HA	10	4.62
(1,54)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:HB2	9	4.62
(1,39)	1:6:A:TRP:HB3	1:8:A:TRP:H	5	4.62
(1,28)	1:13:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD2	3	4.61
(1,28)	1:13:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD3	3	4.61
(1,28)	1:13:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD2	9	4.61
(1,28)	1:13:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD3	9	4.61
(1,308)	1:1:A:ILE:HD11	1:3:A:PRO:HA	5	4.6
(1,308)	1:1:A:ILE:HD12	1:3:A:PRO:HA	5	4.6
(1,308)	1:1:A:ILE:HD13	1:3:A:PRO:HA	5	4.6
(1,214)	1:6:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB2	19	4.6
(1,214)	1:6:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB3	19	4.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,191)	1:7:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB3	16	4.6
(1,164)	1:3:A:PRO:HA	1:4:A:TRP:HB2	13	4.6
(1,160)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HA	11	4.6
(1,160)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HA	11	4.6
(1,157)	1:7:A:LYS:HD2	1:8:A:TRP:HB2	5	4.6
(1,157)	1:7:A:LYS:HD3	1:8:A:TRP:HB2	5	4.6
(1,164)	1:3:A:PRO:HA	1:4:A:TRP:HB2	1	4.59
(1,304)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:H	3	4.58
(1,304)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:H	3	4.58
(1,304)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:H	3	4.58
(1,231)	1:11:A:TRP:HB2	1:13:A:ARG:HG2	2	4.58
(1,231)	1:11:A:TRP:HB3	1:13:A:ARG:HG2	2	4.58
(1,193)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE2	18	4.58
(1,193)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE3	18	4.58
(1,125)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HA	4	4.58
(1,193)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE2	2	4.57
(1,193)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE3	2	4.57
(1,191)	1:7:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB3	9	4.57
(1,259)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD2	18	4.56
(1,259)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD3	18	4.56
(1,226)	1:2:A:LEU:HB2	1:6:A:TRP:HB2	2	4.56
(1,161)	1:7:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB2	9	4.56
(1,42)	1:6:A:TRP:HB2	1:8:A:TRP:H	4	4.56
(1,191)	1:7:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB3	14	4.55
(1,160)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HA	8	4.55
(1,160)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HA	8	4.55
(1,162)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HA	12	4.54
(1,160)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HA	14	4.54
(1,160)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HA	14	4.54
(1,190)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HA	14	4.53
(1,177)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HA	14	4.53
(1,154)	1:2:A:LEU:HB3	1:4:A:TRP:HB2	13	4.53
(1,88)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HA	5	4.53
(1,190)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HA	16	4.52
(1,177)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HA	16	4.52
(1,28)	1:13:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD2	6	4.52
(1,28)	1:13:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD3	6	4.52
(1,259)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD2	4	4.51
(1,259)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD3	4	4.51
(1,212)	1:10:A:PRO:HB2	1:11:A:TRP:HB2	2	4.51
(1,212)	1:10:A:PRO:HB2	1:11:A:TRP:HB3	2	4.51
(1,212)	1:10:A:PRO:HB3	1:11:A:TRP:HB2	2	4.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,212)	1:10:A:PRO:HB3	1:11:A:TRP:HB3	2	4.51
(1,204)	1:6:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG21	5	4.51
(1,204)	1:6:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG22	5	4.51
(1,204)	1:6:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG23	5	4.51
(1,161)	1:7:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB2	12	4.51
(1,145)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	19	4.5
(1,145)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HE	19	4.5
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD11	9	4.49
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD12	9	4.49
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD13	9	4.49
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD21	9	4.49
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD22	9	4.49
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD23	9	4.49
(1,242)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HD2	4	4.49
(1,242)	1:1:A:ILE:HB	1:7:A:LYS:HD3	4	4.49
(1,201)	1:5:A:LYS:HG2	1:7:A:LYS:HE2	2	4.49
(1,201)	1:5:A:LYS:HG2	1:7:A:LYS:HE3	2	4.49
(1,201)	1:5:A:LYS:HG3	1:7:A:LYS:HE2	2	4.49
(1,201)	1:5:A:LYS:HG3	1:7:A:LYS:HE3	2	4.49
(1,162)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HA	14	4.49
(1,145)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	9	4.49
(1,145)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HE	9	4.49
(1,193)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE2	8	4.48
(1,193)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE3	8	4.48
(1,193)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE2	15	4.48
(1,193)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE3	15	4.48
(1,191)	1:7:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB3	17	4.48
(1,189)	1:6:A:TRP:HB3	1:7:A:LYS:HA	2	4.48
(1,17)	1:6:A:TRP:HB3	1:7:A:LYS:H	8	4.48
(1,291)	1:7:A:LYS:HA	1:9:A:THR:HG21	16	4.47
(1,291)	1:7:A:LYS:HA	1:9:A:THR:HG22	16	4.47
(1,291)	1:7:A:LYS:HA	1:9:A:THR:HG23	16	4.47
(1,282)	1:9:A:THR:HG21	1:11:A:TRP:H	13	4.47
(1,282)	1:9:A:THR:HG22	1:11:A:TRP:H	13	4.47
(1,282)	1:9:A:THR:HG23	1:11:A:TRP:H	13	4.47
(1,233)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HB2	17	4.47
(1,233)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HB3	17	4.47
(1,160)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HA	16	4.47
(1,160)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HA	16	4.47
(1,160)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HA	17	4.47
(1,160)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HA	17	4.47
(1,140)	1:9:A:THR:HG21	1:11:A:TRP:H	13	4.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,140)	1:9:A:THR:HG22	1:11:A:TRP:H	13	4.47
(1,140)	1:9:A:THR:HG23	1:11:A:TRP:H	13	4.47
(1,89)	1:3:A:PRO:HA	1:6:A:TRP:H	7	4.47
(1,304)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:H	2	4.46
(1,304)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:H	2	4.46
(1,304)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:H	2	4.46
(1,229)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HB2	12	4.46
(1,229)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HB3	12	4.46
(1,227)	1:7:A:LYS:HB2	1:8:A:TRP:HB2	10	4.46
(1,227)	1:7:A:LYS:HB3	1:8:A:TRP:HB2	10	4.46
(1,164)	1:3:A:PRO:HA	1:4:A:TRP:HB2	15	4.46
(1,17)	1:6:A:TRP:HB3	1:7:A:LYS:H	1	4.46
(1,17)	1:6:A:TRP:HB3	1:7:A:LYS:H	16	4.46
(1,10)	1:2:A:LEU:H	1:6:A:TRP:HB2	17	4.46
(1,161)	1:7:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB2	10	4.45
(1,160)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HA	12	4.45
(1,160)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HA	12	4.45
(1,152)	1:10:A:PRO:HB2	1:12:A:ARG:HE	5	4.45
(1,152)	1:10:A:PRO:HB3	1:12:A:ARG:HE	5	4.45
(1,17)	1:6:A:TRP:HB3	1:7:A:LYS:H	19	4.45
(1,193)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE2	19	4.44
(1,193)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE3	19	4.44
(1,160)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HA	4	4.44
(1,160)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HA	4	4.44
(1,261)	1:12:A:ARG:HA	1:13:A:ARG:HG3	7	4.43
(1,247)	1:7:A:LYS:HD2	1:8:A:TRP:H	11	4.43
(1,247)	1:7:A:LYS:HD3	1:8:A:TRP:H	11	4.43
(1,161)	1:7:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB2	5	4.43
(1,47)	1:7:A:LYS:HD2	1:8:A:TRP:H	11	4.43
(1,47)	1:7:A:LYS:HD3	1:8:A:TRP:H	11	4.43
(1,28)	1:13:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD2	11	4.43
(1,28)	1:13:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD3	11	4.43
(1,288)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HA	6	4.42
(1,288)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HA	6	4.42
(1,288)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HA	6	4.42
(1,254)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD2	7	4.42
(1,254)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD3	7	4.42
(1,49)	1:12:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HG3	17	4.42
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD11	18	4.41
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD12	18	4.41
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD13	18	4.41
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD21	18	4.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD22	18	4.41
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD23	18	4.41
(1,304)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:H	5	4.41
(1,304)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:H	5	4.41
(1,304)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:H	5	4.41
(1,291)	1:7:A:LYS:HA	1:9:A:THR:HG21	7	4.41
(1,291)	1:7:A:LYS:HA	1:9:A:THR:HG22	7	4.41
(1,291)	1:7:A:LYS:HA	1:9:A:THR:HG23	7	4.41
(1,28)	1:13:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD2	17	4.41
(1,28)	1:13:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD3	17	4.41
(1,304)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:H	9	4.4
(1,304)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:H	9	4.4
(1,304)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:H	9	4.4
(1,274)	1:5:A:LYS:HB2	1:12:A:ARG:HE	17	4.4
(1,274)	1:5:A:LYS:HB3	1:12:A:ARG:HE	17	4.4
(1,199)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:HG21	17	4.4
(1,199)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:HG22	17	4.4
(1,199)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:HG23	17	4.4
(1,199)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:HG21	17	4.4
(1,199)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:HG22	17	4.4
(1,199)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:HG23	17	4.4
(1,193)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE2	10	4.4
(1,193)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE3	10	4.4
(1,42)	1:6:A:TRP:HB2	1:8:A:TRP:H	20	4.4
(1,291)	1:7:A:LYS:HA	1:9:A:THR:HG21	2	4.39
(1,291)	1:7:A:LYS:HA	1:9:A:THR:HG22	2	4.39
(1,291)	1:7:A:LYS:HA	1:9:A:THR:HG23	2	4.39
(1,193)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE2	20	4.39
(1,193)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE3	20	4.39
(1,190)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HA	18	4.39
(1,177)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HA	18	4.39
(1,156)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HG2	8	4.39
(1,156)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HG2	8	4.39
(1,284)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HE	20	4.38
(1,284)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HE	20	4.38
(1,284)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HE	20	4.38
(1,190)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HA	13	4.38
(1,177)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HA	13	4.38
(1,160)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HA	19	4.38
(1,160)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HA	19	4.38
(1,153)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:HB2	9	4.38
(1,141)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HE	20	4.38

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,141)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HE	20	4.38
(1,141)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HE	20	4.38
(1,68)	1:11:A:TRP:HB2	1:13:A:ARG:HE	16	4.38
(1,68)	1:11:A:TRP:HB3	1:13:A:ARG:HE	16	4.38
(1,261)	1:12:A:ARG:HA	1:13:A:ARG:HG3	4	4.37
(1,155)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HD2	2	4.37
(1,155)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HD3	2	4.37
(1,154)	1:2:A:LEU:HB3	1:4:A:TRP:HB2	20	4.37
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD11	1	4.36
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD12	1	4.36
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD13	1	4.36
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD21	1	4.36
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD22	1	4.36
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD23	1	4.36
(1,290)	1:1:A:ILE:HG21	1:3:A:PRO:HA	4	4.36
(1,290)	1:1:A:ILE:HG22	1:3:A:PRO:HA	4	4.36
(1,290)	1:1:A:ILE:HG23	1:3:A:PRO:HA	4	4.36
(1,233)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HB2	11	4.36
(1,233)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HB3	11	4.36
(1,39)	1:6:A:TRP:HB3	1:8:A:TRP:H	13	4.36
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD11	5	4.35
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD12	5	4.35
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD13	5	4.35
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD21	5	4.35
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD22	5	4.35
(1,323)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HD23	5	4.35
(1,212)	1:10:A:PRO:HB2	1:11:A:TRP:HB2	20	4.35
(1,212)	1:10:A:PRO:HB2	1:11:A:TRP:HB3	20	4.35
(1,212)	1:10:A:PRO:HB3	1:11:A:TRP:HB2	20	4.35
(1,212)	1:10:A:PRO:HB3	1:11:A:TRP:HB3	20	4.35
(1,245)	1:10:A:PRO:HB2	1:12:A:ARG:HG2	16	4.34
(1,245)	1:10:A:PRO:HB3	1:12:A:ARG:HG2	16	4.34
(1,164)	1:3:A:PRO:HA	1:4:A:TRP:HB2	5	4.34
(1,164)	1:3:A:PRO:HA	1:4:A:TRP:HB2	16	4.34
(1,296)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG2	4	4.33
(1,296)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG3	4	4.33
(1,181)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG2	4	4.33
(1,181)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG3	4	4.33
(1,156)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HG2	3	4.33
(1,156)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HG2	3	4.33
(1,259)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD2	6	4.32
(1,259)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD3	6	4.32

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,259)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD2	9	4.3
(1,259)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD3	9	4.3
(1,259)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD2	14	4.3
(1,259)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD3	14	4.3
(1,259)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD2	16	4.3
(1,259)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD3	16	4.3
(1,247)	1:7:A:LYS:HD2	1:8:A:TRP:H	2	4.3
(1,247)	1:7:A:LYS:HD3	1:8:A:TRP:H	2	4.3
(1,190)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HA	10	4.3
(1,177)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HA	10	4.3
(1,47)	1:7:A:LYS:HD2	1:8:A:TRP:H	2	4.3
(1,47)	1:7:A:LYS:HD3	1:8:A:TRP:H	2	4.3
(1,163)	1:4:A:TRP:HB2	1:5:A:LYS:HA	3	4.29
(1,71)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:H	9	4.29
(1,71)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:H	9	4.29
(1,17)	1:6:A:TRP:HB3	1:7:A:LYS:H	5	4.29
(1,193)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE2	11	4.28
(1,193)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE3	11	4.28
(1,261)	1:12:A:ARG:HA	1:13:A:ARG:HG3	18	4.27
(1,259)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD2	17	4.27
(1,259)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD3	17	4.27
(1,209)	1:5:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB2	3	4.27
(1,209)	1:5:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB3	3	4.27
(1,161)	1:7:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB2	14	4.27
(1,161)	1:7:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB2	17	4.27
(1,156)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HG2	13	4.27
(1,156)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HG2	13	4.27
(1,252)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:H	17	4.26
(1,231)	1:11:A:TRP:HB2	1:13:A:ARG:HG2	15	4.26
(1,231)	1:11:A:TRP:HB3	1:13:A:ARG:HG2	15	4.26
(1,154)	1:2:A:LEU:HB3	1:4:A:TRP:HB2	17	4.25
(1,95)	1:2:A:LEU:HB2	1:6:A:TRP:H	9	4.25
(1,17)	1:6:A:TRP:HB3	1:7:A:LYS:H	4	4.25
(1,160)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HA	9	4.24
(1,160)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HA	9	4.24
(1,154)	1:2:A:LEU:HB3	1:4:A:TRP:HB2	5	4.24
(1,86)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:H	11	4.24
(1,39)	1:6:A:TRP:HB3	1:8:A:TRP:H	20	4.24
(1,259)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD2	11	4.23
(1,259)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD3	11	4.23
(1,210)	1:7:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB2	4	4.23
(1,210)	1:7:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB3	4	4.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,193)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE2	9	4.23
(1,193)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE3	9	4.23
(1,290)	1:1:A:ILE:HG21	1:3:A:PRO:HA	1	4.22
(1,290)	1:1:A:ILE:HG22	1:3:A:PRO:HA	1	4.22
(1,290)	1:1:A:ILE:HG23	1:3:A:PRO:HA	1	4.22
(1,228)	1:2:A:LEU:HB2	1:4:A:TRP:HB2	18	4.22
(1,211)	1:1:A:ILE:HB	1:6:A:TRP:HB2	9	4.22
(1,196)	1:3:A:PRO:HA	1:6:A:TRP:HB3	7	4.22
(1,155)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HD2	10	4.22
(1,155)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HD3	10	4.22
(1,125)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HA	18	4.22
(1,103)	1:6:A:TRP:H	1:9:A:THR:HG21	6	4.22
(1,103)	1:6:A:TRP:H	1:9:A:THR:HG22	6	4.22
(1,103)	1:6:A:TRP:H	1:9:A:THR:HG23	6	4.22
(1,296)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG2	14	4.21
(1,296)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG3	14	4.21
(1,212)	1:10:A:PRO:HB2	1:11:A:TRP:HB2	6	4.21
(1,212)	1:10:A:PRO:HB2	1:11:A:TRP:HB3	6	4.21
(1,212)	1:10:A:PRO:HB3	1:11:A:TRP:HB2	6	4.21
(1,212)	1:10:A:PRO:HB3	1:11:A:TRP:HB3	6	4.21
(1,181)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG2	14	4.21
(1,181)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG3	14	4.21
(1,28)	1:13:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD2	4	4.21
(1,28)	1:13:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD3	4	4.21
(1,17)	1:6:A:TRP:HB3	1:7:A:LYS:H	9	4.21
(1,290)	1:1:A:ILE:HG21	1:3:A:PRO:HA	14	4.2
(1,290)	1:1:A:ILE:HG22	1:3:A:PRO:HA	14	4.2
(1,290)	1:1:A:ILE:HG23	1:3:A:PRO:HA	14	4.2
(1,279)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HD2	18	4.2
(1,279)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HD3	18	4.2
(1,261)	1:12:A:ARG:HA	1:13:A:ARG:HG3	1	4.2
(1,233)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HB2	3	4.2
(1,233)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HB3	3	4.2
(1,162)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HA	2	4.2
(1,227)	1:7:A:LYS:HB2	1:8:A:TRP:HB2	19	4.19
(1,227)	1:7:A:LYS:HB3	1:8:A:TRP:HB2	19	4.19
(1,110)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:HB2	9	4.19
(1,28)	1:13:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD2	5	4.19
(1,28)	1:13:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD3	5	4.19
(1,296)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG2	6	4.18
(1,296)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG3	6	4.18
(1,189)	1:6:A:TRP:HB3	1:7:A:LYS:HA	17	4.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,181)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG2	6	4.18
(1,181)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG3	6	4.18
(1,304)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:H	15	4.17
(1,304)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:H	15	4.17
(1,304)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:H	15	4.17
(1,304)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:H	16	4.17
(1,304)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:H	16	4.17
(1,304)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:H	16	4.17
(1,290)	1:1:A:ILE:HG21	1:3:A:PRO:HA	11	4.17
(1,290)	1:1:A:ILE:HG22	1:3:A:PRO:HA	11	4.17
(1,290)	1:1:A:ILE:HG23	1:3:A:PRO:HA	11	4.17
(1,274)	1:5:A:LYS:HB2	1:12:A:ARG:HE	11	4.17
(1,274)	1:5:A:LYS:HB3	1:12:A:ARG:HE	11	4.17
(1,261)	1:12:A:ARG:HA	1:13:A:ARG:HG3	5	4.17
(1,161)	1:7:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB2	11	4.17
(1,155)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HD2	12	4.17
(1,155)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HD3	12	4.17
(1,28)	1:13:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD2	2	4.17
(1,28)	1:13:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD3	2	4.17
(1,28)	1:13:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD2	7	4.16
(1,28)	1:13:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD3	7	4.16
(1,290)	1:1:A:ILE:HG21	1:3:A:PRO:HA	17	4.14
(1,290)	1:1:A:ILE:HG22	1:3:A:PRO:HA	17	4.14
(1,290)	1:1:A:ILE:HG23	1:3:A:PRO:HA	17	4.14
(1,313)	1:2:A:LEU:HD11	1:6:A:TRP:HB2	3	4.13
(1,313)	1:2:A:LEU:HD12	1:6:A:TRP:HB2	3	4.13
(1,313)	1:2:A:LEU:HD13	1:6:A:TRP:HB2	3	4.13
(1,313)	1:2:A:LEU:HD21	1:6:A:TRP:HB2	3	4.13
(1,313)	1:2:A:LEU:HD22	1:6:A:TRP:HB2	3	4.13
(1,313)	1:2:A:LEU:HD23	1:6:A:TRP:HB2	3	4.13
(1,290)	1:1:A:ILE:HG21	1:3:A:PRO:HA	13	4.13
(1,290)	1:1:A:ILE:HG22	1:3:A:PRO:HA	13	4.13
(1,290)	1:1:A:ILE:HG23	1:3:A:PRO:HA	13	4.13
(1,28)	1:13:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD2	1	4.13
(1,28)	1:13:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD3	1	4.13
(1,304)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:H	17	4.12
(1,304)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:H	17	4.12
(1,304)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:H	17	4.12
(1,259)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD2	1	4.12
(1,259)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD3	1	4.12
(1,304)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:H	1	4.11
(1,304)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:H	1	4.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,304)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:H	1	4.11
(1,304)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:H	10	4.11
(1,304)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:H	10	4.11
(1,304)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:H	10	4.11
(1,261)	1:12:A:ARG:HA	1:13:A:ARG:HG3	6	4.11
(1,253)	1:5:A:LYS:HB2	1:6:A:TRP:H	17	4.11
(1,253)	1:5:A:LYS:HB3	1:6:A:TRP:H	17	4.11
(1,207)	1:10:A:PRO:HB2	1:12:A:ARG:HA	1	4.11
(1,207)	1:10:A:PRO:HB3	1:12:A:ARG:HA	1	4.11
(1,290)	1:1:A:ILE:HG21	1:3:A:PRO:HA	12	4.1
(1,290)	1:1:A:ILE:HG22	1:3:A:PRO:HA	12	4.1
(1,290)	1:1:A:ILE:HG23	1:3:A:PRO:HA	12	4.1
(1,252)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:H	19	4.1
(1,103)	1:6:A:TRP:H	1:9:A:THR:HG21	18	4.1
(1,103)	1:6:A:TRP:H	1:9:A:THR:HG22	18	4.1
(1,103)	1:6:A:TRP:H	1:9:A:THR:HG23	18	4.1
(1,304)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:H	18	4.09
(1,304)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:H	18	4.09
(1,304)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:H	18	4.09
(1,224)	1:7:A:LYS:HB2	1:8:A:TRP:H	4	4.09
(1,224)	1:7:A:LYS:HB3	1:8:A:TRP:H	4	4.09
(1,120)	1:12:A:ARG:H	1:12:A:ARG:HE	3	4.09
(1,86)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:H	20	4.09
(1,45)	1:7:A:LYS:HB2	1:8:A:TRP:H	4	4.09
(1,45)	1:7:A:LYS:HB3	1:8:A:TRP:H	4	4.09
(1,227)	1:7:A:LYS:HB2	1:8:A:TRP:HB2	5	4.07
(1,227)	1:7:A:LYS:HB3	1:8:A:TRP:HB2	5	4.07
(1,193)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE2	17	4.07
(1,193)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE3	17	4.07
(1,296)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG2	9	4.06
(1,296)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG3	9	4.06
(1,259)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD2	7	4.06
(1,259)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD3	7	4.06
(1,181)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG2	9	4.06
(1,181)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG3	9	4.06
(1,296)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG2	15	4.05
(1,296)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG3	15	4.05
(1,282)	1:9:A:THR:HG21	1:11:A:TRP:H	8	4.05
(1,282)	1:9:A:THR:HG22	1:11:A:TRP:H	8	4.05
(1,282)	1:9:A:THR:HG23	1:11:A:TRP:H	8	4.05
(1,259)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD2	13	4.05
(1,259)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD3	13	4.05

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,237)	1:7:A:LYS:HB2	1:10:A:PRO:HB2	4	4.05
(1,237)	1:7:A:LYS:HB2	1:10:A:PRO:HB3	4	4.05
(1,237)	1:7:A:LYS:HB3	1:10:A:PRO:HB2	4	4.05
(1,237)	1:7:A:LYS:HB3	1:10:A:PRO:HB3	4	4.05
(1,210)	1:7:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB2	15	4.05
(1,210)	1:7:A:LYS:HA	1:10:A:PRO:HB3	15	4.05
(1,181)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG2	15	4.05
(1,181)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG3	15	4.05
(1,140)	1:9:A:THR:HG21	1:11:A:TRP:H	8	4.05
(1,140)	1:9:A:THR:HG22	1:11:A:TRP:H	8	4.05
(1,140)	1:9:A:THR:HG23	1:11:A:TRP:H	8	4.05
(1,261)	1:12:A:ARG:HA	1:13:A:ARG:HG3	2	4.03
(1,247)	1:7:A:LYS:HD2	1:8:A:TRP:H	8	4.03
(1,247)	1:7:A:LYS:HD3	1:8:A:TRP:H	8	4.03
(1,47)	1:7:A:LYS:HD2	1:8:A:TRP:H	8	4.03
(1,47)	1:7:A:LYS:HD3	1:8:A:TRP:H	8	4.03
(1,304)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:H	19	4.02
(1,304)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:H	19	4.02
(1,304)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:H	19	4.02
(1,162)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HA	15	4.02
(1,152)	1:10:A:PRO:HB2	1:12:A:ARG:HE	9	4.02
(1,152)	1:10:A:PRO:HB3	1:12:A:ARG:HE	9	4.02
(1,41)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:H	5	4.01
(1,41)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:H	5	4.01
(1,313)	1:2:A:LEU:HD11	1:6:A:TRP:HB2	16	4.0
(1,313)	1:2:A:LEU:HD12	1:6:A:TRP:HB2	16	4.0
(1,313)	1:2:A:LEU:HD13	1:6:A:TRP:HB2	16	4.0
(1,313)	1:2:A:LEU:HD21	1:6:A:TRP:HB2	16	4.0
(1,313)	1:2:A:LEU:HD22	1:6:A:TRP:HB2	16	4.0
(1,313)	1:2:A:LEU:HD23	1:6:A:TRP:HB2	16	4.0
(1,282)	1:9:A:THR:HG21	1:11:A:TRP:H	9	4.0
(1,282)	1:9:A:THR:HG22	1:11:A:TRP:H	9	4.0
(1,282)	1:9:A:THR:HG23	1:11:A:TRP:H	9	4.0
(1,282)	1:9:A:THR:HG21	1:11:A:TRP:H	17	4.0
(1,282)	1:9:A:THR:HG22	1:11:A:TRP:H	17	4.0
(1,282)	1:9:A:THR:HG23	1:11:A:TRP:H	17	4.0
(1,247)	1:7:A:LYS:HD2	1:8:A:TRP:H	19	4.0
(1,247)	1:7:A:LYS:HD3	1:8:A:TRP:H	19	4.0
(1,245)	1:10:A:PRO:HB2	1:12:A:ARG:HG2	18	4.0
(1,245)	1:10:A:PRO:HB3	1:12:A:ARG:HG2	18	4.0
(1,190)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HA	12	4.0
(1,177)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HA	12	4.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,140)	1:9:A:THR:HG21	1:11:A:TRP:H	9	4.0
(1,140)	1:9:A:THR:HG22	1:11:A:TRP:H	9	4.0
(1,140)	1:9:A:THR:HG23	1:11:A:TRP:H	9	4.0
(1,140)	1:9:A:THR:HG21	1:11:A:TRP:H	17	4.0
(1,140)	1:9:A:THR:HG22	1:11:A:TRP:H	17	4.0
(1,140)	1:9:A:THR:HG23	1:11:A:TRP:H	17	4.0
(1,47)	1:7:A:LYS:HD2	1:8:A:TRP:H	19	4.0
(1,47)	1:7:A:LYS:HD3	1:8:A:TRP:H	19	4.0
(1,17)	1:6:A:TRP:HB3	1:7:A:LYS:H	3	4.0
(1,314)	1:2:A:LEU:HD11	1:4:A:TRP:HB2	7	3.99
(1,314)	1:2:A:LEU:HD12	1:4:A:TRP:HB2	7	3.99
(1,314)	1:2:A:LEU:HD13	1:4:A:TRP:HB2	7	3.99
(1,314)	1:2:A:LEU:HD21	1:4:A:TRP:HB2	7	3.99
(1,314)	1:2:A:LEU:HD22	1:4:A:TRP:HB2	7	3.99
(1,314)	1:2:A:LEU:HD23	1:4:A:TRP:HB2	7	3.99
(1,308)	1:1:A:ILE:HD11	1:3:A:PRO:HA	8	3.99
(1,308)	1:1:A:ILE:HD12	1:3:A:PRO:HA	8	3.99
(1,308)	1:1:A:ILE:HD13	1:3:A:PRO:HA	8	3.99
(1,304)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:H	20	3.99
(1,304)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:H	20	3.99
(1,304)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:H	20	3.99
(1,259)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD2	5	3.99
(1,259)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD3	5	3.99
(1,17)	1:6:A:TRP:HB3	1:7:A:LYS:H	13	3.99
(1,308)	1:1:A:ILE:HD11	1:3:A:PRO:HA	9	3.98
(1,308)	1:1:A:ILE:HD12	1:3:A:PRO:HA	9	3.98
(1,308)	1:1:A:ILE:HD13	1:3:A:PRO:HA	9	3.98
(1,297)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD2	14	3.97
(1,297)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD3	14	3.97
(1,297)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD2	14	3.97
(1,297)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD3	14	3.97
(1,297)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD2	14	3.97
(1,297)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD3	14	3.97
(1,182)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD2	14	3.97
(1,182)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD3	14	3.97
(1,182)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD2	14	3.97
(1,182)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD3	14	3.97
(1,182)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD2	14	3.97
(1,182)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD3	14	3.97
(1,306)	1:2:A:LEU:HD11	1:5:A:LYS:HA	8	3.96
(1,306)	1:2:A:LEU:HD12	1:5:A:LYS:HA	8	3.96
(1,306)	1:2:A:LEU:HD13	1:5:A:LYS:HA	8	3.96

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,306)	1:2:A:LEU:HD21	1:5:A:LYS:HA	8	3.96
(1,306)	1:2:A:LEU:HD22	1:5:A:LYS:HA	8	3.96
(1,306)	1:2:A:LEU:HD23	1:5:A:LYS:HA	8	3.96
(1,227)	1:7:A:LYS:HB2	1:8:A:TRP:HB2	6	3.96
(1,227)	1:7:A:LYS:HB3	1:8:A:TRP:HB2	6	3.96
(1,302)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:HB2	16	3.95
(1,302)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:HB2	16	3.95
(1,302)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:HB2	16	3.95
(1,204)	1:6:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG21	6	3.94
(1,204)	1:6:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG22	6	3.94
(1,204)	1:6:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG23	6	3.94
(1,190)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HA	20	3.94
(1,177)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HA	20	3.94
(1,314)	1:2:A:LEU:HD11	1:4:A:TRP:HB2	18	3.93
(1,314)	1:2:A:LEU:HD12	1:4:A:TRP:HB2	18	3.93
(1,314)	1:2:A:LEU:HD13	1:4:A:TRP:HB2	18	3.93
(1,314)	1:2:A:LEU:HD21	1:4:A:TRP:HB2	18	3.93
(1,314)	1:2:A:LEU:HD22	1:4:A:TRP:HB2	18	3.93
(1,314)	1:2:A:LEU:HD23	1:4:A:TRP:HB2	18	3.93
(1,281)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HE	17	3.93
(1,281)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HE	17	3.93
(1,253)	1:5:A:LYS:HB2	1:6:A:TRP:H	16	3.93
(1,253)	1:5:A:LYS:HB3	1:6:A:TRP:H	16	3.93
(1,224)	1:7:A:LYS:HB2	1:8:A:TRP:H	20	3.93
(1,224)	1:7:A:LYS:HB3	1:8:A:TRP:H	20	3.93
(1,45)	1:7:A:LYS:HB2	1:8:A:TRP:H	20	3.93
(1,45)	1:7:A:LYS:HB3	1:8:A:TRP:H	20	3.93
(1,37)	1:7:A:LYS:HE2	1:8:A:TRP:H	17	3.93
(1,37)	1:7:A:LYS:HE3	1:8:A:TRP:H	17	3.93
(1,10)	1:2:A:LEU:H	1:6:A:TRP:HB2	2	3.93
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD11	7	3.92
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD12	7	3.92
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD13	7	3.92
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD21	7	3.92
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD22	7	3.92
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD23	7	3.92
(1,231)	1:11:A:TRP:HB2	1:13:A:ARG:HG2	5	3.92
(1,231)	1:11:A:TRP:HB3	1:13:A:ARG:HG2	5	3.92
(1,161)	1:7:A:LYS:HA	1:8:A:TRP:HB2	16	3.92
(1,41)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:H	1	3.92
(1,41)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:H	1	3.92
(1,86)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:H	12	3.91

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,86)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:H	19	3.91
(1,41)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:H	14	3.91
(1,41)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:H	14	3.91
(1,269)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HB2	5	3.9
(1,269)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HB3	5	3.9
(1,244)	1:7:A:LYS:HD2	1:10:A:PRO:HB2	10	3.9
(1,244)	1:7:A:LYS:HD2	1:10:A:PRO:HB3	10	3.9
(1,244)	1:7:A:LYS:HD3	1:10:A:PRO:HB2	10	3.9
(1,244)	1:7:A:LYS:HD3	1:10:A:PRO:HB3	10	3.9
(1,41)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:H	8	3.9
(1,41)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:H	8	3.9
(1,41)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:H	12	3.9
(1,41)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:H	12	3.9
(1,247)	1:7:A:LYS:HD2	1:8:A:TRP:H	5	3.89
(1,247)	1:7:A:LYS:HD3	1:8:A:TRP:H	5	3.89
(1,47)	1:7:A:LYS:HD2	1:8:A:TRP:H	5	3.89
(1,47)	1:7:A:LYS:HD3	1:8:A:TRP:H	5	3.89
(1,259)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD2	15	3.88
(1,259)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD3	15	3.88
(1,253)	1:5:A:LYS:HB2	1:6:A:TRP:H	5	3.88
(1,253)	1:5:A:LYS:HB3	1:6:A:TRP:H	5	3.88
(1,259)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD2	10	3.87
(1,259)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD3	10	3.87
(1,199)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:HG21	9	3.87
(1,199)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:HG22	9	3.87
(1,199)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:HG23	9	3.87
(1,199)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:HG21	9	3.87
(1,199)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:HG22	9	3.87
(1,199)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:HG23	9	3.87
(1,160)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HA	6	3.86
(1,160)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HA	6	3.86
(1,187)	1:4:A:TRP:HB3	1:6:A:TRP:H	17	3.85
(1,91)	1:4:A:TRP:HB3	1:6:A:TRP:H	17	3.85
(1,83)	1:4:A:TRP:HB3	1:6:A:TRP:H	17	3.85
(1,41)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:H	10	3.85
(1,41)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:H	10	3.85
(1,279)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HD2	12	3.84
(1,279)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HD3	12	3.84
(1,228)	1:2:A:LEU:HB2	1:4:A:TRP:HB2	7	3.84
(1,227)	1:7:A:LYS:HB2	1:8:A:TRP:HB2	15	3.84
(1,227)	1:7:A:LYS:HB3	1:8:A:TRP:HB2	15	3.84
(1,130)	1:9:A:THR:HB	1:12:A:ARG:HE	6	3.84

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,14)	1:7:A:LYS:H	1:11:A:TRP:H	10	3.84
(1,295)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD2	7	3.83
(1,295)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD3	7	3.83
(1,295)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD2	7	3.83
(1,295)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD3	7	3.83
(1,227)	1:7:A:LYS:HB2	1:8:A:TRP:HB2	3	3.83
(1,227)	1:7:A:LYS:HB3	1:8:A:TRP:HB2	3	3.83
(1,120)	1:12:A:ARG:H	1:12:A:ARG:HE	4	3.83
(1,41)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:H	3	3.83
(1,41)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:H	3	3.83
(1,232)	1:2:A:LEU:HB2	1:6:A:TRP:H	9	3.82
(1,86)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:H	10	3.82
(1,10)	1:2:A:LEU:H	1:6:A:TRP:HB2	9	3.82
(1,296)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG2	2	3.81
(1,296)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG3	2	3.81
(1,292)	1:5:A:LYS:HG2	1:7:A:LYS:HA	19	3.81
(1,292)	1:5:A:LYS:HG3	1:7:A:LYS:HA	19	3.81
(1,181)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG2	2	3.81
(1,181)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HG3	2	3.81
(1,291)	1:7:A:LYS:HA	1:9:A:THR:HG21	12	3.8
(1,291)	1:7:A:LYS:HA	1:9:A:THR:HG22	12	3.8
(1,291)	1:7:A:LYS:HA	1:9:A:THR:HG23	12	3.8
(1,120)	1:12:A:ARG:H	1:12:A:ARG:HE	8	3.8
(1,199)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:HG21	14	3.79
(1,199)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:HG22	14	3.79
(1,199)	1:7:A:LYS:HE2	1:9:A:THR:HG23	14	3.79
(1,199)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:HG21	14	3.79
(1,199)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:HG22	14	3.79
(1,199)	1:7:A:LYS:HE3	1:9:A:THR:HG23	14	3.79
(1,74)	1:9:A:THR:HG21	1:13:A:ARG:HE	10	3.79
(1,74)	1:9:A:THR:HG22	1:13:A:ARG:HE	10	3.79
(1,74)	1:9:A:THR:HG23	1:13:A:ARG:HE	10	3.79
(1,290)	1:1:A:ILE:HG21	1:3:A:PRO:HA	18	3.78
(1,290)	1:1:A:ILE:HG22	1:3:A:PRO:HA	18	3.78
(1,290)	1:1:A:ILE:HG23	1:3:A:PRO:HA	18	3.78
(1,227)	1:7:A:LYS:HB2	1:8:A:TRP:HB2	13	3.78
(1,227)	1:7:A:LYS:HB3	1:8:A:TRP:HB2	13	3.78
(1,17)	1:6:A:TRP:HB3	1:7:A:LYS:H	15	3.78
(1,314)	1:2:A:LEU:HD11	1:4:A:TRP:HB2	12	3.77
(1,314)	1:2:A:LEU:HD12	1:4:A:TRP:HB2	12	3.77
(1,314)	1:2:A:LEU:HD13	1:4:A:TRP:HB2	12	3.77
(1,314)	1:2:A:LEU:HD21	1:4:A:TRP:HB2	12	3.77

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,314)	1:2:A:LEU:HD22	1:4:A:TRP:HB2	12	3.77
(1,314)	1:2:A:LEU:HD23	1:4:A:TRP:HB2	12	3.77
(1,131)	1:7:A:LYS:HE2	1:12:A:ARG:HE	14	3.77
(1,131)	1:7:A:LYS:HE3	1:12:A:ARG:HE	14	3.77
(1,125)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:ARG:HA	17	3.77
(1,108)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE2	1	3.77
(1,108)	1:4:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HE3	1	3.77
(1,190)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HA	19	3.76
(1,177)	1:4:A:TRP:HB3	1:5:A:LYS:HA	19	3.76
(1,245)	1:10:A:PRO:HB2	1:12:A:ARG:HG2	8	3.74
(1,245)	1:10:A:PRO:HB3	1:12:A:ARG:HG2	8	3.74
(1,28)	1:13:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD2	20	3.74
(1,28)	1:13:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD3	20	3.74
(1,302)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:HB2	19	3.73
(1,302)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:HB2	19	3.73
(1,302)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:HB2	19	3.73
(1,297)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD2	11	3.73
(1,297)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD3	11	3.73
(1,297)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD2	11	3.73
(1,297)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD3	11	3.73
(1,297)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD2	11	3.73
(1,297)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD3	11	3.73
(1,187)	1:4:A:TRP:HB3	1:6:A:TRP:H	16	3.73
(1,182)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD2	11	3.73
(1,182)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD3	11	3.73
(1,182)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD2	11	3.73
(1,182)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD3	11	3.73
(1,182)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD2	11	3.73
(1,182)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD3	11	3.73
(1,145)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	4	3.73
(1,145)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HE	4	3.73
(1,91)	1:4:A:TRP:HB3	1:6:A:TRP:H	16	3.73
(1,83)	1:4:A:TRP:HB3	1:6:A:TRP:H	16	3.73
(1,86)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:H	18	3.72
(1,17)	1:6:A:TRP:HB3	1:7:A:LYS:H	14	3.72
(1,235)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HB2	10	3.7
(1,152)	1:10:A:PRO:HB2	1:12:A:ARG:HE	1	3.7
(1,152)	1:10:A:PRO:HB3	1:12:A:ARG:HE	1	3.7
(1,41)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:H	20	3.7
(1,41)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:H	20	3.7
(1,145)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HE	8	3.69
(1,145)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HE	8	3.69

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,10)	1:2:A:LEU:H	1:6:A:TRP:HB2	8	3.68
(1,306)	1:2:A:LEU:HD11	1:5:A:LYS:HA	10	3.67
(1,306)	1:2:A:LEU:HD12	1:5:A:LYS:HA	10	3.67
(1,306)	1:2:A:LEU:HD13	1:5:A:LYS:HA	10	3.67
(1,306)	1:2:A:LEU:HD21	1:5:A:LYS:HA	10	3.67
(1,306)	1:2:A:LEU:HD22	1:5:A:LYS:HA	10	3.67
(1,306)	1:2:A:LEU:HD23	1:5:A:LYS:HA	10	3.67
(1,135)	1:5:A:LYS:HB2	1:12:A:ARG:HE	6	3.67
(1,135)	1:5:A:LYS:HB3	1:12:A:ARG:HE	6	3.67
(1,17)	1:6:A:TRP:HB3	1:7:A:LYS:H	10	3.67
(1,295)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD2	17	3.66
(1,295)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD3	17	3.66
(1,295)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD2	17	3.66
(1,295)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD3	17	3.66
(1,253)	1:5:A:LYS:HB2	1:6:A:TRP:H	9	3.66
(1,253)	1:5:A:LYS:HB3	1:6:A:TRP:H	9	3.66
(1,227)	1:7:A:LYS:HB2	1:8:A:TRP:HB2	18	3.66
(1,227)	1:7:A:LYS:HB3	1:8:A:TRP:HB2	18	3.66
(1,279)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HD2	5	3.65
(1,279)	1:3:A:PRO:HA	1:5:A:LYS:HD3	5	3.65
(1,28)	1:13:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD2	19	3.65
(1,28)	1:13:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD3	19	3.65
(1,306)	1:2:A:LEU:HD11	1:5:A:LYS:HA	19	3.64
(1,306)	1:2:A:LEU:HD12	1:5:A:LYS:HA	19	3.64
(1,306)	1:2:A:LEU:HD13	1:5:A:LYS:HA	19	3.64
(1,306)	1:2:A:LEU:HD21	1:5:A:LYS:HA	19	3.64
(1,306)	1:2:A:LEU:HD22	1:5:A:LYS:HA	19	3.64
(1,306)	1:2:A:LEU:HD23	1:5:A:LYS:HA	19	3.64
(1,282)	1:9:A:THR:HG21	1:11:A:TRP:H	6	3.64
(1,282)	1:9:A:THR:HG22	1:11:A:TRP:H	6	3.64
(1,282)	1:9:A:THR:HG23	1:11:A:TRP:H	6	3.64
(1,228)	1:2:A:LEU:HB2	1:4:A:TRP:HB2	12	3.64
(1,140)	1:9:A:THR:HG21	1:11:A:TRP:H	6	3.64
(1,140)	1:9:A:THR:HG22	1:11:A:TRP:H	6	3.64
(1,140)	1:9:A:THR:HG23	1:11:A:TRP:H	6	3.64
(1,259)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD2	12	3.62
(1,259)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD3	12	3.62
(1,235)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HB2	14	3.61
(1,155)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HD2	7	3.61
(1,155)	1:6:A:TRP:HB2	1:7:A:LYS:HD3	7	3.61
(1,41)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:H	11	3.6
(1,41)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:H	11	3.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,224)	1:7:A:LYS:HB2	1:8:A:TRP:H	11	3.59
(1,224)	1:7:A:LYS:HB3	1:8:A:TRP:H	11	3.59
(1,95)	1:2:A:LEU:HB2	1:6:A:TRP:H	2	3.59
(1,45)	1:7:A:LYS:HB2	1:8:A:TRP:H	11	3.59
(1,45)	1:7:A:LYS:HB3	1:8:A:TRP:H	11	3.59
(1,212)	1:10:A:PRO:HB2	1:11:A:TRP:HB2	11	3.58
(1,212)	1:10:A:PRO:HB2	1:11:A:TRP:HB3	11	3.58
(1,212)	1:10:A:PRO:HB3	1:11:A:TRP:HB2	11	3.58
(1,212)	1:10:A:PRO:HB3	1:11:A:TRP:HB3	11	3.58
(1,86)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:H	3	3.58
(1,28)	1:13:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD2	14	3.56
(1,28)	1:13:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HD3	14	3.56
(1,306)	1:2:A:LEU:HD11	1:5:A:LYS:HA	14	3.55
(1,306)	1:2:A:LEU:HD12	1:5:A:LYS:HA	14	3.55
(1,306)	1:2:A:LEU:HD13	1:5:A:LYS:HA	14	3.55
(1,306)	1:2:A:LEU:HD21	1:5:A:LYS:HA	14	3.55
(1,306)	1:2:A:LEU:HD22	1:5:A:LYS:HA	14	3.55
(1,306)	1:2:A:LEU:HD23	1:5:A:LYS:HA	14	3.55
(1,14)	1:7:A:LYS:H	1:11:A:TRP:H	3	3.54
(1,39)	1:6:A:TRP:HB3	1:8:A:TRP:H	4	3.53
(1,253)	1:5:A:LYS:HB2	1:6:A:TRP:H	7	3.52
(1,253)	1:5:A:LYS:HB3	1:6:A:TRP:H	7	3.52
(1,165)	1:3:A:PRO:HA	1:6:A:TRP:HB2	7	3.52
(1,237)	1:7:A:LYS:HB2	1:10:A:PRO:HB2	3	3.51
(1,237)	1:7:A:LYS:HB2	1:10:A:PRO:HB3	3	3.51
(1,237)	1:7:A:LYS:HB3	1:10:A:PRO:HB2	3	3.51
(1,237)	1:7:A:LYS:HB3	1:10:A:PRO:HB3	3	3.51
(1,235)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HB2	7	3.51
(1,120)	1:12:A:ARG:H	1:12:A:ARG:HE	9	3.51
(1,86)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:H	15	3.51
(1,314)	1:2:A:LEU:HD11	1:4:A:TRP:HB2	13	3.5
(1,314)	1:2:A:LEU:HD12	1:4:A:TRP:HB2	13	3.5
(1,314)	1:2:A:LEU:HD13	1:4:A:TRP:HB2	13	3.5
(1,314)	1:2:A:LEU:HD21	1:4:A:TRP:HB2	13	3.5
(1,314)	1:2:A:LEU:HD22	1:4:A:TRP:HB2	13	3.5
(1,314)	1:2:A:LEU:HD23	1:4:A:TRP:HB2	13	3.5
(1,41)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:H	13	3.5
(1,41)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:H	13	3.5
(1,41)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:H	7	3.48
(1,41)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:H	7	3.48
(1,86)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:H	13	3.47
(1,313)	1:2:A:LEU:HD11	1:6:A:TRP:HB2	20	3.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,313)	1:2:A:LEU:HD12	1:6:A:TRP:HB2	20	3.46
(1,313)	1:2:A:LEU:HD13	1:6:A:TRP:HB2	20	3.46
(1,313)	1:2:A:LEU:HD21	1:6:A:TRP:HB2	20	3.46
(1,313)	1:2:A:LEU:HD22	1:6:A:TRP:HB2	20	3.46
(1,313)	1:2:A:LEU:HD23	1:6:A:TRP:HB2	20	3.46
(1,253)	1:5:A:LYS:HB2	1:6:A:TRP:H	1	3.46
(1,253)	1:5:A:LYS:HB3	1:6:A:TRP:H	1	3.46
(1,180)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD2	7	3.45
(1,180)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD3	7	3.45
(1,180)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD2	7	3.45
(1,180)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD3	7	3.45
(1,212)	1:10:A:PRO:HB2	1:11:A:TRP:HB2	10	3.44
(1,212)	1:10:A:PRO:HB2	1:11:A:TRP:HB3	10	3.44
(1,212)	1:10:A:PRO:HB3	1:11:A:TRP:HB2	10	3.44
(1,212)	1:10:A:PRO:HB3	1:11:A:TRP:HB3	10	3.44
(1,17)	1:6:A:TRP:HB3	1:7:A:LYS:H	12	3.44
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD11	6	3.43
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD12	6	3.43
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD13	6	3.43
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD21	6	3.43
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD22	6	3.43
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD23	6	3.43
(1,224)	1:7:A:LYS:HB2	1:8:A:TRP:H	13	3.43
(1,224)	1:7:A:LYS:HB3	1:8:A:TRP:H	13	3.43
(1,214)	1:6:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB2	3	3.43
(1,214)	1:6:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB3	3	3.43
(1,45)	1:7:A:LYS:HB2	1:8:A:TRP:H	13	3.43
(1,45)	1:7:A:LYS:HB3	1:8:A:TRP:H	13	3.43
(1,253)	1:5:A:LYS:HB2	1:6:A:TRP:H	2	3.42
(1,253)	1:5:A:LYS:HB3	1:6:A:TRP:H	2	3.42
(1,17)	1:6:A:TRP:HB3	1:7:A:LYS:H	6	3.41
(1,227)	1:7:A:LYS:HB2	1:8:A:TRP:HB2	7	3.39
(1,227)	1:7:A:LYS:HB3	1:8:A:TRP:HB2	7	3.39
(1,17)	1:6:A:TRP:HB3	1:7:A:LYS:H	7	3.38
(1,235)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HB2	12	3.36
(1,41)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:H	16	3.36
(1,41)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:H	16	3.36
(1,235)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HB2	8	3.35
(1,120)	1:12:A:ARG:H	1:12:A:ARG:HE	20	3.34
(1,282)	1:9:A:THR:HG21	1:11:A:TRP:H	15	3.32
(1,282)	1:9:A:THR:HG22	1:11:A:TRP:H	15	3.32
(1,282)	1:9:A:THR:HG23	1:11:A:TRP:H	15	3.32

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,224)	1:7:A:LYS:HB2	1:8:A:TRP:H	12	3.32
(1,224)	1:7:A:LYS:HB3	1:8:A:TRP:H	12	3.32
(1,140)	1:9:A:THR:HG21	1:11:A:TRP:H	15	3.32
(1,140)	1:9:A:THR:HG22	1:11:A:TRP:H	15	3.32
(1,140)	1:9:A:THR:HG23	1:11:A:TRP:H	15	3.32
(1,45)	1:7:A:LYS:HB2	1:8:A:TRP:H	12	3.32
(1,45)	1:7:A:LYS:HB3	1:8:A:TRP:H	12	3.32
(1,235)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HB2	20	3.3
(1,41)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:H	2	3.3
(1,41)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:H	2	3.3
(1,224)	1:7:A:LYS:HB2	1:8:A:TRP:H	9	3.28
(1,224)	1:7:A:LYS:HB3	1:8:A:TRP:H	9	3.28
(1,180)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD2	17	3.28
(1,180)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD3	17	3.28
(1,180)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD2	17	3.28
(1,180)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD3	17	3.28
(1,45)	1:7:A:LYS:HB2	1:8:A:TRP:H	9	3.28
(1,45)	1:7:A:LYS:HB3	1:8:A:TRP:H	9	3.28
(1,235)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HB2	1	3.27
(1,235)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HB2	2	3.27
(1,86)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:H	14	3.27
(1,231)	1:11:A:TRP:HB2	1:13:A:ARG:HG2	7	3.26
(1,231)	1:11:A:TRP:HB3	1:13:A:ARG:HG2	7	3.26
(1,41)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:H	18	3.25
(1,41)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:H	18	3.25
(1,314)	1:2:A:LEU:HD11	1:4:A:TRP:HB2	17	3.24
(1,314)	1:2:A:LEU:HD12	1:4:A:TRP:HB2	17	3.24
(1,314)	1:2:A:LEU:HD13	1:4:A:TRP:HB2	17	3.24
(1,314)	1:2:A:LEU:HD21	1:4:A:TRP:HB2	17	3.24
(1,314)	1:2:A:LEU:HD22	1:4:A:TRP:HB2	17	3.24
(1,314)	1:2:A:LEU:HD23	1:4:A:TRP:HB2	17	3.24
(1,288)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HA	14	3.23
(1,288)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HA	14	3.23
(1,288)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HA	14	3.23
(1,235)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HB2	6	3.23
(1,235)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HB2	18	3.23
(1,95)	1:2:A:LEU:HB2	1:6:A:TRP:H	7	3.23
(1,68)	1:11:A:TRP:HB2	1:13:A:ARG:HE	11	3.2
(1,68)	1:11:A:TRP:HB3	1:13:A:ARG:HE	11	3.2
(1,224)	1:7:A:LYS:HB2	1:8:A:TRP:H	6	3.19
(1,224)	1:7:A:LYS:HB3	1:8:A:TRP:H	6	3.19
(1,153)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:HB2	2	3.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,45)	1:7:A:LYS:HB2	1:8:A:TRP:H	6	3.19
(1,45)	1:7:A:LYS:HB3	1:8:A:TRP:H	6	3.19
(1,212)	1:10:A:PRO:HB2	1:11:A:TRP:HB2	14	3.18
(1,212)	1:10:A:PRO:HB2	1:11:A:TRP:HB3	14	3.18
(1,212)	1:10:A:PRO:HB3	1:11:A:TRP:HB2	14	3.18
(1,212)	1:10:A:PRO:HB3	1:11:A:TRP:HB3	14	3.18
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD11	9	3.17
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD12	9	3.17
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD13	9	3.17
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD21	9	3.17
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD22	9	3.17
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD23	9	3.17
(1,259)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD2	20	3.16
(1,259)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD3	20	3.16
(1,232)	1:2:A:LEU:HB2	1:6:A:TRP:H	2	3.16
(1,231)	1:11:A:TRP:HB2	1:13:A:ARG:HG2	1	3.16
(1,231)	1:11:A:TRP:HB3	1:13:A:ARG:HG2	1	3.16
(1,252)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:H	14	3.15
(1,297)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD2	6	3.14
(1,297)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD3	6	3.14
(1,297)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD2	6	3.14
(1,297)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD3	6	3.14
(1,297)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD2	6	3.14
(1,297)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD3	6	3.14
(1,182)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD2	6	3.14
(1,182)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HD3	6	3.14
(1,182)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD2	6	3.14
(1,182)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HD3	6	3.14
(1,182)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD2	6	3.14
(1,182)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HD3	6	3.14
(1,156)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HG2	4	3.14
(1,156)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HG2	4	3.14
(1,314)	1:2:A:LEU:HD11	1:4:A:TRP:HB2	2	3.13
(1,314)	1:2:A:LEU:HD12	1:4:A:TRP:HB2	2	3.13
(1,314)	1:2:A:LEU:HD13	1:4:A:TRP:HB2	2	3.13
(1,314)	1:2:A:LEU:HD21	1:4:A:TRP:HB2	2	3.13
(1,314)	1:2:A:LEU:HD22	1:4:A:TRP:HB2	2	3.13
(1,314)	1:2:A:LEU:HD23	1:4:A:TRP:HB2	2	3.13
(1,314)	1:2:A:LEU:HD11	1:4:A:TRP:HB2	8	3.13
(1,314)	1:2:A:LEU:HD12	1:4:A:TRP:HB2	8	3.13
(1,314)	1:2:A:LEU:HD13	1:4:A:TRP:HB2	8	3.13
(1,314)	1:2:A:LEU:HD21	1:4:A:TRP:HB2	8	3.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,314)	1:2:A:LEU:HD22	1:4:A:TRP:HB2	8	3.13
(1,314)	1:2:A:LEU:HD23	1:4:A:TRP:HB2	8	3.13
(1,245)	1:10:A:PRO:HB2	1:12:A:ARG:HG2	1	3.13
(1,245)	1:10:A:PRO:HB3	1:12:A:ARG:HG2	1	3.13
(1,41)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:H	15	3.13
(1,41)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:H	15	3.13
(1,314)	1:2:A:LEU:HD11	1:4:A:TRP:HB2	4	3.09
(1,314)	1:2:A:LEU:HD12	1:4:A:TRP:HB2	4	3.09
(1,314)	1:2:A:LEU:HD13	1:4:A:TRP:HB2	4	3.09
(1,314)	1:2:A:LEU:HD21	1:4:A:TRP:HB2	4	3.09
(1,314)	1:2:A:LEU:HD22	1:4:A:TRP:HB2	4	3.09
(1,314)	1:2:A:LEU:HD23	1:4:A:TRP:HB2	4	3.09
(1,120)	1:12:A:ARG:H	1:12:A:ARG:HE	15	3.07
(1,224)	1:7:A:LYS:HB2	1:8:A:TRP:H	14	3.06
(1,224)	1:7:A:LYS:HB3	1:8:A:TRP:H	14	3.06
(1,45)	1:7:A:LYS:HB2	1:8:A:TRP:H	14	3.06
(1,45)	1:7:A:LYS:HB3	1:8:A:TRP:H	14	3.06
(1,253)	1:5:A:LYS:HB2	1:6:A:TRP:H	8	3.05
(1,253)	1:5:A:LYS:HB3	1:6:A:TRP:H	8	3.05
(1,117)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HG2	17	3.05
(1,117)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HG3	17	3.05
(1,224)	1:7:A:LYS:HB2	1:8:A:TRP:H	18	3.04
(1,224)	1:7:A:LYS:HB3	1:8:A:TRP:H	18	3.04
(1,94)	1:6:A:TRP:H	1:10:A:PRO:HB2	3	3.04
(1,94)	1:6:A:TRP:H	1:10:A:PRO:HB3	3	3.04
(1,45)	1:7:A:LYS:HB2	1:8:A:TRP:H	18	3.04
(1,45)	1:7:A:LYS:HB3	1:8:A:TRP:H	18	3.04
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD11	12	3.02
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD12	12	3.02
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD13	12	3.02
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD21	12	3.02
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD22	12	3.02
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD23	12	3.02
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD11	14	3.01
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD12	14	3.01
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD13	14	3.01
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD21	14	3.01
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD22	14	3.01
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD23	14	3.01
(1,154)	1:2:A:LEU:HB3	1:4:A:TRP:HB2	18	2.98
(1,221)	1:7:A:LYS:HB2	1:7:A:LYS:HD2	3	2.96
(1,221)	1:7:A:LYS:HB2	1:7:A:LYS:HD3	3	2.96

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,221)	1:7:A:LYS:HB3	1:7:A:LYS:HD2	3	2.96
(1,221)	1:7:A:LYS:HB3	1:7:A:LYS:HD3	3	2.96
(1,245)	1:10:A:PRO:HB2	1:12:A:ARG:HG2	5	2.94
(1,245)	1:10:A:PRO:HB3	1:12:A:ARG:HG2	5	2.94
(1,156)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:HG2	19	2.9
(1,156)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:HG2	19	2.9
(1,226)	1:2:A:LEU:HB2	1:6:A:TRP:HB2	7	2.89
(1,224)	1:7:A:LYS:HB2	1:8:A:TRP:H	10	2.89
(1,224)	1:7:A:LYS:HB3	1:8:A:TRP:H	10	2.89
(1,45)	1:7:A:LYS:HB2	1:8:A:TRP:H	10	2.89
(1,45)	1:7:A:LYS:HB3	1:8:A:TRP:H	10	2.89
(1,224)	1:7:A:LYS:HB2	1:8:A:TRP:H	2	2.87
(1,224)	1:7:A:LYS:HB3	1:8:A:TRP:H	2	2.87
(1,95)	1:2:A:LEU:HB2	1:6:A:TRP:H	8	2.87
(1,45)	1:7:A:LYS:HB2	1:8:A:TRP:H	2	2.87
(1,45)	1:7:A:LYS:HB3	1:8:A:TRP:H	2	2.87
(1,274)	1:5:A:LYS:HB2	1:12:A:ARG:HE	6	2.84
(1,274)	1:5:A:LYS:HB3	1:12:A:ARG:HE	6	2.84
(1,221)	1:7:A:LYS:HB2	1:7:A:LYS:HD2	7	2.84
(1,221)	1:7:A:LYS:HB2	1:7:A:LYS:HD3	7	2.84
(1,221)	1:7:A:LYS:HB3	1:7:A:LYS:HD2	7	2.84
(1,221)	1:7:A:LYS:HB3	1:7:A:LYS:HD3	7	2.84
(1,231)	1:11:A:TRP:HB2	1:13:A:ARG:HG2	11	2.83
(1,231)	1:11:A:TRP:HB3	1:13:A:ARG:HG2	11	2.83
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD11	5	2.82
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD12	5	2.82
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD13	5	2.82
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD21	5	2.82
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD22	5	2.82
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD23	5	2.82
(1,224)	1:7:A:LYS:HB2	1:8:A:TRP:H	1	2.82
(1,224)	1:7:A:LYS:HB3	1:8:A:TRP:H	1	2.82
(1,154)	1:2:A:LEU:HB3	1:4:A:TRP:HB2	12	2.82
(1,45)	1:7:A:LYS:HB2	1:8:A:TRP:H	1	2.82
(1,45)	1:7:A:LYS:HB3	1:8:A:TRP:H	1	2.82
(1,224)	1:7:A:LYS:HB2	1:8:A:TRP:H	16	2.81
(1,224)	1:7:A:LYS:HB3	1:8:A:TRP:H	16	2.81
(1,193)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE2	3	2.81
(1,193)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HE3	3	2.81
(1,45)	1:7:A:LYS:HB2	1:8:A:TRP:H	16	2.81
(1,45)	1:7:A:LYS:HB3	1:8:A:TRP:H	16	2.81
(1,232)	1:2:A:LEU:HB2	1:6:A:TRP:H	7	2.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,224)	1:7:A:LYS:HB2	1:8:A:TRP:H	15	2.8
(1,224)	1:7:A:LYS:HB3	1:8:A:TRP:H	15	2.8
(1,45)	1:7:A:LYS:HB2	1:8:A:TRP:H	15	2.8
(1,45)	1:7:A:LYS:HB3	1:8:A:TRP:H	15	2.8
(1,86)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:H	4	2.78
(1,314)	1:2:A:LEU:HD11	1:4:A:TRP:HB2	11	2.77
(1,314)	1:2:A:LEU:HD12	1:4:A:TRP:HB2	11	2.77
(1,314)	1:2:A:LEU:HD13	1:4:A:TRP:HB2	11	2.77
(1,314)	1:2:A:LEU:HD21	1:4:A:TRP:HB2	11	2.77
(1,314)	1:2:A:LEU:HD22	1:4:A:TRP:HB2	11	2.77
(1,314)	1:2:A:LEU:HD23	1:4:A:TRP:HB2	11	2.77
(1,153)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:HB2	7	2.76
(1,282)	1:9:A:THR:HG21	1:11:A:TRP:H	3	2.75
(1,282)	1:9:A:THR:HG22	1:11:A:TRP:H	3	2.75
(1,282)	1:9:A:THR:HG23	1:11:A:TRP:H	3	2.75
(1,140)	1:9:A:THR:HG21	1:11:A:TRP:H	3	2.75
(1,140)	1:9:A:THR:HG22	1:11:A:TRP:H	3	2.75
(1,140)	1:9:A:THR:HG23	1:11:A:TRP:H	3	2.75
(1,86)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:H	8	2.75
(1,41)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:H	17	2.75
(1,41)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:H	17	2.75
(1,313)	1:2:A:LEU:HD11	1:6:A:TRP:HB2	14	2.72
(1,313)	1:2:A:LEU:HD12	1:6:A:TRP:HB2	14	2.72
(1,313)	1:2:A:LEU:HD13	1:6:A:TRP:HB2	14	2.72
(1,313)	1:2:A:LEU:HD21	1:6:A:TRP:HB2	14	2.72
(1,313)	1:2:A:LEU:HD22	1:6:A:TRP:HB2	14	2.72
(1,313)	1:2:A:LEU:HD23	1:6:A:TRP:HB2	14	2.72
(1,86)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:H	6	2.72
(1,42)	1:6:A:TRP:HB2	1:8:A:TRP:H	13	2.72
(1,41)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:H	19	2.72
(1,41)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:H	19	2.72
(1,313)	1:2:A:LEU:HD11	1:6:A:TRP:HB2	9	2.71
(1,313)	1:2:A:LEU:HD12	1:6:A:TRP:HB2	9	2.71
(1,313)	1:2:A:LEU:HD13	1:6:A:TRP:HB2	9	2.71
(1,313)	1:2:A:LEU:HD21	1:6:A:TRP:HB2	9	2.71
(1,313)	1:2:A:LEU:HD22	1:6:A:TRP:HB2	9	2.71
(1,313)	1:2:A:LEU:HD23	1:6:A:TRP:HB2	9	2.71
(1,295)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD2	11	2.71
(1,295)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD3	11	2.71
(1,295)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD2	11	2.71
(1,295)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD3	11	2.71
(1,154)	1:2:A:LEU:HB3	1:4:A:TRP:HB2	7	2.71

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,214)	1:6:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB2	15	2.7
(1,214)	1:6:A:TRP:HB2	1:10:A:PRO:HB3	15	2.7
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD11	10	2.69
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD12	10	2.69
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD13	10	2.69
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD21	10	2.69
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD22	10	2.69
(1,321)	1:1:A:ILE:HA	1:2:A:LEU:HD23	10	2.69
(1,235)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HB2	11	2.68
(1,253)	1:5:A:LYS:HB2	1:6:A:TRP:H	20	2.63
(1,253)	1:5:A:LYS:HB3	1:6:A:TRP:H	20	2.63
(1,231)	1:11:A:TRP:HB2	1:13:A:ARG:HG2	20	2.63
(1,231)	1:11:A:TRP:HB3	1:13:A:ARG:HG2	20	2.63
(1,237)	1:7:A:LYS:HB2	1:10:A:PRO:HB2	19	2.61
(1,237)	1:7:A:LYS:HB2	1:10:A:PRO:HB3	19	2.61
(1,237)	1:7:A:LYS:HB3	1:10:A:PRO:HB2	19	2.61
(1,237)	1:7:A:LYS:HB3	1:10:A:PRO:HB3	19	2.61
(1,235)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HB2	13	2.61
(1,41)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:H	9	2.61
(1,41)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:H	9	2.61
(1,235)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HB2	4	2.6
(1,221)	1:7:A:LYS:HB2	1:7:A:LYS:HD2	2	2.6
(1,221)	1:7:A:LYS:HB2	1:7:A:LYS:HD3	2	2.6
(1,221)	1:7:A:LYS:HB3	1:7:A:LYS:HD2	2	2.6
(1,221)	1:7:A:LYS:HB3	1:7:A:LYS:HD3	2	2.6
(1,221)	1:7:A:LYS:HB2	1:7:A:LYS:HD2	10	2.6
(1,221)	1:7:A:LYS:HB2	1:7:A:LYS:HD3	10	2.6
(1,221)	1:7:A:LYS:HB3	1:7:A:LYS:HD2	10	2.6
(1,221)	1:7:A:LYS:HB3	1:7:A:LYS:HD3	10	2.6
(1,249)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD2	18	2.59
(1,249)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD3	18	2.59
(1,249)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD2	14	2.58
(1,249)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD3	14	2.58
(1,259)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD2	2	2.57
(1,259)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD3	2	2.57
(1,224)	1:7:A:LYS:HB2	1:8:A:TRP:H	7	2.57
(1,224)	1:7:A:LYS:HB3	1:8:A:TRP:H	7	2.57
(1,45)	1:7:A:LYS:HB2	1:8:A:TRP:H	7	2.57
(1,45)	1:7:A:LYS:HB3	1:8:A:TRP:H	7	2.57
(1,235)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HB2	17	2.56
(1,41)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:H	4	2.55
(1,41)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:H	4	2.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,17)	1:6:A:TRP:HB3	1:7:A:LYS:H	2	2.55
(1,253)	1:5:A:LYS:HB2	1:6:A:TRP:H	11	2.54
(1,253)	1:5:A:LYS:HB3	1:6:A:TRP:H	11	2.54
(1,95)	1:2:A:LEU:HB2	1:6:A:TRP:H	14	2.53
(1,314)	1:2:A:LEU:HD11	1:4:A:TRP:HB2	19	2.52
(1,314)	1:2:A:LEU:HD12	1:4:A:TRP:HB2	19	2.52
(1,314)	1:2:A:LEU:HD13	1:4:A:TRP:HB2	19	2.52
(1,314)	1:2:A:LEU:HD21	1:4:A:TRP:HB2	19	2.52
(1,314)	1:2:A:LEU:HD22	1:4:A:TRP:HB2	19	2.52
(1,314)	1:2:A:LEU:HD23	1:4:A:TRP:HB2	19	2.52
(1,252)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:H	9	2.52
(1,253)	1:5:A:LYS:HB2	1:6:A:TRP:H	18	2.51
(1,253)	1:5:A:LYS:HB3	1:6:A:TRP:H	18	2.51
(1,253)	1:5:A:LYS:HB2	1:6:A:TRP:H	13	2.5
(1,253)	1:5:A:LYS:HB3	1:6:A:TRP:H	13	2.5
(1,253)	1:5:A:LYS:HB2	1:6:A:TRP:H	3	2.49
(1,253)	1:5:A:LYS:HB3	1:6:A:TRP:H	3	2.49
(1,313)	1:2:A:LEU:HD11	1:6:A:TRP:HB2	10	2.48
(1,313)	1:2:A:LEU:HD12	1:6:A:TRP:HB2	10	2.48
(1,313)	1:2:A:LEU:HD13	1:6:A:TRP:HB2	10	2.48
(1,313)	1:2:A:LEU:HD21	1:6:A:TRP:HB2	10	2.48
(1,313)	1:2:A:LEU:HD22	1:6:A:TRP:HB2	10	2.48
(1,313)	1:2:A:LEU:HD23	1:6:A:TRP:HB2	10	2.48
(1,253)	1:5:A:LYS:HB2	1:6:A:TRP:H	15	2.48
(1,253)	1:5:A:LYS:HB3	1:6:A:TRP:H	15	2.48
(1,221)	1:7:A:LYS:HB2	1:7:A:LYS:HD2	8	2.48
(1,221)	1:7:A:LYS:HB2	1:7:A:LYS:HD3	8	2.48
(1,221)	1:7:A:LYS:HB3	1:7:A:LYS:HD2	8	2.48
(1,221)	1:7:A:LYS:HB3	1:7:A:LYS:HD3	8	2.48
(1,245)	1:10:A:PRO:HB2	1:12:A:ARG:HG2	12	2.47
(1,245)	1:10:A:PRO:HB3	1:12:A:ARG:HG2	12	2.47
(1,114)	1:2:A:LEU:HB3	1:4:A:TRP:H	6	2.47
(1,14)	1:7:A:LYS:H	1:11:A:TRP:H	15	2.46
(1,259)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD2	19	2.45
(1,259)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD3	19	2.45
(1,253)	1:5:A:LYS:HB2	1:6:A:TRP:H	19	2.45
(1,253)	1:5:A:LYS:HB3	1:6:A:TRP:H	19	2.45
(1,232)	1:2:A:LEU:HB2	1:6:A:TRP:H	8	2.44
(1,231)	1:11:A:TRP:HB2	1:13:A:ARG:HG2	17	2.44
(1,231)	1:11:A:TRP:HB3	1:13:A:ARG:HG2	17	2.44
(1,221)	1:7:A:LYS:HB2	1:7:A:LYS:HD2	19	2.44
(1,221)	1:7:A:LYS:HB2	1:7:A:LYS:HD3	19	2.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,221)	1:7:A:LYS:HB3	1:7:A:LYS:HD2	19	2.44
(1,221)	1:7:A:LYS:HB3	1:7:A:LYS:HD3	19	2.44
(1,259)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD2	8	2.43
(1,259)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD3	8	2.43
(1,86)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:H	2	2.43
(1,313)	1:2:A:LEU:HD11	1:6:A:TRP:HB2	17	2.42
(1,313)	1:2:A:LEU:HD12	1:6:A:TRP:HB2	17	2.42
(1,313)	1:2:A:LEU:HD13	1:6:A:TRP:HB2	17	2.42
(1,313)	1:2:A:LEU:HD21	1:6:A:TRP:HB2	17	2.42
(1,313)	1:2:A:LEU:HD22	1:6:A:TRP:HB2	17	2.42
(1,313)	1:2:A:LEU:HD23	1:6:A:TRP:HB2	17	2.42
(1,221)	1:7:A:LYS:HB2	1:7:A:LYS:HD2	11	2.42
(1,221)	1:7:A:LYS:HB2	1:7:A:LYS:HD3	11	2.42
(1,221)	1:7:A:LYS:HB3	1:7:A:LYS:HD2	11	2.42
(1,221)	1:7:A:LYS:HB3	1:7:A:LYS:HD3	11	2.42
(1,117)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HG2	7	2.41
(1,117)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HG3	7	2.41
(1,314)	1:2:A:LEU:HD11	1:4:A:TRP:HB2	20	2.4
(1,314)	1:2:A:LEU:HD12	1:4:A:TRP:HB2	20	2.4
(1,314)	1:2:A:LEU:HD13	1:4:A:TRP:HB2	20	2.4
(1,314)	1:2:A:LEU:HD21	1:4:A:TRP:HB2	20	2.4
(1,314)	1:2:A:LEU:HD22	1:4:A:TRP:HB2	20	2.4
(1,314)	1:2:A:LEU:HD23	1:4:A:TRP:HB2	20	2.4
(1,221)	1:7:A:LYS:HB2	1:7:A:LYS:HD2	17	2.39
(1,221)	1:7:A:LYS:HB2	1:7:A:LYS:HD3	17	2.39
(1,221)	1:7:A:LYS:HB3	1:7:A:LYS:HD2	17	2.39
(1,221)	1:7:A:LYS:HB3	1:7:A:LYS:HD3	17	2.39
(1,221)	1:7:A:LYS:HB2	1:7:A:LYS:HD2	20	2.39
(1,221)	1:7:A:LYS:HB2	1:7:A:LYS:HD3	20	2.39
(1,221)	1:7:A:LYS:HB3	1:7:A:LYS:HD2	20	2.39
(1,221)	1:7:A:LYS:HB3	1:7:A:LYS:HD3	20	2.39
(1,117)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HG2	19	2.39
(1,117)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HG3	19	2.39
(1,249)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD2	6	2.38
(1,249)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD3	6	2.38
(1,117)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HG2	14	2.38
(1,117)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HG3	14	2.38
(1,221)	1:7:A:LYS:HB2	1:7:A:LYS:HD2	9	2.37
(1,221)	1:7:A:LYS:HB2	1:7:A:LYS:HD3	9	2.37
(1,221)	1:7:A:LYS:HB3	1:7:A:LYS:HD2	9	2.37
(1,221)	1:7:A:LYS:HB3	1:7:A:LYS:HD3	9	2.37
(1,252)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:H	10	2.36

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,221)	1:7:A:LYS:HB2	1:7:A:LYS:HD2	18	2.36
(1,221)	1:7:A:LYS:HB2	1:7:A:LYS:HD3	18	2.36
(1,221)	1:7:A:LYS:HB3	1:7:A:LYS:HD2	18	2.36
(1,221)	1:7:A:LYS:HB3	1:7:A:LYS:HD3	18	2.36
(1,221)	1:7:A:LYS:HB2	1:7:A:LYS:HD2	13	2.35
(1,221)	1:7:A:LYS:HB2	1:7:A:LYS:HD3	13	2.35
(1,221)	1:7:A:LYS:HB3	1:7:A:LYS:HD2	13	2.35
(1,221)	1:7:A:LYS:HB3	1:7:A:LYS:HD3	13	2.35
(1,129)	1:9:A:THR:HB	1:11:A:TRP:H	7	2.35
(1,235)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HB2	15	2.34
(1,221)	1:7:A:LYS:HB2	1:7:A:LYS:HD2	12	2.34
(1,221)	1:7:A:LYS:HB2	1:7:A:LYS:HD3	12	2.34
(1,221)	1:7:A:LYS:HB3	1:7:A:LYS:HD2	12	2.34
(1,221)	1:7:A:LYS:HB3	1:7:A:LYS:HD3	12	2.34
(1,41)	1:11:A:TRP:HB2	1:12:A:ARG:H	6	2.34
(1,41)	1:11:A:TRP:HB3	1:12:A:ARG:H	6	2.34
(1,180)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD2	11	2.33
(1,180)	1:5:A:LYS:HG2	1:12:A:ARG:HD3	11	2.33
(1,180)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD2	11	2.33
(1,180)	1:5:A:LYS:HG3	1:12:A:ARG:HD3	11	2.33
(1,235)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HB2	3	2.31
(1,249)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD2	13	2.28
(1,249)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD3	13	2.28
(1,224)	1:7:A:LYS:HB2	1:8:A:TRP:H	17	2.28
(1,224)	1:7:A:LYS:HB3	1:8:A:TRP:H	17	2.28
(1,45)	1:7:A:LYS:HB2	1:8:A:TRP:H	17	2.28
(1,45)	1:7:A:LYS:HB3	1:8:A:TRP:H	17	2.28
(1,313)	1:2:A:LEU:HD11	1:6:A:TRP:HB2	7	2.27
(1,313)	1:2:A:LEU:HD12	1:6:A:TRP:HB2	7	2.27
(1,313)	1:2:A:LEU:HD13	1:6:A:TRP:HB2	7	2.27
(1,313)	1:2:A:LEU:HD21	1:6:A:TRP:HB2	7	2.27
(1,313)	1:2:A:LEU:HD22	1:6:A:TRP:HB2	7	2.27
(1,313)	1:2:A:LEU:HD23	1:6:A:TRP:HB2	7	2.27
(1,221)	1:7:A:LYS:HB2	1:7:A:LYS:HD2	4	2.26
(1,221)	1:7:A:LYS:HB2	1:7:A:LYS:HD3	4	2.26
(1,221)	1:7:A:LYS:HB3	1:7:A:LYS:HD2	4	2.26
(1,221)	1:7:A:LYS:HB3	1:7:A:LYS:HD3	4	2.26
(1,17)	1:6:A:TRP:HB3	1:7:A:LYS:H	17	2.26
(1,129)	1:9:A:THR:HB	1:11:A:TRP:H	10	2.25
(1,221)	1:7:A:LYS:HB2	1:7:A:LYS:HD2	15	2.23
(1,221)	1:7:A:LYS:HB2	1:7:A:LYS:HD3	15	2.23
(1,221)	1:7:A:LYS:HB3	1:7:A:LYS:HD2	15	2.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,221)	1:7:A:LYS:HB3	1:7:A:LYS:HD3	15	2.23
(1,86)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:H	16	2.23
(1,117)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HG2	20	2.2
(1,117)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HG3	20	2.2
(1,10)	1:2:A:LEU:H	1:6:A:TRP:HB2	7	2.2
(1,259)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD2	3	2.19
(1,259)	1:7:A:LYS:HA	1:7:A:LYS:HD3	3	2.19
(1,221)	1:7:A:LYS:HB2	1:7:A:LYS:HD2	6	2.17
(1,221)	1:7:A:LYS:HB2	1:7:A:LYS:HD3	6	2.17
(1,221)	1:7:A:LYS:HB3	1:7:A:LYS:HD2	6	2.17
(1,221)	1:7:A:LYS:HB3	1:7:A:LYS:HD3	6	2.17
(1,129)	1:9:A:THR:HB	1:11:A:TRP:H	1	2.17
(1,249)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD2	5	2.16
(1,249)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD3	5	2.16
(1,224)	1:7:A:LYS:HB2	1:8:A:TRP:H	3	2.16
(1,224)	1:7:A:LYS:HB3	1:8:A:TRP:H	3	2.16
(1,221)	1:7:A:LYS:HB2	1:7:A:LYS:HD2	16	2.16
(1,221)	1:7:A:LYS:HB2	1:7:A:LYS:HD3	16	2.16
(1,221)	1:7:A:LYS:HB3	1:7:A:LYS:HD2	16	2.16
(1,221)	1:7:A:LYS:HB3	1:7:A:LYS:HD3	16	2.16
(1,45)	1:7:A:LYS:HB2	1:8:A:TRP:H	3	2.16
(1,45)	1:7:A:LYS:HB3	1:8:A:TRP:H	3	2.16
(1,221)	1:7:A:LYS:HB2	1:7:A:LYS:HD2	14	2.15
(1,221)	1:7:A:LYS:HB2	1:7:A:LYS:HD3	14	2.15
(1,221)	1:7:A:LYS:HB3	1:7:A:LYS:HD2	14	2.15
(1,221)	1:7:A:LYS:HB3	1:7:A:LYS:HD3	14	2.15
(1,86)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:H	1	2.14
(1,304)	1:1:A:ILE:HD11	1:2:A:LEU:H	8	2.13
(1,304)	1:1:A:ILE:HD12	1:2:A:LEU:H	8	2.13
(1,304)	1:1:A:ILE:HD13	1:2:A:LEU:H	8	2.13
(1,221)	1:7:A:LYS:HB2	1:7:A:LYS:HD2	1	2.13
(1,221)	1:7:A:LYS:HB2	1:7:A:LYS:HD3	1	2.13
(1,221)	1:7:A:LYS:HB3	1:7:A:LYS:HD2	1	2.13
(1,221)	1:7:A:LYS:HB3	1:7:A:LYS:HD3	1	2.13
(1,221)	1:7:A:LYS:HB2	1:7:A:LYS:HD2	5	2.13
(1,221)	1:7:A:LYS:HB2	1:7:A:LYS:HD3	5	2.13
(1,221)	1:7:A:LYS:HB3	1:7:A:LYS:HD2	5	2.13
(1,221)	1:7:A:LYS:HB3	1:7:A:LYS:HD3	5	2.13
(1,17)	1:6:A:TRP:HB3	1:7:A:LYS:H	18	2.13
(1,17)	1:6:A:TRP:HB3	1:7:A:LYS:H	20	2.13
(1,232)	1:2:A:LEU:HB2	1:6:A:TRP:H	14	2.1
(1,224)	1:7:A:LYS:HB2	1:8:A:TRP:H	5	2.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,224)	1:7:A:LYS:HB3	1:8:A:TRP:H	5	2.1
(1,45)	1:7:A:LYS:HB2	1:8:A:TRP:H	5	2.1
(1,45)	1:7:A:LYS:HB3	1:8:A:TRP:H	5	2.1
(1,224)	1:7:A:LYS:HB2	1:8:A:TRP:H	19	2.09
(1,224)	1:7:A:LYS:HB3	1:8:A:TRP:H	19	2.09
(1,45)	1:7:A:LYS:HB2	1:8:A:TRP:H	19	2.09
(1,45)	1:7:A:LYS:HB3	1:8:A:TRP:H	19	2.09
(1,249)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD2	4	2.08
(1,249)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD3	4	2.08
(1,129)	1:9:A:THR:HB	1:11:A:TRP:H	5	2.08
(1,253)	1:5:A:LYS:HB2	1:6:A:TRP:H	12	2.07
(1,253)	1:5:A:LYS:HB3	1:6:A:TRP:H	12	2.07
(1,226)	1:2:A:LEU:HB2	1:6:A:TRP:HB2	8	2.06
(1,153)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:HB2	8	2.06
(1,252)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:H	7	2.02
(1,284)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HE	6	2.01
(1,284)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HE	6	2.01
(1,284)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HE	6	2.01
(1,141)	1:9:A:THR:HG21	1:12:A:ARG:HE	6	2.01
(1,141)	1:9:A:THR:HG22	1:12:A:ARG:HE	6	2.01
(1,141)	1:9:A:THR:HG23	1:12:A:ARG:HE	6	2.01
(1,253)	1:5:A:LYS:HB2	1:6:A:TRP:H	4	1.99
(1,253)	1:5:A:LYS:HB3	1:6:A:TRP:H	4	1.99
(1,117)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HG2	3	1.99
(1,117)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HG3	3	1.99
(1,253)	1:5:A:LYS:HB2	1:6:A:TRP:H	14	1.96
(1,253)	1:5:A:LYS:HB3	1:6:A:TRP:H	14	1.96
(1,235)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HB2	5	1.96
(1,253)	1:5:A:LYS:HB2	1:6:A:TRP:H	6	1.95
(1,253)	1:5:A:LYS:HB3	1:6:A:TRP:H	6	1.95
(1,117)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HG2	1	1.95
(1,117)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HG3	1	1.95
(1,63)	1:13:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HE	18	1.92
(1,253)	1:5:A:LYS:HB2	1:6:A:TRP:H	10	1.91
(1,253)	1:5:A:LYS:HB3	1:6:A:TRP:H	10	1.91
(1,117)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HG2	8	1.9
(1,117)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HG3	8	1.9
(1,249)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD2	11	1.89
(1,249)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD3	11	1.89
(1,224)	1:7:A:LYS:HB2	1:8:A:TRP:H	8	1.89
(1,224)	1:7:A:LYS:HB3	1:8:A:TRP:H	8	1.89
(1,45)	1:7:A:LYS:HB2	1:8:A:TRP:H	8	1.89

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,45)	1:7:A:LYS:HB3	1:8:A:TRP:H	8	1.89
(1,129)	1:9:A:THR:HB	1:11:A:TRP:H	14	1.87
(1,117)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HG2	15	1.87
(1,117)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HG3	15	1.87
(1,235)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HB2	9	1.86
(1,252)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:H	8	1.79
(1,117)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HG2	13	1.77
(1,117)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HG3	13	1.77
(1,63)	1:13:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HE	9	1.77
(1,95)	1:2:A:LEU:HB2	1:6:A:TRP:H	10	1.76
(1,16)	1:7:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HE2	5	1.76
(1,16)	1:7:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HE3	5	1.76
(1,268)	1:2:A:LEU:HB3	1:4:A:TRP:H	6	1.75
(1,117)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HG2	11	1.74
(1,117)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HG3	11	1.74
(1,114)	1:2:A:LEU:HB3	1:4:A:TRP:H	15	1.71
(1,188)	1:5:A:LYS:HA	1:6:A:TRP:HB3	7	1.61
(1,252)	1:2:A:LEU:HB3	1:6:A:TRP:H	2	1.6
(1,117)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HG2	9	1.6
(1,117)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HG3	9	1.6
(1,188)	1:5:A:LYS:HA	1:6:A:TRP:HB3	4	1.58
(1,313)	1:2:A:LEU:HD11	1:6:A:TRP:HB2	19	1.57
(1,313)	1:2:A:LEU:HD12	1:6:A:TRP:HB2	19	1.57
(1,313)	1:2:A:LEU:HD13	1:6:A:TRP:HB2	19	1.57
(1,313)	1:2:A:LEU:HD21	1:6:A:TRP:HB2	19	1.57
(1,313)	1:2:A:LEU:HD22	1:6:A:TRP:HB2	19	1.57
(1,313)	1:2:A:LEU:HD23	1:6:A:TRP:HB2	19	1.57
(1,27)	1:12:A:ARG:HD2	1:13:A:ARG:H	5	1.57
(1,27)	1:12:A:ARG:HD3	1:13:A:ARG:H	5	1.57
(1,159)	1:5:A:LYS:HA	1:6:A:TRP:HB2	14	1.54
(1,27)	1:12:A:ARG:HD2	1:13:A:ARG:H	1	1.54
(1,27)	1:12:A:ARG:HD3	1:13:A:ARG:H	1	1.54
(1,27)	1:12:A:ARG:HD2	1:13:A:ARG:H	2	1.52
(1,27)	1:12:A:ARG:HD3	1:13:A:ARG:H	2	1.52
(1,117)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HG2	6	1.51
(1,117)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HG3	6	1.51
(1,23)	1:7:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HD2	11	1.5
(1,23)	1:7:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HD3	11	1.5
(1,249)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD2	3	1.44
(1,249)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD3	3	1.44
(1,249)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD2	19	1.43
(1,249)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD3	19	1.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,117)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HG2	2	1.41
(1,117)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HG3	2	1.41
(1,117)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HG2	10	1.41
(1,117)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HG3	10	1.41
(1,117)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HG2	18	1.41
(1,117)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HG3	18	1.41
(1,129)	1:9:A:THR:HB	1:11:A:TRP:H	18	1.38
(1,114)	1:2:A:LEU:HB3	1:4:A:TRP:H	9	1.38
(1,159)	1:5:A:LYS:HA	1:6:A:TRP:HB2	10	1.37
(1,117)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HG2	12	1.36
(1,117)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HG3	12	1.36
(1,198)	1:8:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG21	20	1.35
(1,198)	1:8:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG22	20	1.35
(1,198)	1:8:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG23	20	1.35
(1,64)	1:13:A:ARG:HA	1:13:A:ARG:HE	9	1.34
(1,23)	1:7:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HD2	5	1.34
(1,23)	1:7:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HD3	5	1.34
(1,232)	1:2:A:LEU:HB2	1:6:A:TRP:H	10	1.33
(1,86)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:H	5	1.33
(1,188)	1:5:A:LYS:HA	1:6:A:TRP:HB3	6	1.32
(1,114)	1:2:A:LEU:HB3	1:4:A:TRP:H	1	1.31
(1,31)	1:13:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HG3	13	1.3
(1,159)	1:5:A:LYS:HA	1:6:A:TRP:HB2	16	1.29
(1,64)	1:13:A:ARG:HA	1:13:A:ARG:HE	18	1.28
(1,188)	1:5:A:LYS:HA	1:6:A:TRP:HB3	18	1.25
(1,105)	1:5:A:LYS:HD2	1:6:A:TRP:H	16	1.25
(1,105)	1:5:A:LYS:HD3	1:6:A:TRP:H	16	1.25
(1,64)	1:13:A:ARG:HA	1:13:A:ARG:HE	14	1.24
(1,114)	1:2:A:LEU:HB3	1:4:A:TRP:H	3	1.23
(1,159)	1:5:A:LYS:HA	1:6:A:TRP:HB2	12	1.22
(1,188)	1:5:A:LYS:HA	1:6:A:TRP:HB3	2	1.17
(1,188)	1:5:A:LYS:HA	1:6:A:TRP:HB3	20	1.17
(1,159)	1:5:A:LYS:HA	1:6:A:TRP:HB2	15	1.15
(1,129)	1:9:A:THR:HB	1:11:A:TRP:H	20	1.14
(1,159)	1:5:A:LYS:HA	1:6:A:TRP:HB2	11	1.11
(1,27)	1:12:A:ARG:HD2	1:13:A:ARG:H	15	1.09
(1,27)	1:12:A:ARG:HD3	1:13:A:ARG:H	15	1.09
(1,188)	1:5:A:LYS:HA	1:6:A:TRP:HB3	19	1.08
(1,117)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HG2	4	1.08
(1,117)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HG3	4	1.08
(1,249)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD2	8	1.07
(1,249)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD3	8	1.07

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,129)	1:9:A:THR:HB	1:11:A:TRP:H	13	1.06
(1,159)	1:5:A:LYS:HA	1:6:A:TRP:HB2	13	1.04
(1,114)	1:2:A:LEU:HB3	1:4:A:TRP:H	5	1.02
(1,59)	1:5:A:LYS:H	1:5:A:LYS:HD2	17	1.0
(1,59)	1:5:A:LYS:H	1:5:A:LYS:HD3	17	1.0
(1,268)	1:2:A:LEU:HB3	1:4:A:TRP:H	15	0.99
(1,241)	1:7:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HD2	11	0.97
(1,241)	1:7:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HD3	11	0.97
(1,272)	1:13:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HG3	13	0.96
(1,249)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD2	9	0.95
(1,249)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD3	9	0.95
(1,114)	1:2:A:LEU:HB3	1:4:A:TRP:H	10	0.92
(1,31)	1:13:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HG3	10	0.91
(1,129)	1:9:A:THR:HB	1:11:A:TRP:H	8	0.9
(1,105)	1:5:A:LYS:HD2	1:6:A:TRP:H	17	0.86
(1,105)	1:5:A:LYS:HD3	1:6:A:TRP:H	17	0.86
(1,86)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:H	17	0.86
(1,63)	1:13:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HE	14	0.86
(1,27)	1:12:A:ARG:HD2	1:13:A:ARG:H	14	0.86
(1,27)	1:12:A:ARG:HD3	1:13:A:ARG:H	14	0.86
(1,188)	1:5:A:LYS:HA	1:6:A:TRP:HB3	9	0.85
(1,129)	1:9:A:THR:HB	1:11:A:TRP:H	2	0.85
(1,129)	1:9:A:THR:HB	1:11:A:TRP:H	4	0.85
(1,241)	1:7:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HD2	5	0.81
(1,241)	1:7:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HD3	5	0.81
(1,114)	1:2:A:LEU:HB3	1:4:A:TRP:H	2	0.81
(1,63)	1:13:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HE	19	0.81
(1,235)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HB2	16	0.8
(1,64)	1:13:A:ARG:HA	1:13:A:ARG:HE	13	0.8
(1,198)	1:8:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG21	18	0.79
(1,198)	1:8:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG22	18	0.79
(1,198)	1:8:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG23	18	0.79
(1,27)	1:12:A:ARG:HD2	1:13:A:ARG:H	3	0.79
(1,27)	1:12:A:ARG:HD3	1:13:A:ARG:H	3	0.79
(1,16)	1:7:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HE2	11	0.79
(1,16)	1:7:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HE3	11	0.79
(1,63)	1:13:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HE	20	0.78
(1,23)	1:7:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HD2	3	0.78
(1,23)	1:7:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HD3	3	0.78
(1,235)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:HB2	19	0.77
(1,114)	1:2:A:LEU:HB3	1:4:A:TRP:H	8	0.77
(1,313)	1:2:A:LEU:HD11	1:6:A:TRP:HB2	2	0.75

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,313)	1:2:A:LEU:HD12	1:6:A:TRP:HB2	2	0.75
(1,313)	1:2:A:LEU:HD13	1:6:A:TRP:HB2	2	0.75
(1,313)	1:2:A:LEU:HD21	1:6:A:TRP:HB2	2	0.75
(1,313)	1:2:A:LEU:HD22	1:6:A:TRP:HB2	2	0.75
(1,313)	1:2:A:LEU:HD23	1:6:A:TRP:HB2	2	0.75
(1,114)	1:2:A:LEU:HB3	1:4:A:TRP:H	19	0.75
(1,27)	1:12:A:ARG:HD2	1:13:A:ARG:H	18	0.75
(1,27)	1:12:A:ARG:HD3	1:13:A:ARG:H	18	0.75
(1,159)	1:5:A:LYS:HA	1:6:A:TRP:HB2	9	0.74
(1,31)	1:13:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HG3	16	0.73
(1,129)	1:9:A:THR:HB	1:11:A:TRP:H	11	0.71
(1,105)	1:5:A:LYS:HD2	1:6:A:TRP:H	8	0.71
(1,105)	1:5:A:LYS:HD3	1:6:A:TRP:H	8	0.71
(1,19)	1:7:A:LYS:H	1:8:A:TRP:H	17	0.71
(1,46)	1:12:A:ARG:H	1:12:A:ARG:HG2	10	0.69
(1,159)	1:5:A:LYS:HA	1:6:A:TRP:HB2	7	0.68
(1,268)	1:2:A:LEU:HB3	1:4:A:TRP:H	9	0.66
(1,198)	1:8:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG21	17	0.66
(1,198)	1:8:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG22	17	0.66
(1,198)	1:8:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG23	17	0.66
(1,19)	1:7:A:LYS:H	1:8:A:TRP:H	6	0.66
(1,188)	1:5:A:LYS:HA	1:6:A:TRP:HB3	1	0.65
(1,59)	1:5:A:LYS:H	1:5:A:LYS:HD2	11	0.65
(1,59)	1:5:A:LYS:H	1:5:A:LYS:HD3	11	0.65
(1,27)	1:12:A:ARG:HD2	1:13:A:ARG:H	4	0.65
(1,27)	1:12:A:ARG:HD3	1:13:A:ARG:H	4	0.65
(1,249)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD2	16	0.64
(1,249)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD3	16	0.64
(1,198)	1:8:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG21	15	0.64
(1,198)	1:8:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG22	15	0.64
(1,198)	1:8:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG23	15	0.64
(1,23)	1:7:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HD2	16	0.64
(1,23)	1:7:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HD3	16	0.64
(1,19)	1:7:A:LYS:H	1:8:A:TRP:H	8	0.64
(1,198)	1:8:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG21	14	0.63
(1,198)	1:8:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG22	14	0.63
(1,198)	1:8:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG23	14	0.63
(1,183)	1:12:A:ARG:HD2	1:13:A:ARG:H	5	0.63
(1,183)	1:12:A:ARG:HD3	1:13:A:ARG:H	5	0.63
(1,85)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:H	15	0.62
(1,31)	1:13:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HG3	12	0.62
(1,249)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD2	17	0.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,249)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD3	17	0.6
(1,188)	1:5:A:LYS:HA	1:6:A:TRP:HB3	14	0.6
(1,183)	1:12:A:ARG:HD2	1:13:A:ARG:H	1	0.6
(1,183)	1:12:A:ARG:HD3	1:13:A:ARG:H	1	0.6
(1,129)	1:9:A:THR:HB	1:11:A:TRP:H	6	0.6
(1,117)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HG2	5	0.6
(1,117)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HG3	5	0.6
(1,85)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:H	6	0.6
(1,85)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:H	8	0.6
(1,19)	1:7:A:LYS:H	1:8:A:TRP:H	18	0.6
(1,268)	1:2:A:LEU:HB3	1:4:A:TRP:H	1	0.59
(1,198)	1:8:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG21	6	0.59
(1,198)	1:8:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG22	6	0.59
(1,198)	1:8:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG23	6	0.59
(1,123)	1:12:A:ARG:HA	1:12:A:ARG:HE	10	0.59
(1,16)	1:7:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HE2	9	0.59
(1,16)	1:7:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HE3	9	0.59
(1,183)	1:12:A:ARG:HD2	1:13:A:ARG:H	2	0.58
(1,183)	1:12:A:ARG:HD3	1:13:A:ARG:H	2	0.58
(1,85)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:H	4	0.58
(1,23)	1:7:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HD2	9	0.58
(1,23)	1:7:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HD3	9	0.58
(1,272)	1:13:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HG3	10	0.57
(1,119)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:ARG:H	9	0.57
(1,27)	1:12:A:ARG:HD2	1:13:A:ARG:H	13	0.57
(1,27)	1:12:A:ARG:HD3	1:13:A:ARG:H	13	0.57
(1,278)	1:5:A:LYS:HA	1:5:A:LYS:HD2	15	0.56
(1,278)	1:5:A:LYS:HA	1:5:A:LYS:HD3	15	0.56
(1,188)	1:5:A:LYS:HA	1:6:A:TRP:HB3	16	0.56
(1,117)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HG2	16	0.56
(1,117)	1:4:A:TRP:H	1:5:A:LYS:HG3	16	0.56
(1,19)	1:7:A:LYS:H	1:8:A:TRP:H	19	0.56
(1,29)	1:13:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HG2	18	0.55
(1,188)	1:5:A:LYS:HA	1:6:A:TRP:HB3	3	0.54
(1,114)	1:2:A:LEU:HB3	1:4:A:TRP:H	4	0.54
(1,119)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:ARG:H	7	0.52
(1,119)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:ARG:H	20	0.52
(1,46)	1:12:A:ARG:H	1:12:A:ARG:HG2	14	0.52
(1,43)	1:12:A:ARG:H	1:13:A:ARG:H	12	0.52
(1,268)	1:2:A:LEU:HB3	1:4:A:TRP:H	3	0.51
(1,188)	1:5:A:LYS:HA	1:6:A:TRP:HB3	17	0.51
(1,123)	1:12:A:ARG:HA	1:12:A:ARG:HE	17	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,119)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:ARG:H	15	0.51
(1,105)	1:5:A:LYS:HD2	1:6:A:TRP:H	1	0.51
(1,105)	1:5:A:LYS:HD3	1:6:A:TRP:H	1	0.51
(1,86)	1:4:A:TRP:H	1:6:A:TRP:H	7	0.51
(1,23)	1:7:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HD2	13	0.49
(1,23)	1:7:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HD3	13	0.49
(1,198)	1:8:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG21	9	0.48
(1,198)	1:8:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG22	9	0.48
(1,198)	1:8:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG23	9	0.48
(1,119)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:ARG:H	19	0.48
(1,59)	1:5:A:LYS:H	1:5:A:LYS:HD2	16	0.48
(1,59)	1:5:A:LYS:H	1:5:A:LYS:HD3	16	0.48
(1,63)	1:13:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HE	3	0.46
(1,46)	1:12:A:ARG:H	1:12:A:ARG:HG2	15	0.45
(1,29)	1:13:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HG2	13	0.45
(1,16)	1:7:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HE2	12	0.45
(1,16)	1:7:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HE3	12	0.45
(1,105)	1:5:A:LYS:HD2	1:6:A:TRP:H	18	0.44
(1,105)	1:5:A:LYS:HD3	1:6:A:TRP:H	18	0.44
(1,188)	1:5:A:LYS:HA	1:6:A:TRP:HB3	5	0.43
(1,129)	1:9:A:THR:HB	1:11:A:TRP:H	19	0.43
(1,101)	1:5:A:LYS:HG2	1:6:A:TRP:H	2	0.42
(1,101)	1:5:A:LYS:HG3	1:6:A:TRP:H	2	0.42
(1,119)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:ARG:H	3	0.41
(1,119)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:ARG:H	16	0.41
(1,43)	1:12:A:ARG:H	1:13:A:ARG:H	16	0.41
(1,6)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:H	7	0.4
(1,272)	1:13:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HG3	16	0.39
(1,64)	1:13:A:ARG:HA	1:13:A:ARG:HE	17	0.39
(1,123)	1:12:A:ARG:HA	1:12:A:ARG:HE	19	0.38
(1,119)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:ARG:H	2	0.38
(1,101)	1:5:A:LYS:HG2	1:6:A:TRP:H	7	0.38
(1,101)	1:5:A:LYS:HG3	1:6:A:TRP:H	7	0.38
(1,246)	1:12:A:ARG:H	1:12:A:ARG:HG2	10	0.37
(1,64)	1:13:A:ARG:HA	1:13:A:ARG:HE	4	0.37
(1,64)	1:13:A:ARG:HA	1:13:A:ARG:HE	7	0.36
(1,43)	1:12:A:ARG:H	1:13:A:ARG:H	9	0.36
(1,16)	1:7:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HE2	2	0.36
(1,16)	1:7:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HE3	2	0.36
(1,16)	1:7:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HE2	8	0.36
(1,16)	1:7:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HE3	8	0.36
(1,25)	1:7:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HG2	3	0.35

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,25)	1:7:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HG3	3	0.35
(1,19)	1:7:A:LYS:H	1:8:A:TRP:H	14	0.35
(1,278)	1:5:A:LYS:HA	1:5:A:LYS:HD2	8	0.34
(1,278)	1:5:A:LYS:HA	1:5:A:LYS:HD3	8	0.34
(1,249)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD2	20	0.34
(1,249)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD3	20	0.34
(1,85)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:H	13	0.34
(1,64)	1:13:A:ARG:HA	1:13:A:ARG:HE	1	0.34
(1,63)	1:13:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HE	17	0.34
(1,16)	1:7:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HE2	7	0.34
(1,16)	1:7:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HE3	7	0.34
(1,159)	1:5:A:LYS:HA	1:6:A:TRP:HB2	4	0.33
(1,119)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:ARG:H	13	0.33
(1,26)	1:12:A:ARG:HA	1:13:A:ARG:H	10	0.33
(1,159)	1:5:A:LYS:HA	1:6:A:TRP:HB2	17	0.32
(1,64)	1:13:A:ARG:HA	1:13:A:ARG:HE	5	0.32
(1,64)	1:13:A:ARG:HA	1:13:A:ARG:HE	2	0.31
(1,43)	1:12:A:ARG:H	1:13:A:ARG:H	15	0.31
(1,278)	1:5:A:LYS:HA	1:5:A:LYS:HD2	16	0.3
(1,278)	1:5:A:LYS:HA	1:5:A:LYS:HD3	16	0.3
(1,268)	1:2:A:LEU:HB3	1:4:A:TRP:H	5	0.3
(1,105)	1:5:A:LYS:HD2	1:6:A:TRP:H	19	0.3
(1,105)	1:5:A:LYS:HD3	1:6:A:TRP:H	19	0.3
(1,64)	1:13:A:ARG:HA	1:13:A:ARG:HE	6	0.3
(1,27)	1:12:A:ARG:HD2	1:13:A:ARG:H	20	0.3
(1,27)	1:12:A:ARG:HD3	1:13:A:ARG:H	20	0.3
(1,23)	1:7:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HD2	14	0.3
(1,23)	1:7:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HD3	14	0.3
(1,19)	1:7:A:LYS:H	1:8:A:TRP:H	16	0.3
(1,119)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:ARG:H	6	0.29
(1,272)	1:13:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HG3	12	0.28
(1,188)	1:5:A:LYS:HA	1:6:A:TRP:HB3	8	0.28
(1,64)	1:13:A:ARG:HA	1:13:A:ARG:HE	8	0.28
(1,278)	1:5:A:LYS:HA	1:5:A:LYS:HD2	17	0.27
(1,278)	1:5:A:LYS:HA	1:5:A:LYS:HD3	17	0.27
(1,249)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD2	1	0.27
(1,249)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD3	1	0.27
(1,105)	1:5:A:LYS:HD2	1:6:A:TRP:H	15	0.27
(1,105)	1:5:A:LYS:HD3	1:6:A:TRP:H	15	0.27
(1,90)	1:6:A:TRP:H	1:6:A:TRP:HB3	1	0.27
(1,19)	1:7:A:LYS:H	1:8:A:TRP:H	10	0.26
(1,16)	1:7:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HE2	17	0.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,16)	1:7:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HE3	17	0.26
(1,1)	1:2:A:LEU:H	1:3:A:PRO:HA	19	0.26
(1,241)	1:7:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HD2	3	0.25
(1,241)	1:7:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HD3	3	0.25
(1,119)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:ARG:H	11	0.25
(1,26)	1:12:A:ARG:HA	1:13:A:ARG:H	13	0.25
(1,16)	1:7:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HE2	14	0.25
(1,16)	1:7:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HE3	14	0.25
(1,8)	1:1:A:ILE:HG21	1:2:A:LEU:H	7	0.25
(1,8)	1:1:A:ILE:HG22	1:2:A:LEU:H	7	0.25
(1,8)	1:1:A:ILE:HG23	1:2:A:LEU:H	7	0.25
(1,249)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD2	12	0.24
(1,249)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:HD3	12	0.24
(1,188)	1:5:A:LYS:HA	1:6:A:TRP:HB3	10	0.24
(1,159)	1:5:A:LYS:HA	1:6:A:TRP:HB2	19	0.24
(1,90)	1:6:A:TRP:H	1:6:A:TRP:HB3	5	0.24
(1,82)	1:6:A:TRP:H	1:6:A:TRP:HB3	1	0.24
(1,7)	1:2:A:LEU:H	1:2:A:LEU:HB2	6	0.24
(1,85)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:H	14	0.23
(1,7)	1:2:A:LEU:H	1:2:A:LEU:HB2	10	0.23
(1,305)	1:2:A:LEU:HD11	1:3:A:PRO:HA	12	0.22
(1,305)	1:2:A:LEU:HD12	1:3:A:PRO:HA	12	0.22
(1,305)	1:2:A:LEU:HD13	1:3:A:PRO:HA	12	0.22
(1,305)	1:2:A:LEU:HD21	1:3:A:PRO:HA	12	0.22
(1,305)	1:2:A:LEU:HD22	1:3:A:PRO:HA	12	0.22
(1,305)	1:2:A:LEU:HD23	1:3:A:PRO:HA	12	0.22
(1,106)	1:4:A:TRP:H	1:4:A:TRP:HB3	4	0.22
(1,85)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:H	3	0.22
(1,85)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:H	12	0.22
(1,63)	1:13:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HE	13	0.22
(1,26)	1:12:A:ARG:HA	1:13:A:ARG:H	17	0.22
(1,19)	1:7:A:LYS:H	1:8:A:TRP:H	11	0.22
(1,114)	1:2:A:LEU:HB3	1:4:A:TRP:H	11	0.21
(1,104)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:H	15	0.21
(1,85)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:H	11	0.21
(1,82)	1:6:A:TRP:H	1:6:A:TRP:HB3	5	0.21
(1,43)	1:12:A:ARG:H	1:13:A:ARG:H	6	0.21
(1,19)	1:7:A:LYS:H	1:8:A:TRP:H	7	0.21
(1,268)	1:2:A:LEU:HB3	1:4:A:TRP:H	10	0.2
(1,246)	1:12:A:ARG:H	1:12:A:ARG:HG2	14	0.2
(1,111)	1:4:A:TRP:H	1:4:A:TRP:HB3	4	0.2
(1,104)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:H	14	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,87)	1:5:A:LYS:HA	1:6:A:TRP:H	7	0.2
(1,105)	1:5:A:LYS:HD2	1:6:A:TRP:H	20	0.19
(1,105)	1:5:A:LYS:HD3	1:6:A:TRP:H	20	0.19
(1,90)	1:6:A:TRP:H	1:6:A:TRP:HB3	6	0.19
(1,64)	1:13:A:ARG:HA	1:13:A:ARG:HE	15	0.19
(1,6)	1:1:A:ILE:HB	1:2:A:LEU:H	2	0.19
(1,257)	1:12:A:ARG:HA	1:12:A:ARG:HG2	15	0.18
(1,198)	1:8:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG21	2	0.18
(1,198)	1:8:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG22	2	0.18
(1,198)	1:8:A:TRP:HB3	1:9:A:THR:HG23	2	0.18
(1,188)	1:5:A:LYS:HA	1:6:A:TRP:HB3	13	0.18
(1,188)	1:5:A:LYS:HA	1:6:A:TRP:HB3	15	0.18
(1,43)	1:12:A:ARG:H	1:13:A:ARG:H	8	0.18
(1,7)	1:2:A:LEU:H	1:2:A:LEU:HB2	14	0.18
(1,305)	1:2:A:LEU:HD11	1:3:A:PRO:HA	5	0.17
(1,305)	1:2:A:LEU:HD12	1:3:A:PRO:HA	5	0.17
(1,305)	1:2:A:LEU:HD13	1:3:A:PRO:HA	5	0.17
(1,305)	1:2:A:LEU:HD21	1:3:A:PRO:HA	5	0.17
(1,305)	1:2:A:LEU:HD22	1:3:A:PRO:HA	5	0.17
(1,305)	1:2:A:LEU:HD23	1:3:A:PRO:HA	5	0.17
(1,85)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:H	1	0.17
(1,85)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:H	10	0.17
(1,85)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:H	18	0.17
(1,85)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:H	19	0.17
(1,19)	1:7:A:LYS:H	1:8:A:TRP:H	9	0.17
(1,82)	1:6:A:TRP:H	1:6:A:TRP:HB3	6	0.16
(1,26)	1:12:A:ARG:HA	1:13:A:ARG:H	3	0.16
(1,19)	1:7:A:LYS:H	1:8:A:TRP:H	15	0.16
(1,16)	1:7:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HE2	10	0.16
(1,16)	1:7:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HE3	10	0.16
(1,305)	1:2:A:LEU:HD11	1:3:A:PRO:HA	18	0.15
(1,305)	1:2:A:LEU:HD12	1:3:A:PRO:HA	18	0.15
(1,305)	1:2:A:LEU:HD13	1:3:A:PRO:HA	18	0.15
(1,305)	1:2:A:LEU:HD21	1:3:A:PRO:HA	18	0.15
(1,305)	1:2:A:LEU:HD22	1:3:A:PRO:HA	18	0.15
(1,305)	1:2:A:LEU:HD23	1:3:A:PRO:HA	18	0.15
(1,183)	1:12:A:ARG:HD2	1:13:A:ARG:H	15	0.15
(1,183)	1:12:A:ARG:HD3	1:13:A:ARG:H	15	0.15
(1,123)	1:12:A:ARG:HA	1:12:A:ARG:HE	13	0.15
(1,85)	1:5:A:LYS:H	1:6:A:TRP:H	20	0.15
(1,19)	1:7:A:LYS:H	1:8:A:TRP:H	12	0.15
(1,63)	1:13:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HE	4	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,16)	1:7:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HE2	19	0.14
(1,16)	1:7:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HE3	19	0.14
(1,1)	1:2:A:LEU:H	1:3:A:PRO:HA	16	0.14
(1,278)	1:5:A:LYS:HA	1:5:A:LYS:HD2	11	0.13
(1,278)	1:5:A:LYS:HA	1:5:A:LYS:HD3	11	0.13
(1,246)	1:12:A:ARG:H	1:12:A:ARG:HG2	15	0.13
(1,188)	1:5:A:LYS:HA	1:6:A:TRP:HB3	12	0.13
(1,159)	1:5:A:LYS:HA	1:6:A:TRP:HB2	1	0.13
(1,101)	1:5:A:LYS:HG2	1:6:A:TRP:H	9	0.13
(1,101)	1:5:A:LYS:HG3	1:6:A:TRP:H	9	0.13
(1,63)	1:13:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HE	15	0.13
(1,123)	1:12:A:ARG:HA	1:12:A:ARG:HE	6	0.12
(1,104)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:H	9	0.12
(1,104)	1:6:A:TRP:H	1:7:A:LYS:H	13	0.12
(1,63)	1:13:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HE	5	0.12
(1,46)	1:12:A:ARG:H	1:12:A:ARG:HG2	17	0.12
(1,278)	1:5:A:LYS:HA	1:5:A:LYS:HD2	19	0.11
(1,278)	1:5:A:LYS:HA	1:5:A:LYS:HD3	19	0.11
(1,241)	1:7:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HD2	16	0.11
(1,241)	1:7:A:LYS:H	1:7:A:LYS:HD3	16	0.11
(1,169)	1:12:A:ARG:H	1:12:A:ARG:HD2	10	0.11
(1,169)	1:12:A:ARG:H	1:12:A:ARG:HD3	10	0.11
(1,114)	1:2:A:LEU:HB3	1:4:A:TRP:H	16	0.11
(1,36)	1:8:A:TRP:H	1:8:A:TRP:HB3	18	0.11
(1,119)	1:11:A:TRP:H	1:12:A:ARG:H	1	0.1
(1,63)	1:13:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HE	2	0.1
(1,36)	1:8:A:TRP:H	1:8:A:TRP:HB3	6	0.1
(1,31)	1:13:A:ARG:H	1:13:A:ARG:HG3	18	0.1

10 Dihedral-angle violation analysis ⓘ

No dihedral-angle restraints found