



wwPDB NMR Structure Validation Summary Report ⓘ

Jul 2, 2020 – 12:56 AM CDT

PDB ID : 6NBN
Title : Structure of Aedes aegypti OBP22 in the complex with arachidonic acid
Authors : Jones, D.N.; Wang, J.
Deposited on : 2018-12-07

This is a wwPDB NMR Structure Validation Summary 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 following versions of software and data (see [references ⓘ](#)) were used in the production of this report:

Cyrange	:	Kirchner and Güntert (2011)
NmrClust	:	Kelley et al. (1996)
MolProbity	:	4.02b-467
Mogul	:	1.8.0 (224370), CSD as540be (2019)
Percentile statistics	:	20171227.v01 (using entries in the PDB archive December 27th 2017)
RCI	:	v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV	:	Wang et al. (2010)
ShiftChecker	:	2.6.dev1
BMRB Restraints Analysis	:	v1.2
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP)	:	2.6.dev1

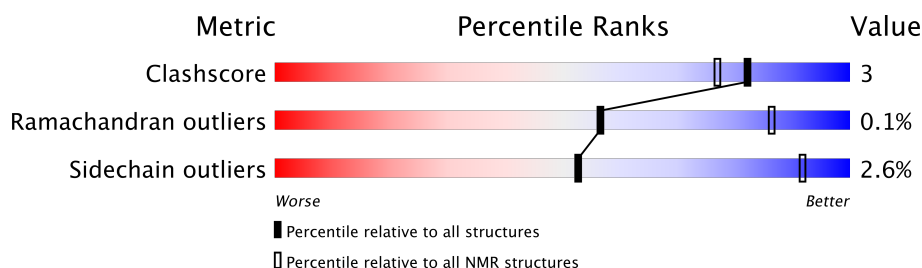
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

SOLUTION NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment is 62%.

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	136327	12091
Ramachandran outliers	132723	10835
Sidechain outliers	132532	10811

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	123	

2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 30 models. Model 1 is the overall representative, medoid model (most similar to other models).

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:6-A:121 (116)	0.23	1

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

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

The models can be grouped into 4 clusters and 6 single-model clusters were found.

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

3 Entry composition [i](#)

There are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 2033 atoms, of which 1004 are hydrogens and 0 are deuteriums.

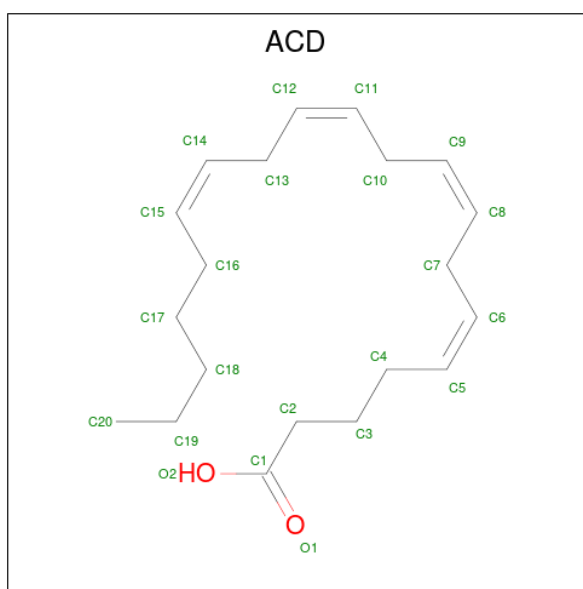
- Molecule 1 is a protein called AAEL005772-PA.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	123	Total	C	H	N	O	S	0
			1980	633	973	170	195	9	

There is a discrepancy between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	1	MET	-	initiating methionine	UNP Q1HRL7

- Molecule 2 is ARACHIDONIC ACID (three-letter code: ACD) (formula: $C_{20}H_{32}O_2$).



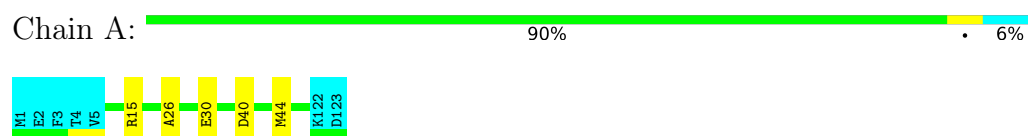
Mol	Chain	Residues	Atoms			
2	A	1	Total	C	H	O
			53	20	31	2

4 Residue-property plots [i](#)

4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

These plots are provided for all protein, RNA and DNA 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.

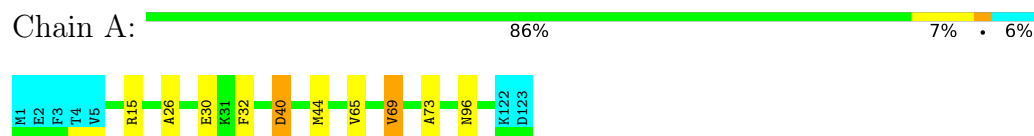
- Molecule 1: AAEL005772-PA



4.2 Residue scores for the representative (medoid) model from the NMR ensemble

The representative model is number 1. Colouring as in section [4.1](#) above.

- Molecule 1: AAEL005772-PA



5 Refinement protocol and experimental data overview

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

Of the 50 calculated structures, 30 were deposited, based on the following criterion: *NOE violation energy*.

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

Software name	Classification	Version
ARIA	structure calculation	2.3.2
CNS	structure calculation	1.2

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)	6nbn_nmr.cif
Number of chemical shift lists	1
Total number of shifts	1524
Number of shifts mapped to atoms	969
Number of unparsed shifts	158
Number of shifts with mapping errors	28
Number of shifts with mapping warnings	369
Assignment completeness (well-defined parts)	62%

6 Model quality

6.1 Standard geometry

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

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

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

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	947	914	911	5±2
2	A	22	31	31	0±1
All	All	29070	28350	28260	153

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 3.

5 of 55 unique clashes are listed below, sorted by their clash magnitude.

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:72:LEU:HA	1:A:119:SER:OG	0.61	1.94	11	5
1:A:40:ASP:O	1:A:44:MET:HG3	0.60	1.96	1	29
1:A:11:LEU:O	1:A:15:ARG:HG3	0.59	1.95	22	11
1:A:15:ARG:HH21	2:A:201:ACD:C1	0.57	2.12	21	3
1:A:13:ARG:O	1:A:17:GLU:HG3	0.57	1.99	10	5

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	116/123 (94%)	110±1 (95±1%)	5±1 (5±1%)	0±0 (0±0%)	56	86
All	All	3480/3690 (94%)	3314 (95%)	161 (5%)	5 (0%)	56	86

All 2 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	74	HIS	3
1	A	73	ALA	2

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	107/114 (94%)	104±1 (97±1%)	3±1 (3±1%)	53	92
All	All	3210/3420 (94%)	3128 (97%)	82 (3%)	53	92

5 of 28 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	15	ARG	13
1	A	40	ASP	9
1	A	109	GLN	6
1	A	96	ASN	6
1	A	48	LYS	6

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 carbohydrates in this entry.

6.6 Ligand geometry [i](#)

1 ligand is modelled in this entry.

There are no bond-length outliers.

There are no bond-angle outliers.

There are no chirality outliers.

There are no torsion outliers.

There are no ring outliers.

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 62% for the well-defined parts and 61% for the entire structure.

7.1 Chemical shift list 1

File name: 6nbn_nmr.cif

Chemical shift list name: *nef_chemical_shift_list_nuevo*

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	1524
Number of shifts mapped to atoms	969
Number of unparsed shifts	158
Number of shifts with mapping errors	28
Number of shifts with mapping warnings	369
Number of shift outliers (ShiftChecker)	0

The following errors were found when reading this chemical shift list.

- Chemical shift has been reported more than once. First 5 (of 158) occurrences are reported below.

Shift ID	Chain	Res	Type	Atom	Shift Data		
					Value	Uncertainty	Ambiguity
5	A	2	GLU	HG%	2.266	0.008	1
15	A	3	PHE	HD%	6.922	0.008	1
29	A	4	THR	HG2%	1.056	0.006	1
30	A	4	THR	HG2%	1.056	0.006	1
40	A	5	VAL	HG1%	0.967	0.008	1

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

- No matching atoms found in structure. First 5 (of 369) occurrences are reported below.

Chain	Res	Type	Atom	Shift Data		
				Value	Uncertainty	Ambiguity
A	102	PHE	HD%	7.085	0.016	1
A	18	CYS	HBx	3.329	0.004	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Chain	Res	Type	Atom	Shift Data		
				Value	Uncertainty	Ambiguity
A	71	GLN	HGx	2.303	0.005	2
A	46	TYR	HBx	3.058	0.01	2
A	2	GLU	HBy	2.04	0.002	2

- Chain not found in structure. First 5 (of 28) occurrences are reported below.

Chain	Res	Type	Atom	Shift Data		
				Value	Uncertainty	Ambiguity
B	1	ACD	H15	5.667	0.013	1
B	1	ACD	H71	2.761	0.003	1
B	1	ACD	H192	1.177	0.012	1
B	1	ACD	H32	1.379	0.011	1
B	1	ACD	H41	1.811	0.005	1

7.1.2 Chemical shift referencing [i](#)

The following table shows the suggested chemical shift referencing corrections.

Nucleus	# values	Correction \pm precision, ppm	Suggested action
$^{13}\text{C}_\alpha$	122	-0.34 ± 0.19	None needed (< 0.5 ppm)
$^{13}\text{C}_\beta$	119	0.27 ± 0.21	None needed (< 0.5 ppm)
$^{13}\text{C}'$	115	-0.08 ± 0.14	None needed (< 0.5 ppm)
^{15}N	118	0.45 ± 0.35	None needed (< 0.5 ppm)

7.1.3 Completeness of resonance assignments [i](#)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the well-defined regions of the structure. The overall completeness is 62%, i.e. 910 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1471. 17 out of 17 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	^1H	^{13}C	^{15}N
Backbone	565/574 (98%)	226/229 (99%)	226/232 (97%)	113/113 (100%)
Sidechain	278/762 (36%)	35/446 (8%)	226/278 (81%)	17/38 (45%)
Aromatic	67/135 (50%)	35/71 (49%)	30/56 (54%)	2/8 (25%)
Overall	910/1471 (62%)	296/746 (40%)	482/566 (85%)	132/159 (83%)

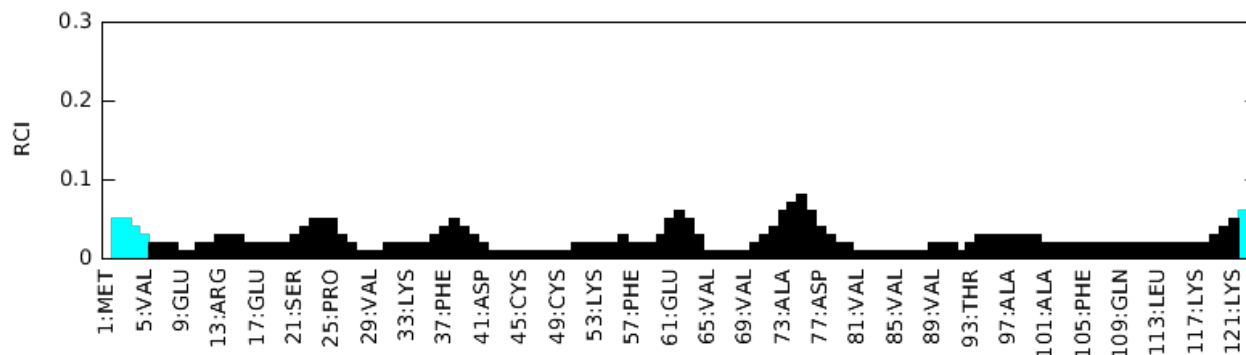
7.1.4 Statistically unusual chemical shifts [i](#)

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.

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	1572
Intra-residue ($ i-j =0$)	762
Sequential ($ i-j =1$)	292
Medium range ($ i-j >1$ and $ i-j <5$)	308
Long range ($ i-j \geq 5$)	210
Inter-chain	0
Total dihedral-angle restraints	224
Total hydrogen bond restraints	80
Total disulfide bond restraints	0
Number of unmapped restraints	0
Number of restraints per residue	11.4
Number of long range restraints per residue	1.5

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)	8.7	0.2
0.2-0.5 (Medium)	23.6	0.5
>0.5 (Large)	31.9	2.79

8.2.2 Average number of dihedral-angle violations per model

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

Bins (°)	Average number of violations per model	Max (°)
1.0-10.0 (Small)	1.7	4.2
10.0-20.0 (Medium)	None	None
>20.0 (Large)	None	None

9 Distance violation analysis

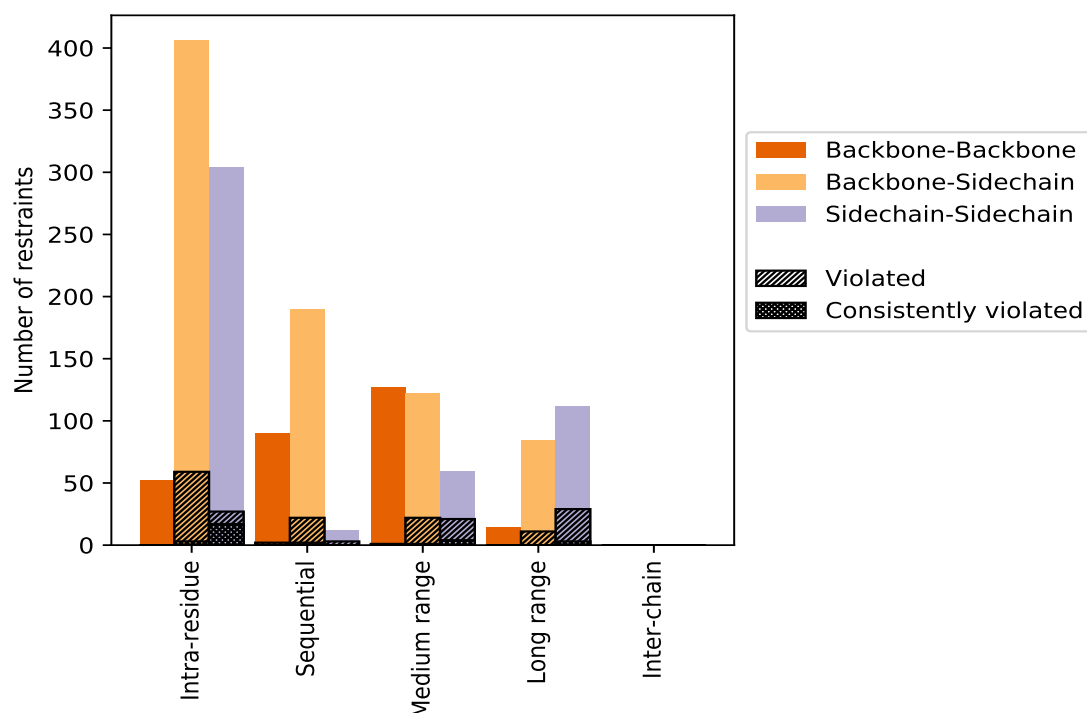
9.1 Summary of distance violations

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

Restrains type	Count	% ¹	Violated ³			Consistently Violated ⁴		
			Count	% ²	% ¹	Count	% ²	% ¹
Intra-residue ($i-j =0$)	762	48.5	86	11.3	5.5	20	2.6	1.3
Backbone-Backbone	52	3.3	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	406	25.8	59	14.5	3.8	3	0.7	0.2
Sidechain-Sidechain	304	19.3	27	8.9	1.7	17	5.6	1.1
Sequential ($i-j =1$)	292	18.6	27	9.2	1.7	2	0.7	0.1
Backbone-Backbone	90	5.7	2	2.2	0.1	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	190	12.1	22	11.6	1.4	2	1.1	0.1
Sidechain-Sidechain	12	0.8	3	25.0	0.2	0	0.0	0.0
Medium range ($i-j >1$ & $i-j <5$)	308	19.6	44	14.3	2.8	5	1.6	0.3
Backbone-Backbone	127	8.1	1	0.8	0.1	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	122	7.8	22	18.0	1.4	1	0.8	0.1
Sidechain-Sidechain	59	3.8	21	35.6	1.3	4	6.8	0.3
Long range ($i-j \geq 5$)	210	13.4	40	19.0	2.5	3	1.4	0.2
Backbone-Backbone	14	0.9	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	84	5.3	11	13.1	0.7	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	112	7.1	29	25.9	1.8	3	2.7	0.2
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
Total	1572	100.0	197	12.5	12.5	30	1.9	1.9
Backbone-Backbone	283	18.0	3	1.1	0.2	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	802	51.0	114	14.2	7.3	6	0.7	0.4
Sidechain-Sidechain	487	31.0	80	16.4	5.1	24	4.9	1.5

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



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

9.2 Distance violation statistics for each model

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)
	IR ¹	SQ ²	MR ³	LR ⁴	IC ⁵	Total			
1	35	7	14	12	0	68	0.78	1.85	0.55
2	34	5	12	11	0	62	0.69	2.0	0.53
3	37	4	12	11	0	64	0.74	1.94	0.54
4	34	5	12	10	0	61	0.73	1.97	0.53
5	33	5	15	9	0	62	0.76	2.08	0.55
6	31	10	15	13	0	69	0.79	1.79	0.55
7	34	5	17	9	0	65	0.75	1.92	0.55
8	34	5	15	8	0	62	0.79	1.94	0.55
9	35	7	17	6	0	65	0.79	2.27	0.6
10	40	5	10	19	0	74	0.78	1.84	0.54
11	31	4	12	11	0	58	0.76	1.93	0.54
12	33	5	15	10	0	63	0.79	1.76	0.53

Continued on next page...

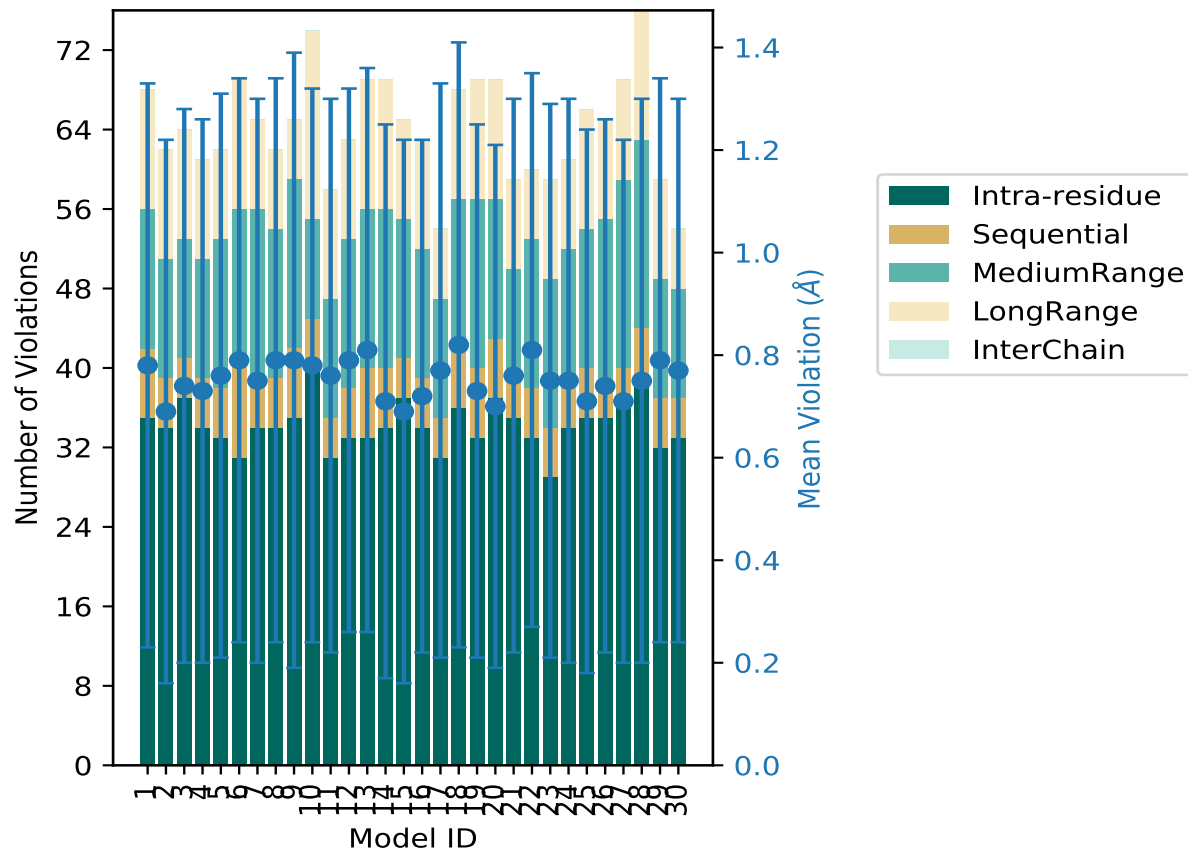
Continued from previous page...

Model ID	Number of violations						Mean (Å)	Max (Å)	SD ⁶ (Å)
	IR ¹	SQ ²	MR ³	LR ⁴	IC ⁵	Total			
13	33	7	16	13	0	69	0.81	1.83	0.55
14	34	6	16	13	0	69	0.71	2.02	0.54
15	37	4	14	10	0	65	0.69	1.85	0.53
16	34	5	13	11	0	63	0.72	1.6	0.5
17	31	4	12	7	0	54	0.77	2.03	0.56
18	36	6	15	11	0	68	0.82	2.79	0.59
19	33	7	17	12	0	69	0.73	1.98	0.52
20	37	6	14	12	0	69	0.7	2.07	0.51
21	35	4	11	9	0	59	0.76	1.85	0.54
22	33	5	15	7	0	60	0.81	1.92	0.54
23	29	5	15	10	0	59	0.75	2.0	0.54
24	34	5	13	9	0	61	0.75	2.1	0.55
25	35	5	14	12	0	66	0.71	1.79	0.53
26	35	4	16	10	0	65	0.74	1.8	0.52
27	37	3	19	10	0	69	0.71	1.92	0.51
28	39	5	19	13	0	76	0.75	2.19	0.55
29	32	5	12	10	0	59	0.79	1.82	0.55
30	33	4	11	6	0	54	0.77	1.8	0.53

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

⁵Inter-chain restraints, ⁶Standard deviation

9.2.1 Bar graph : Distance Violation statistics for each model



The mean 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, 1375(IR:676, SQ:265, MR:264, LR:170, 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	%
19	9	14	14	0	56	1	3.3
7	9	6	9	0	31	2	6.7
9	2	2	2	0	15	3	10.0
4	0	2	1	0	7	4	13.3
7	0	2	2	0	11	5	16.7
1	1	0	0	0	2	6	20.0
0	0	0	1	0	1	7	23.3
4	2	2	0	0	8	8	26.7

Continued on next page...

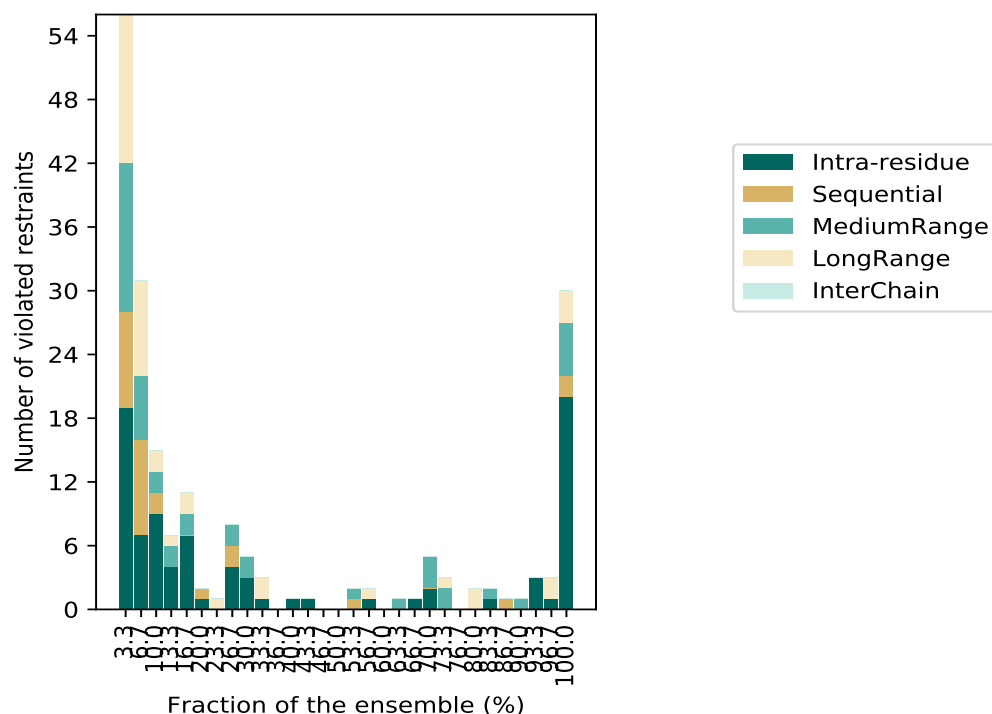
Continued from previous page...

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

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

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

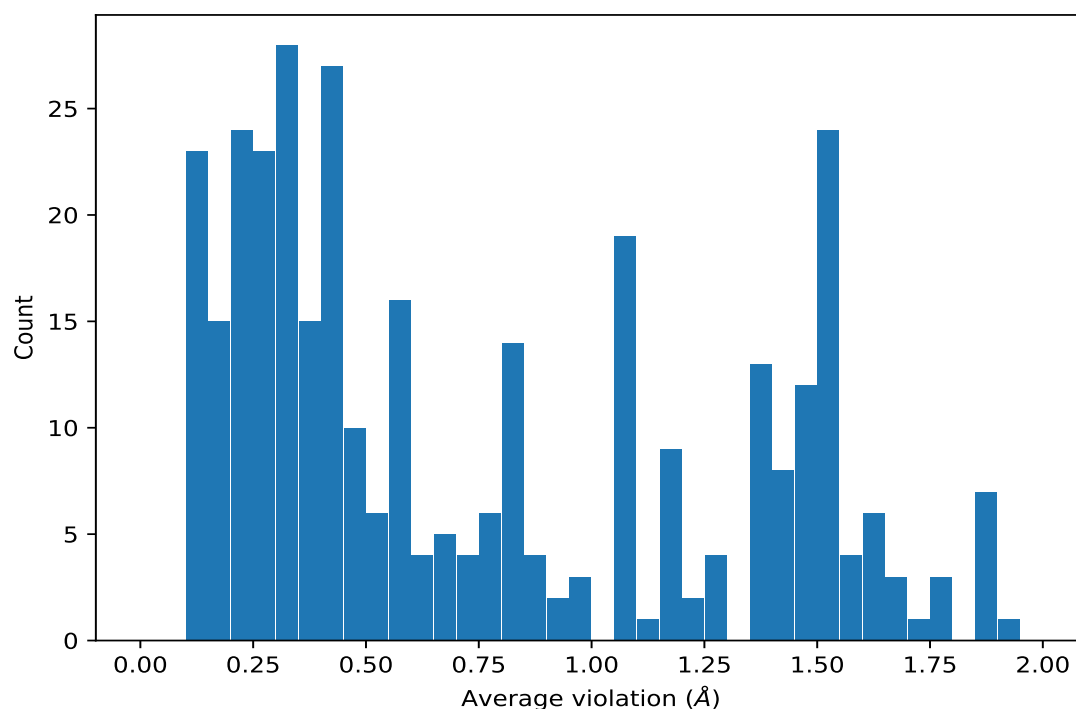
9.3.1 Bar graph : Distance violation statistics for the ensemble



9.4 Most violated distance restraints in the ensemble

9.4.1 Histogram : Distribution of mean distance violations

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



9.4.2 Table: Most violated distance restraints

The following table provides the mean and the standard deviation of the absolute value 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)
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB2	30	0.49	0.06
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB3	30	0.49	0.06
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE1	30	1.88	0.18
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE2	30	1.88	0.18
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE1	30	1.88	0.18
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE2	30	1.88	0.18
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE1	30	1.88	0.18
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE2	30	1.88	0.18
(1,920)	1:A:62:GLY:HA2	1:A:63:PRO:HD2	30	0.37	0.09
(1,916)	1:A:38:PRO:HB2	1:A:38:PRO:HA	30	0.36	0.05
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB2	30	1.39	0.0
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB3	30	1.39	0.0
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB2	30	1.39	0.0
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB3	30	1.39	0.0
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB2	30	1.46	0.0
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB3	30	1.46	0.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB2	30	1.46	0.0
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB3	30	1.46	0.0
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB2	30	1.51	0.0
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB3	30	1.51	0.0
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB2	30	1.51	0.0
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB3	30	1.51	0.0
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB2	30	1.54	0.0
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB3	30	1.54	0.0
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB2	30	1.54	0.0
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB3	30	1.54	0.0
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB2	30	1.44	0.0
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB3	30	1.44	0.0
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB2	30	1.44	0.0
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB3	30	1.44	0.0
(1,574)	1:A:61:GLU:HB2	1:A:61:GLU:HA	30	0.34	0.01
(1,548)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:61:GLU:HG3	30	0.17	0.0
(1,53)	1:A:115:LEU:HD11	1:A:115:LEU:HB3	30	0.59	0.0
(1,53)	1:A:115:LEU:HD12	1:A:115:LEU:HB3	30	0.59	0.0
(1,53)	1:A:115:LEU:HD13	1:A:115:LEU:HB3	30	0.59	0.0
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB2	30	1.45	0.0
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB3	30	1.45	0.0
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB2	30	1.45	0.0
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB3	30	1.45	0.0
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD1	30	1.64	0.17
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD2	30	1.64	0.17
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD1	30	1.64	0.17
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD2	30	1.64	0.17
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD1	30	1.64	0.17
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD2	30	1.64	0.17
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB2	30	1.46	0.0
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB3	30	1.46	0.0
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB2	30	1.46	0.0
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB3	30	1.46	0.0
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD1	30	0.42	0.07
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD2	30	0.42	0.07
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB2	30	1.55	0.0
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB3	30	1.55	0.0
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB2	30	1.55	0.0
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB3	30	1.55	0.0
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB2	30	1.52	0.0
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB3	30	1.52	0.0
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB2	30	1.52	0.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB3	30	1.52	0.0
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB2	30	1.52	0.0
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB3	30	1.52	0.0
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB2	30	1.52	0.0
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB3	30	1.52	0.0
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB2	30	1.54	0.0
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB3	30	1.54	0.0
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB2	30	1.54	0.0
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB3	30	1.54	0.0
(1,207)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE22	30	0.62	0.26
(1,207)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE22	30	0.62	0.26
(1,207)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE22	30	0.62	0.26
(1,18)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HA	30	0.18	0.01
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:ILE:HG12	30	0.32	0.02
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:ILE:HG12	30	0.32	0.02
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:ILE:HG12	30	0.32	0.02
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB2	30	1.49	0.0
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB3	30	1.49	0.0
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB2	30	1.49	0.0
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB3	30	1.49	0.0
(1,1179)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:58:ASP:HB3	30	0.8	0.1
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB2	30	1.25	0.0
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB3	30	1.25	0.0
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB2	30	1.25	0.0
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB3	30	1.25	0.0
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG21	30	1.09	0.37
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG22	30	1.09	0.37
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG23	30	1.09	0.37
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG21	30	1.09	0.37
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG22	30	1.09	0.37
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG23	30	1.09	0.37
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG21	30	1.09	0.37
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG22	30	1.09	0.37
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG23	30	1.09	0.37
(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB2	30	1.54	0.0
(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB3	30	1.54	0.0
(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB2	30	1.54	0.0
(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB3	30	1.54	0.0
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG21	30	0.43	0.0
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG22	30	0.43	0.0
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG23	30	0.43	0.0
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:6:SER:H	30	1.05	0.04

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:6:SER:H	30	1.05	0.04
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:6:SER:H	30	1.05	0.04
(1,922)	1:A:38:PRO:HD3	1:A:38:PRO:HB3	29	0.48	0.0
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD21	29	0.81	0.17
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD22	29	0.81	0.17
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD23	29	0.81	0.17
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE21	29	0.82	0.31
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE21	29	0.82	0.31
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE21	29	0.82	0.31
(1,512)	1:A:91:LYS:HB2	1:A:91:LYS:HA	28	0.34	0.04
(1,436)	1:A:12:GLN:H	1:A:12:GLN:HB3	28	0.57	0.01
(1,412)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HG3	28	0.26	0.0
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG21	27	0.57	0.39
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG22	27	0.57	0.39
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG23	27	0.57	0.39
(1,641)	1:A:52:ASN:HB2	1:A:53:LYS:H	26	0.5	0.04
(1,1142)	1:A:77:ASP:H	1:A:77:ASP:HB3	25	0.38	0.01
(1,105)	1:A:81:VAL:HA	1:A:84:GLU:HG2	25	1.12	0.49
(1,80)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	24	0.41	0.03
(1,80)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	24	0.41	0.03
(1,80)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	24	0.41	0.03
(1,80)	1:A:89:VAL:HG21	1:A:63:PRO:HG3	24	0.41	0.03
(1,80)	1:A:89:VAL:HG22	1:A:63:PRO:HG3	24	0.41	0.03
(1,80)	1:A:89:VAL:HG23	1:A:63:PRO:HG3	24	0.41	0.03
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	24	1.16	0.03
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	24	1.16	0.03
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	24	1.16	0.03
(1,76)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	22	0.42	0.07
(1,76)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	22	0.42	0.07
(1,76)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	22	0.42	0.07
(1,76)	1:A:113:LEU:HD11	1:A:117:LYS:HE2	22	0.42	0.07
(1,76)	1:A:113:LEU:HD12	1:A:117:LYS:HE2	22	0.42	0.07
(1,76)	1:A:113:LEU:HD13	1:A:117:LYS:HE2	22	0.42	0.07
(1,1366)	1:A:89:VAL:HA	1:A:63:PRO:HG3	22	0.24	0.1
(1,1159)	1:A:113:LEU:HG	1:A:117:LYS:HE2	22	0.9	0.09
(1,388)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:70:HIS:H	21	0.46	0.01
(1,233)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:36:GLU:HG2	21	0.23	0.0
(1,226)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	21	0.4	0.07
(1,226)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	21	0.4	0.07
(1,226)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	21	0.4	0.07
(1,1533)	1:A:9:GLU:HA	1:A:12:GLN:HG2	21	0.41	0.19
(1,1070)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:67:ASN:HA	21	0.5	0.07

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)
(1,407)	1:A:76:ARG:HA	1:A:76:ARG:HG3	20	0.19	0.07
(1,1587)	1:A:36:GLU:HB3	1:A:38:PRO:HD2	19	0.42	0.27
(1,1587)	1:A:31:LYS:HA	1:A:36:GLU:HB3	19	0.42	0.27
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HD3	17	0.16	0.04
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HD3	17	0.16	0.04
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HD3	17	0.16	0.04
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:5:VAL:H	17	0.17	0.05
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:5:VAL:H	17	0.17	0.05
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:5:VAL:H	17	0.17	0.05
(1,1618)	1:A:43:THR:H	1:A:40:ASP:OD1	16	0.29	0.11
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG11	16	0.21	0.06
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG12	16	0.21	0.06
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG13	16	0.21	0.06
(1,246)	1:A:84:GLU:HG3	1:A:84:GLU:HA	13	0.36	0.12
(1,295)	1:A:80:GLU:HA	1:A:80:GLU:HG3	12	0.53	0.22
(1,832)	1:A:70:HIS:HD2	1:A:70:HIS:H	10	1.21	0.12
(1,1463)	1:A:38:PRO:HD2	1:A:31:LYS:HD3	10	0.26	0.18
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD21	10	0.46	0.43
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD22	10	0.46	0.43
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD23	10	0.46	0.43
(1,997)	1:A:12:GLN:HA	1:A:12:GLN:HG3	9	0.23	0.03
(1,82)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:64:LEU:HD21	9	1.06	0.77
(1,82)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:64:LEU:HD22	9	1.06	0.77
(1,82)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:64:LEU:HD23	9	1.06	0.77
(1,692)	1:A:95:ASN:HA	1:A:95:ASN:HB3	9	0.21	0.01
(1,1382)	1:A:16:THR:HG21	1:A:20:SER:HB2	9	0.39	0.14
(1,1382)	1:A:16:THR:HG21	1:A:20:SER:HB3	9	0.39	0.14
(1,1382)	1:A:16:THR:HG22	1:A:20:SER:HB2	9	0.39	0.14
(1,1382)	1:A:16:THR:HG22	1:A:20:SER:HB3	9	0.39	0.14
(1,1382)	1:A:16:THR:HG23	1:A:20:SER:HB2	9	0.39	0.14
(1,1382)	1:A:16:THR:HG23	1:A:20:SER:HB3	9	0.39	0.14
(1,121)	1:A:23:ASN:HB3	1:A:23:ASN:HA	9	0.23	0.0
(1,927)	1:A:27:ASP:H	1:A:27:ASP:HB3	8	0.31	0.01
(1,351)	1:A:27:ASP:HA	1:A:27:ASP:HB2	8	0.36	0.01
(1,194)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:6:SER:HB2	8	0.72	0.87
(1,194)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:6:SER:HB2	8	0.72	0.87
(1,1547)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:38:PRO:HD2	8	0.4	0.26
(1,1547)	1:A:31:LYS:HA	1:A:36:GLU:HB2	8	0.4	0.26
(1,1447)	1:A:16:THR:HG21	1:A:17:GLU:HA	8	0.32	0.14
(1,1447)	1:A:16:THR:HG22	1:A:17:GLU:HA	8	0.32	0.14
(1,1447)	1:A:16:THR:HG23	1:A:17:GLU:HA	8	0.32	0.14
(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH11	8	0.2	0.04

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)
(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH12	8	0.2	0.04
(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH21	8	0.2	0.04
(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH22	8	0.2	0.04
(1,1182)	1:A:117:LYS:HG2	1:A:117:LYS:HE3	8	0.19	0.02
(1,1126)	1:A:5:VAL:H	1:A:4:THR:HG21	8	0.28	0.28
(1,1126)	1:A:5:VAL:H	1:A:4:THR:HG22	8	0.28	0.28
(1,1126)	1:A:5:VAL:H	1:A:4:THR:HG23	8	0.28	0.28
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB2	1:A:51:PHE:HB2	7	0.14	0.03
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB2	1:A:51:PHE:HB3	7	0.14	0.03
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB3	1:A:51:PHE:HB2	7	0.14	0.03
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB3	1:A:51:PHE:HB3	7	0.14	0.03
(1,174)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:91:LYS:HG2	6	0.16	0.0
(1,1483)	1:A:111:ASN:HD22	1:A:110:LYS:HE2	6	0.83	0.53
(1,1483)	1:A:111:ASN:HD22	1:A:110:LYS:HE3	6	0.83	0.53
(1,969)	1:A:48:LYS:HA	1:A:48:LYS:HG2	5	0.35	0.03
(1,969)	1:A:48:LYS:HA	1:A:48:LYS:HG3	5	0.35	0.03
(1,937)	1:A:123:ASP:H	1:A:123:ASP:HB3	5	0.24	0.03
(1,925)	1:A:55:GLN:HA	1:A:55:GLN:HG3	5	0.43	0.02
(1,886)	1:A:66:ASP:HB3	1:A:66:ASP:H	5	0.57	0.01
(1,809)	1:A:64:LEU:HD21	1:A:64:LEU:HA	5	0.8	0.05
(1,809)	1:A:64:LEU:HD22	1:A:64:LEU:HA	5	0.8	0.05
(1,809)	1:A:64:LEU:HD23	1:A:64:LEU:HA	5	0.8	0.05
(1,521)	1:A:106:LYS:HB2	1:A:103:ARG:HA	5	0.25	0.06
(1,464)	1:A:57:PHE:HA	1:A:64:LEU:HG	5	1.71	0.05
(1,352)	1:A:123:ASP:H	1:A:123:ASP:HB2	5	0.16	0.02
(1,1597)	1:A:53:LYS:HD2	1:A:14:TYR:HE1	5	0.59	0.13
(1,1597)	1:A:53:LYS:HD2	1:A:14:TYR:HE2	5	0.59	0.13
(1,1597)	1:A:53:LYS:HD3	1:A:14:TYR:HE1	5	0.59	0.13
(1,1597)	1:A:53:LYS:HD3	1:A:14:TYR:HE2	5	0.59	0.13
(1,1520)	1:A:111:ASN:HD21	1:A:107:CYS:HA	5	0.82	0.23
(1,1520)	1:A:111:ASN:HD21	1:A:108:PHE:HA	5	0.82	0.23
(1,1010)	1:A:54:MET:HG2	1:A:54:MET:HE1	5	0.51	0.01
(1,1010)	1:A:54:MET:HG2	1:A:54:MET:HE2	5	0.51	0.01
(1,1010)	1:A:54:MET:HG2	1:A:54:MET:HE3	5	0.51	0.01
(1,988)	1:A:12:GLN:H	1:A:12:GLN:HG2	4	0.13	0.01
(1,287)	1:A:84:GLU:H	1:A:84:GLU:HG3	4	0.15	0.02
(1,274)	1:A:28:TYR:HA	1:A:31:LYS:HG3	4	0.7	0.09
(1,1564)	1:A:103:ARG:HD2	1:A:103:ARG:HH11	4	0.21	0.03
(1,1564)	1:A:103:ARG:HD2	1:A:103:ARG:HH12	4	0.21	0.03
(1,1564)	1:A:103:ARG:HD2	1:A:103:ARG:HH21	4	0.21	0.03
(1,1564)	1:A:103:ARG:HD2	1:A:103:ARG:HH22	4	0.21	0.03
(1,1408)	1:A:16:THR:HG21	1:A:19:VAL:HB	4	0.31	0.04

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)
(1,1408)	1:A:16:THR:HG22	1:A:19:VAL:HB	4	0.31	0.04
(1,1408)	1:A:16:THR:HG23	1:A:19:VAL:HB	4	0.31	0.04
(1,1408)	1:A:16:THR:HG21	1:A:17:GLU:HG3	4	0.31	0.04
(1,1408)	1:A:16:THR:HG22	1:A:17:GLU:HG3	4	0.31	0.04
(1,1408)	1:A:16:THR:HG23	1:A:17:GLU:HG3	4	0.31	0.04
(1,1367)	1:A:54:MET:HE1	1:A:11:LEU:HD11	4	0.26	0.14
(1,1367)	1:A:54:MET:HE1	1:A:11:LEU:HD12	4	0.26	0.14
(1,1367)	1:A:54:MET:HE1	1:A:11:LEU:HD13	4	0.26	0.14
(1,1367)	1:A:54:MET:HE2	1:A:11:LEU:HD11	4	0.26	0.14
(1,1367)	1:A:54:MET:HE2	1:A:11:LEU:HD12	4	0.26	0.14
(1,1367)	1:A:54:MET:HE2	1:A:11:LEU:HD13	4	0.26	0.14
(1,1367)	1:A:54:MET:HE3	1:A:11:LEU:HD11	4	0.26	0.14
(1,1367)	1:A:54:MET:HE3	1:A:11:LEU:HD12	4	0.26	0.14
(1,1367)	1:A:54:MET:HE3	1:A:11:LEU:HD13	4	0.26	0.14
(1,1154)	1:A:31:LYS:HA	1:A:31:LYS:HG2	4	0.32	0.02
(1,729)	1:A:91:LYS:H	1:A:91:LYS:HG3	3	0.46	0.25
(1,695)	1:A:27:ASP:H	1:A:27:ASP:HB2	3	0.37	0.0
(1,69)	1:A:30:GLU:HG2	1:A:30:GLU:HA	3	0.29	0.03
(1,661)	1:A:110:LYS:HB3	1:A:110:LYS:HG2	3	0.34	0.01
(1,655)	1:A:31:LYS:H	1:A:30:GLU:HB2	3	0.29	0.03
(1,590)	1:A:6:SER:HB2	1:A:54:MET:HE1	3	0.67	0.1
(1,590)	1:A:6:SER:HB2	1:A:54:MET:HE2	3	0.67	0.1
(1,590)	1:A:6:SER:HB2	1:A:54:MET:HE3	3	0.67	0.1
(1,471)	1:A:13:ARG:H	1:A:13:ARG:HB3	3	0.26	0.01
(1,321)	1:A:30:GLU:HG2	1:A:30:GLU:H	3	0.55	0.05
(1,315)	1:A:36:GLU:HG3	1:A:36:GLU:HA	3	0.13	0.03
(1,169)	1:A:3:PHE:H	1:A:2:GLU:HB2	3	0.2	0.08
(1,1578)	1:A:30:GLU:HG3	1:A:27:ASP:HA	3	1.86	0.26
(1,1482)	1:A:48:LYS:H	1:A:48:LYS:HG2	3	0.17	0.05
(1,1482)	1:A:48:LYS:H	1:A:48:LYS:HG3	3	0.17	0.05
(1,145)	1:A:95:ASN:HA	1:A:92:ASN:HD22	3	0.62	0.32
(1,1393)	1:A:38:PRO:HD2	1:A:31:LYS:HD2	3	0.29	0.12
(1,1127)	1:A:55:GLN:HA	1:A:55:GLN:HG2	3	0.43	0.0
(1,991)	1:A:3:PHE:H	1:A:2:GLU:HA	2	0.16	0.01
(1,955)	1:A:51:PHE:H	1:A:50:VAL:HB	2	0.69	0.01
(1,797)	1:A:82:ARG:HA	1:A:65:VAL:HG11	2	1.77	0.02
(1,797)	1:A:82:ARG:HA	1:A:65:VAL:HG12	2	1.77	0.02
(1,797)	1:A:82:ARG:HA	1:A:65:VAL:HG13	2	1.77	0.02
(1,617)	1:A:50:VAL:HB	1:A:47:ILE:HA	2	1.94	0.04
(1,580)	1:A:82:ARG:HG3	1:A:65:VAL:HG11	2	1.38	0.01
(1,580)	1:A:82:ARG:HG3	1:A:65:VAL:HG12	2	1.38	0.01
(1,580)	1:A:82:ARG:HG3	1:A:65:VAL:HG13	2	1.38	0.01

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)
(1,565)	1:A:43:THR:HG21	1:A:38:PRO:HD3	2	0.15	0.01
(1,565)	1:A:43:THR:HG22	1:A:38:PRO:HD3	2	0.15	0.01
(1,565)	1:A:43:THR:HG23	1:A:38:PRO:HD3	2	0.15	0.01
(1,555)	1:A:96:ASN:H	1:A:92:ASN:HD22	2	0.95	0.53
(1,541)	1:A:33:LYS:HA	1:A:33:LYS:HG2	2	0.23	0.01
(1,533)	1:A:50:VAL:HG21	1:A:50:VAL:HA	2	0.39	0.02
(1,533)	1:A:50:VAL:HG22	1:A:50:VAL:HA	2	0.39	0.02
(1,533)	1:A:50:VAL:HG23	1:A:50:VAL:HA	2	0.39	0.02
(1,478)	1:A:50:VAL:HG21	1:A:46:TYR:HE1	2	0.78	0.14
(1,478)	1:A:50:VAL:HG21	1:A:46:TYR:HE2	2	0.78	0.14
(1,478)	1:A:50:VAL:HG22	1:A:46:TYR:HE1	2	0.78	0.14
(1,478)	1:A:50:VAL:HG22	1:A:46:TYR:HE2	2	0.78	0.14
(1,478)	1:A:50:VAL:HG23	1:A:46:TYR:HE1	2	0.78	0.14
(1,478)	1:A:50:VAL:HG23	1:A:46:TYR:HE2	2	0.78	0.14
(1,449)	1:A:4:THR:HA	1:A:4:THR:HG21	2	0.26	0.02
(1,449)	1:A:4:THR:HA	1:A:4:THR:HG22	2	0.26	0.02
(1,449)	1:A:4:THR:HA	1:A:4:THR:HG23	2	0.26	0.02
(1,433)	1:A:62:GLY:HA2	1:A:63:PRO:HD3	2	0.15	0.02
(1,424)	1:A:50:VAL:HG21	1:A:15:ARG:HA	2	0.97	0.13
(1,424)	1:A:50:VAL:HG22	1:A:15:ARG:HA	2	0.97	0.13
(1,424)	1:A:50:VAL:HG23	1:A:15:ARG:HA	2	0.97	0.13
(1,376)	1:A:65:VAL:HG21	1:A:65:VAL:H	2	1.06	0.01
(1,376)	1:A:65:VAL:HG22	1:A:65:VAL:H	2	1.06	0.01
(1,376)	1:A:65:VAL:HG23	1:A:65:VAL:H	2	1.06	0.01
(1,319)	1:A:66:ASP:H	1:A:65:VAL:HB	2	1.08	0.01
(1,168)	1:A:50:VAL:HG21	1:A:18:CYS:HB2	2	1.4	0.01
(1,168)	1:A:50:VAL:HG21	1:A:18:CYS:HB3	2	1.4	0.01
(1,168)	1:A:50:VAL:HG22	1:A:18:CYS:HB2	2	1.4	0.01
(1,168)	1:A:50:VAL:HG22	1:A:18:CYS:HB3	2	1.4	0.01
(1,168)	1:A:50:VAL:HG23	1:A:18:CYS:HB2	2	1.4	0.01
(1,168)	1:A:50:VAL:HG23	1:A:18:CYS:HB3	2	1.4	0.01
(1,1561)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:20:SER:HB2	2	0.13	0.01
(1,1561)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:20:SER:HB3	2	0.13	0.01
(1,1561)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:20:SER:HB2	2	0.13	0.01
(1,1561)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:20:SER:HB3	2	0.13	0.01
(1,1561)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:20:SER:HB2	2	0.13	0.01
(1,1561)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:20:SER:HB3	2	0.13	0.01
(1,1560)	1:A:66:ASP:HA	1:A:65:VAL:HG11	2	0.22	0.01
(1,1560)	1:A:66:ASP:HA	1:A:65:VAL:HG12	2	0.22	0.01
(1,1560)	1:A:66:ASP:HA	1:A:65:VAL:HG13	2	0.22	0.01
(1,1550)	1:A:52:ASN:HD21	1:A:57:PHE:H	2	1.22	0.1
(1,1509)	1:A:50:VAL:HG11	1:A:54:MET:HG3	2	0.6	0.07

Continued on next page...

Continued from previous page...

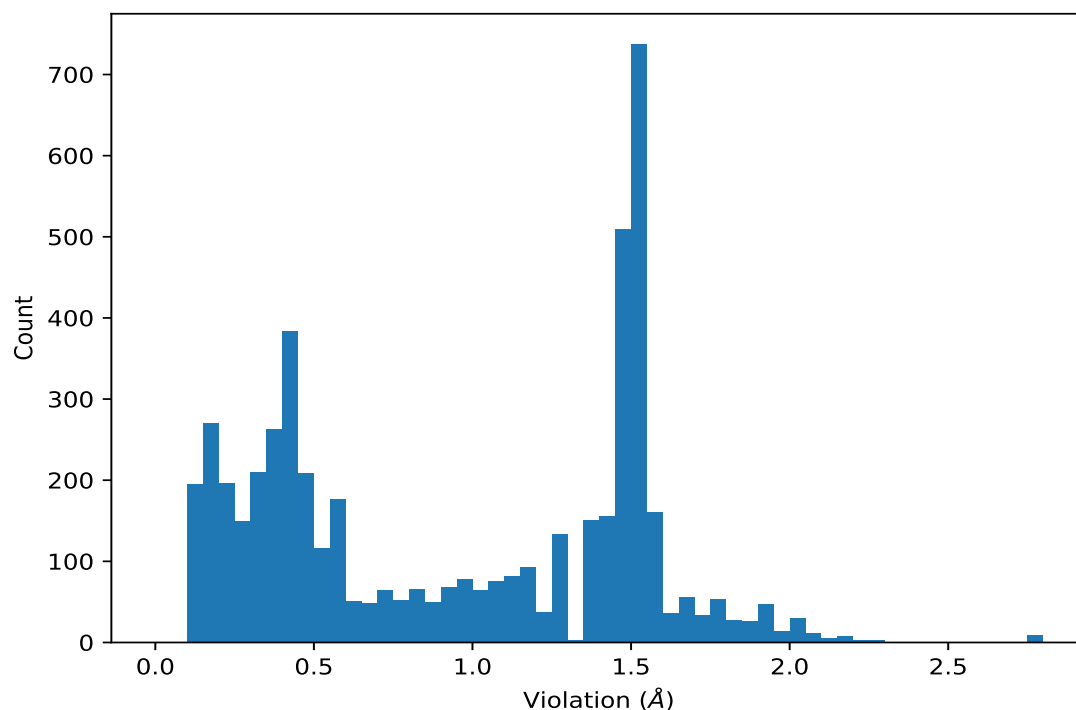
Key	Atom-1	Atom-2	Models ¹	Mean (Å)	SD ¹ (Å)
(1,1509)	1:A:50:VAL:HG12	1:A:54:MET:HG3	2	0.6	0.07
(1,1509)	1:A:50:VAL:HG13	1:A:54:MET:HG3	2	0.6	0.07
(1,1489)	1:A:93:THR:H	1:A:103:ARG:HH11	2	0.88	0.52
(1,1489)	1:A:93:THR:H	1:A:103:ARG:HH12	2	0.88	0.52
(1,1489)	1:A:93:THR:H	1:A:103:ARG:HH21	2	0.88	0.52
(1,1489)	1:A:93:THR:H	1:A:103:ARG:HH22	2	0.88	0.52
(1,1440)	1:A:84:GLU:HA	1:A:87:LYS:HD2	2	0.73	0.28
(1,1440)	1:A:84:GLU:HA	1:A:87:LYS:HD3	2	0.73	0.28
(1,1376)	1:A:50:VAL:HG11	1:A:54:MET:HG3	2	0.33	0.03
(1,1376)	1:A:50:VAL:HG12	1:A:54:MET:HG3	2	0.33	0.03
(1,1376)	1:A:50:VAL:HG13	1:A:54:MET:HG3	2	0.33	0.03
(1,1376)	1:A:50:VAL:HG11	1:A:14:TYR:HB2	2	0.33	0.03
(1,1376)	1:A:50:VAL:HG11	1:A:14:TYR:HB3	2	0.33	0.03
(1,1376)	1:A:50:VAL:HG12	1:A:14:TYR:HB2	2	0.33	0.03
(1,1376)	1:A:50:VAL:HG12	1:A:14:TYR:HB3	2	0.33	0.03
(1,1376)	1:A:50:VAL:HG13	1:A:14:TYR:HB2	2	0.33	0.03
(1,1376)	1:A:50:VAL:HG13	1:A:14:TYR:HB3	2	0.33	0.03
(1,1233)	1:A:14:TYR:HD1	1:A:54:MET:HG3	2	0.21	0.08
(1,1233)	1:A:14:TYR:HD2	1:A:54:MET:HG3	2	0.21	0.08
(1,1228)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:LYS:HB2	2	0.49	0.03
(1,12)	1:A:22:LEU:H	1:A:21:SER:HB2	2	0.13	0.0
(1,12)	1:A:22:LEU:H	1:A:21:SER:HB3	2	0.13	0.0
(1,1171)	1:A:50:VAL:HB	1:A:50:VAL:H	2	0.45	0.02
(1,1104)	1:A:82:ARG:HG2	1:A:65:VAL:HG11	2	1.66	0.04
(1,1104)	1:A:82:ARG:HG2	1:A:65:VAL:HG12	2	1.66	0.04
(1,1104)	1:A:82:ARG:HG2	1:A:65:VAL:HG13	2	1.66	0.04
(1,1048)	1:A:119:SER:HB2	1:A:119:SER:H	2	0.11	0.0
(1,1025)	1:A:64:LEU:H	1:A:64:LEU:HD21	2	0.12	0.01
(1,1025)	1:A:64:LEU:H	1:A:64:LEU:HD22	2	0.12	0.01
(1,1025)	1:A:64:LEU:H	1:A:64:LEU:HD23	2	0.12	0.01
(1,1020)	1:A:50:VAL:HG11	1:A:51:PHE:HD1	2	1.16	0.2
(1,1020)	1:A:50:VAL:HG11	1:A:51:PHE:HD2	2	1.16	0.2
(1,1020)	1:A:50:VAL:HG12	1:A:51:PHE:HD1	2	1.16	0.2
(1,1020)	1:A:50:VAL:HG12	1:A:51:PHE:HD2	2	1.16	0.2
(1,1020)	1:A:50:VAL:HG13	1:A:51:PHE:HD1	2	1.16	0.2
(1,1020)	1:A:50:VAL:HG13	1:A:51:PHE:HD2	2	1.16	0.2

¹Number of violated models, ²Standard deviation

9.5 All distance violations

9.5.1 Histogram : Distribution of distance violations

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

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)
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG21	18	2.79
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG22	18	2.79
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG23	18	2.79
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG21	18	2.79
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG22	18	2.79
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG23	18	2.79
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG21	18	2.79
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG22	18	2.79
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG23	18	2.79
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG21	9	2.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG22	9	2.27
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG23	9	2.27
(1,1578)	1:A:30:GLU:HG3	1:A:27:ASP:HA	9	2.23
(1,194)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:6:SER:HB2	9	2.22
(1,194)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:6:SER:HB2	9	2.22
(1,194)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:6:SER:HB2	28	2.19
(1,194)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:6:SER:HB2	28	2.19
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE1	18	2.15
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE2	18	2.15
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE1	18	2.15
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE2	18	2.15
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE1	18	2.15
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE2	18	2.15
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE1	24	2.1
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE2	24	2.1
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE1	24	2.1
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE2	24	2.1
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE1	24	2.1
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE2	24	2.1
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE1	5	2.08
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE2	5	2.08
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE1	5	2.08
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE2	5	2.08
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE1	5	2.08
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE2	5	2.08
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE1	20	2.07
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE2	20	2.07
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE1	20	2.07
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE2	20	2.07
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE1	20	2.07
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE2	20	2.07
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE1	9	2.03
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE2	9	2.03
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE1	9	2.03
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE2	9	2.03
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE1	9	2.03
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE2	9	2.03
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE1	17	2.03
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE2	17	2.03
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE1	17	2.03
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE2	17	2.03
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE1	17	2.03

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE2	17	2.03
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE1	14	2.02
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE2	14	2.02
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE1	14	2.02
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE2	14	2.02
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE1	14	2.02
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE2	14	2.02
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE1	2	2.0
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE2	2	2.0
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE1	2	2.0
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE2	2	2.0
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE1	2	2.0
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE2	2	2.0
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE1	23	2.0
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE2	23	2.0
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE1	23	2.0
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE2	23	2.0
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE1	23	2.0
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE2	23	2.0
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE1	19	1.98
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE2	19	1.98
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE1	19	1.98
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE2	19	1.98
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE1	19	1.98
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE2	19	1.98
(1,617)	1:A:50:VAL:HB	1:A:47:ILE:HA	28	1.98
(1,105)	1:A:81:VAL:HA	1:A:84:GLU:HG2	5	1.98
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE1	4	1.97
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE2	4	1.97
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE1	4	1.97
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE2	4	1.97
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE1	4	1.97
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE2	4	1.97
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE1	3	1.94
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE2	3	1.94
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE1	3	1.94
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE2	3	1.94
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE1	3	1.94
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE2	3	1.94
(1,1483)	1:A:111:ASN:HD22	1:A:110:LYS:HE2	8	1.94
(1,1483)	1:A:111:ASN:HD22	1:A:110:LYS:HE3	8	1.94
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE1	28	1.93

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE2	28	1.93
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE1	28	1.93
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE2	28	1.93
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE1	28	1.93
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE2	28	1.93
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD1	11	1.93
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD2	11	1.93
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD1	11	1.93
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD2	11	1.93
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD1	11	1.93
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD2	11	1.93
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE1	22	1.92
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE2	22	1.92
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE1	22	1.92
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE2	22	1.92
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE1	22	1.92
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE2	22	1.92
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE1	27	1.92
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE2	27	1.92
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE1	27	1.92
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE2	27	1.92
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE1	27	1.92
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE2	27	1.92
(1,82)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:64:LEU:HD21	7	1.92
(1,82)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:64:LEU:HD22	7	1.92
(1,82)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:64:LEU:HD23	7	1.92
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE1	11	1.9
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE2	11	1.9
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE1	11	1.9
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE2	11	1.9
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE1	11	1.9
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE2	11	1.9
(1,617)	1:A:50:VAL:HB	1:A:47:ILE:HA	18	1.9
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD1	8	1.9
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD2	8	1.9
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD1	8	1.9
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD2	8	1.9
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD1	8	1.9
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD2	8	1.9
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD1	14	1.89
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD2	14	1.89
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD1	14	1.89

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD2	14	1.89
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD1	14	1.89
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD2	14	1.89
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE1	8	1.87
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE2	8	1.87
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE1	8	1.87
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE2	8	1.87
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE1	8	1.87
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE2	8	1.87
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE1	15	1.85
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE2	15	1.85
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE1	15	1.85
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE2	15	1.85
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE1	15	1.85
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE2	15	1.85
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE1	21	1.85
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE2	21	1.85
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE1	21	1.85
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE2	21	1.85
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE1	21	1.85
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE2	21	1.85
(1,593)	1:A:78:ALA:HA	1:A:69:VAL:HG11	1	1.85
(1,593)	1:A:78:ALA:HA	1:A:69:VAL:HG12	1	1.85
(1,593)	1:A:78:ALA:HA	1:A:69:VAL:HG13	1	1.85
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD1	10	1.84
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD2	10	1.84
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD1	10	1.84
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD2	10	1.84
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD1	10	1.84
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD2	10	1.84
(1,82)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:64:LEU:HD21	13	1.83
(1,82)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:64:LEU:HD22	13	1.83
(1,82)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:64:LEU:HD23	13	1.83
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE1	29	1.82
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE2	29	1.82
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE1	29	1.82
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE2	29	1.82
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE1	29	1.82
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE2	29	1.82
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE1	26	1.8
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE2	26	1.8
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE1	26	1.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE2	26	1.8
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE1	26	1.8
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE2	26	1.8
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE1	30	1.8
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE2	30	1.8
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE1	30	1.8
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE2	30	1.8
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE1	30	1.8
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE2	30	1.8
(1,464)	1:A:57:PHE:HA	1:A:64:LEU:HG	13	1.8
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE1	25	1.79
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE2	25	1.79
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE1	25	1.79
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE2	25	1.79
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE1	25	1.79
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE2	25	1.79
(1,797)	1:A:82:ARG:HA	1:A:65:VAL:HG11	6	1.79
(1,797)	1:A:82:ARG:HA	1:A:65:VAL:HG12	6	1.79
(1,797)	1:A:82:ARG:HA	1:A:65:VAL:HG13	6	1.79
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE1	13	1.77
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE2	13	1.77
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE1	13	1.77
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE2	13	1.77
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE1	13	1.77
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE2	13	1.77
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD1	28	1.77
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD2	28	1.77
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD1	28	1.77
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD2	28	1.77
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD1	28	1.77
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD2	28	1.77
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE1	7	1.76
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE2	7	1.76
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE1	7	1.76
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE2	7	1.76
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE1	7	1.76
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE2	7	1.76
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE1	10	1.76
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE2	10	1.76
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE1	10	1.76
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE2	10	1.76
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE1	10	1.76

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE2	10	1.76
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE1	12	1.76
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE2	12	1.76
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE1	12	1.76
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE2	12	1.76
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE1	12	1.76
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE2	12	1.76
(1,797)	1:A:82:ARG:HA	1:A:65:VAL:HG11	13	1.76
(1,797)	1:A:82:ARG:HA	1:A:65:VAL:HG12	13	1.76
(1,797)	1:A:82:ARG:HA	1:A:65:VAL:HG13	13	1.76
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE1	1	1.75
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE2	1	1.75
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE1	1	1.75
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE2	1	1.75
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE1	1	1.75
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE2	1	1.75
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD1	15	1.75
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD2	15	1.75
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD1	15	1.75
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD2	15	1.75
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD1	15	1.75
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD2	15	1.75
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD1	9	1.73
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD2	9	1.73
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD1	9	1.73
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD2	9	1.73
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD1	9	1.73
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD2	9	1.73
(1,82)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:64:LEU:HD21	12	1.72
(1,82)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:64:LEU:HD22	12	1.72
(1,82)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:64:LEU:HD23	12	1.72
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD1	12	1.72
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD2	12	1.72
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD1	12	1.72
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD2	12	1.72
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD1	12	1.72
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD2	12	1.72
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD1	24	1.72
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD2	24	1.72
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD1	24	1.72
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD2	24	1.72
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD1	24	1.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD2	24	1.72
(1,464)	1:A:57:PHE:HA	1:A:64:LEU:HG	29	1.71
(1,105)	1:A:81:VAL:HA	1:A:84:GLU:HG2	3	1.71
(1,105)	1:A:81:VAL:HA	1:A:84:GLU:HG2	23	1.71
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD1	21	1.7
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD2	21	1.7
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD1	21	1.7
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD2	21	1.7
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD1	21	1.7
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD2	21	1.7
(1,464)	1:A:57:PHE:HA	1:A:64:LEU:HG	10	1.7
(1,1104)	1:A:82:ARG:HG2	1:A:65:VAL:HG11	13	1.7
(1,1104)	1:A:82:ARG:HG2	1:A:65:VAL:HG12	13	1.7
(1,1104)	1:A:82:ARG:HG2	1:A:65:VAL:HG13	13	1.7
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD1	20	1.69
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD2	20	1.69
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD1	20	1.69
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD2	20	1.69
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD1	20	1.69
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD2	20	1.69
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD1	22	1.69
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD2	22	1.69
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD1	22	1.69
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD2	22	1.69
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD1	22	1.69
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD2	22	1.69
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD1	6	1.68
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD2	6	1.68
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD1	6	1.68
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD2	6	1.68
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD1	6	1.68
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD2	6	1.68
(1,464)	1:A:57:PHE:HA	1:A:64:LEU:HG	7	1.68
(1,1578)	1:A:30:GLU:HG3	1:A:27:ASP:HA	19	1.68
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE1	6	1.67
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE2	6	1.67
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE1	6	1.67
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE2	6	1.67
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE1	6	1.67
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE2	6	1.67
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD1	5	1.67
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD2	5	1.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD1	5	1.67
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD2	5	1.67
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD1	5	1.67
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD2	5	1.67
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD1	25	1.67
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD2	25	1.67
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD1	25	1.67
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD2	25	1.67
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD1	25	1.67
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD2	25	1.67
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD1	7	1.66
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD2	7	1.66
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD1	7	1.66
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD2	7	1.66
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD1	7	1.66
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD2	7	1.66
(1,464)	1:A:57:PHE:HA	1:A:64:LEU:HG	12	1.66
(1,1578)	1:A:30:GLU:HG3	1:A:27:ASP:HA	22	1.66
(1,82)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:64:LEU:HD21	10	1.65
(1,82)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:64:LEU:HD22	10	1.65
(1,82)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:64:LEU:HD23	10	1.65
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD1	1	1.65
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD2	1	1.65
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD1	1	1.65
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD2	1	1.65
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD1	1	1.65
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD2	1	1.65
(1,105)	1:A:81:VAL:HA	1:A:84:GLU:HG2	26	1.65
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD1	26	1.63
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD2	26	1.63
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD1	26	1.63
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD2	26	1.63
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD1	26	1.63
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD2	26	1.63
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD1	4	1.61
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD2	4	1.61
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD1	4	1.61
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD2	4	1.61
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD1	4	1.61
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD2	4	1.61
(1,1104)	1:A:82:ARG:HG2	1:A:65:VAL:HG11	6	1.61
(1,1104)	1:A:82:ARG:HG2	1:A:65:VAL:HG12	6	1.61

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1104)	1:A:82:ARG:HG2	1:A:65:VAL:HG13	6	1.61
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD1	3	1.6
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD2	3	1.6
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD1	3	1.6
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD2	3	1.6
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD1	3	1.6
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD2	3	1.6
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD1	16	1.6
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD2	16	1.6
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD1	16	1.6
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD2	16	1.6
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD1	16	1.6
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD2	16	1.6
(1,385)	1:A:78:ALA:HB1	1:A:69:VAL:HG11	1	1.6
(1,385)	1:A:78:ALA:HB1	1:A:69:VAL:HG12	1	1.6
(1,385)	1:A:78:ALA:HB1	1:A:69:VAL:HG13	1	1.6
(1,385)	1:A:78:ALA:HB2	1:A:69:VAL:HG11	1	1.6
(1,385)	1:A:78:ALA:HB2	1:A:69:VAL:HG12	1	1.6
(1,385)	1:A:78:ALA:HB2	1:A:69:VAL:HG13	1	1.6
(1,385)	1:A:78:ALA:HB3	1:A:69:VAL:HG11	1	1.6
(1,385)	1:A:78:ALA:HB3	1:A:69:VAL:HG12	1	1.6
(1,385)	1:A:78:ALA:HB3	1:A:69:VAL:HG13	1	1.6
(1,82)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:64:LEU:HD21	29	1.59
(1,82)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:64:LEU:HD22	29	1.59
(1,82)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:64:LEU:HD23	29	1.59
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD1	17	1.59
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD2	17	1.59
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD1	17	1.59
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD2	17	1.59
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD1	17	1.59
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD2	17	1.59
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD1	18	1.59
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD2	18	1.59
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD1	18	1.59
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD2	18	1.59
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD1	18	1.59
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD2	18	1.59
(1,688)	1:A:82:ARG:HA	1:A:69:VAL:HG21	1	1.58
(1,688)	1:A:82:ARG:HA	1:A:69:VAL:HG22	1	1.58
(1,688)	1:A:82:ARG:HA	1:A:69:VAL:HG23	1	1.58
(1,329)	1:A:73:ALA:HB1	1:A:69:VAL:HG11	1	1.58
(1,329)	1:A:73:ALA:HB1	1:A:69:VAL:HG12	1	1.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,329)	1:A:73:ALA:HB1	1:A:69:VAL:HG13	1	1.58
(1,329)	1:A:73:ALA:HB2	1:A:69:VAL:HG11	1	1.58
(1,329)	1:A:73:ALA:HB2	1:A:69:VAL:HG12	1	1.58
(1,329)	1:A:73:ALA:HB2	1:A:69:VAL:HG13	1	1.58
(1,329)	1:A:73:ALA:HB3	1:A:69:VAL:HG11	1	1.58
(1,329)	1:A:73:ALA:HB3	1:A:69:VAL:HG12	1	1.58
(1,329)	1:A:73:ALA:HB3	1:A:69:VAL:HG13	1	1.58
(1,105)	1:A:81:VAL:HA	1:A:84:GLU:HG2	7	1.58
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD1	29	1.57
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD2	29	1.57
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD1	29	1.57
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD2	29	1.57
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD1	29	1.57
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD2	29	1.57
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD1	23	1.56
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD2	23	1.56
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD1	23	1.56
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD2	23	1.56
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD1	23	1.56
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD2	23	1.56
(1,105)	1:A:81:VAL:HA	1:A:84:GLU:HG2	24	1.56
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB2	1	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB3	1	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB2	1	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB3	1	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB2	2	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB3	2	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB2	2	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB3	2	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB2	3	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB3	3	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB2	3	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB3	3	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB2	4	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB3	4	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB2	4	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB3	4	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB2	5	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB3	5	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB2	5	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB3	5	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB2	6	1.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB3	6	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB2	6	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB3	6	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB2	7	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB3	7	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB2	7	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB3	7	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB2	8	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB3	8	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB2	8	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB3	8	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB2	9	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB3	9	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB2	9	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB3	9	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB2	10	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB3	10	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB2	10	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB3	10	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB2	11	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB3	11	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB2	11	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB3	11	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB2	12	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB3	12	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB2	12	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB3	12	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB2	13	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB3	13	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB2	13	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB3	13	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB2	14	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB3	14	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB2	14	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB3	14	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB2	15	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB3	15	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB2	15	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB3	15	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB2	16	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB3	16	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB2	16	1.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB3	16	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB2	17	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB3	17	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB2	17	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB3	17	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB2	18	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB3	18	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB2	18	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB3	18	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB2	19	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB3	19	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB2	19	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB3	19	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB2	20	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB3	20	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB2	20	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB3	20	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB2	21	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB3	21	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB2	21	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB3	21	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB2	22	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB3	22	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB2	22	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB3	22	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB2	23	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB3	23	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB2	23	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB3	23	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB2	24	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB3	24	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB2	24	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB3	24	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB2	25	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB3	25	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB2	25	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB3	25	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB2	26	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB3	26	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB2	26	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB3	26	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB2	27	1.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB3	27	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB2	27	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB3	27	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB2	28	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB3	28	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB2	28	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB3	28	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB2	29	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB3	29	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB2	29	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB3	29	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB2	30	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:88:CYS:HB3	30	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB2	30	1.55
(1,294)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:88:CYS:HB3	30	1.55
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB2	1	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB3	1	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB2	1	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB3	1	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB2	2	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB3	2	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB2	2	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB3	2	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB2	3	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB3	3	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB2	3	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB3	3	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB2	4	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB3	4	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB2	4	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB3	4	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB2	5	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB3	5	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB2	5	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB3	5	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB2	6	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB3	6	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB2	6	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB3	6	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB2	7	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB3	7	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB2	7	1.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB3	7	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB2	8	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB3	8	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB2	8	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB3	8	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB2	9	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB3	9	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB2	9	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB3	9	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB2	10	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB3	10	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB2	10	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB3	10	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB2	11	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB3	11	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB2	11	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB3	11	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB2	12	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB3	12	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB2	12	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB3	12	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB2	13	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB3	13	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB2	13	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB3	13	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB2	14	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB3	14	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB2	14	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB3	14	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB2	15	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB3	15	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB2	15	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB3	15	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB2	16	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB3	16	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB2	16	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB3	16	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB2	17	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB3	17	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB2	17	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB3	17	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB2	18	1.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB3	18	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB2	18	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB3	18	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB2	19	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB3	19	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB2	19	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB3	19	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB2	20	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB3	20	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB2	20	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB3	20	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB2	21	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB3	21	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB2	21	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB3	21	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB2	22	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB3	22	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB2	22	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB3	22	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB2	23	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB3	23	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB2	23	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB3	23	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB2	24	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB3	24	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB2	24	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB3	24	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB2	25	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB3	25	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB2	25	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB3	25	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB2	26	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB3	26	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB2	26	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB3	26	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB2	27	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB3	27	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB2	27	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB3	27	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB2	28	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB3	28	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB2	28	1.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB3	28	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB2	29	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB3	29	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB2	29	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB3	29	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB2	30	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:11:LEU:HB3	30	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB2	30	1.54
(1,589)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:11:LEU:HB3	30	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB2	1	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB3	1	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB2	1	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB3	1	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB2	2	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB3	2	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB2	2	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB3	2	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB2	3	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB3	3	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB2	3	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB3	3	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB2	4	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB3	4	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB2	4	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB3	4	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB2	5	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB3	5	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB2	5	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB3	5	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB2	6	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB3	6	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB2	6	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB3	6	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB2	7	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB3	7	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB2	7	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB3	7	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB2	8	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB3	8	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB2	8	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB3	8	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB2	9	1.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB3	9	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB2	9	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB3	9	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB2	10	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB3	10	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB2	10	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB3	10	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB2	11	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB3	11	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB2	11	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB3	11	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB2	12	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB3	12	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB2	12	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB3	12	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB2	13	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB3	13	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB2	13	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB3	13	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB2	14	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB3	14	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB2	14	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB3	14	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB2	15	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB3	15	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB2	15	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB3	15	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB2	16	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB3	16	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB2	16	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB3	16	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB2	17	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB3	17	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB2	17	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB3	17	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB2	18	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB3	18	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB2	18	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB3	18	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB2	19	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB3	19	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB2	19	1.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB3	19	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB2	20	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB3	20	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB2	20	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB3	20	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB2	21	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB3	21	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB2	21	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB3	21	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB2	22	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB3	22	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB2	22	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB3	22	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB2	23	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB3	23	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB2	23	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB3	23	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB2	24	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB3	24	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB2	24	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB3	24	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB2	25	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB3	25	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB2	25	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB3	25	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB2	26	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB3	26	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB2	26	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB3	26	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB2	27	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB3	27	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB2	27	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB3	27	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB2	28	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB3	28	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB2	28	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB3	28	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB2	29	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB3	29	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB2	29	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB3	29	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB2	30	1.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,278)	1:A:31:LYS:HB2	1:A:31:LYS:HB3	30	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB2	30	1.54
(1,278)	1:A:31:LYS:HB3	1:A:31:LYS:HB3	30	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB2	1	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB3	1	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB2	1	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB3	1	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB2	2	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB3	2	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB2	2	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB3	2	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB2	3	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB3	3	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB2	3	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB3	3	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB2	4	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB3	4	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB2	4	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB3	4	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB2	5	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB3	5	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB2	5	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB3	5	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB2	6	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB3	6	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB2	6	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB3	6	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB2	7	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB3	7	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB2	7	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB3	7	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB2	8	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB3	8	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB2	8	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB3	8	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB2	9	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB3	9	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB2	9	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB3	9	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB2	10	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB3	10	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB2	10	1.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB3	10	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB2	11	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB3	11	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB2	11	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB3	11	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB2	12	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB3	12	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB2	12	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB3	12	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB2	13	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB3	13	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB2	13	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB3	13	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB2	14	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB3	14	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB2	14	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB3	14	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB2	15	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB3	15	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB2	15	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB3	15	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB2	16	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB3	16	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB2	16	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB3	16	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB2	17	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB3	17	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB2	17	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB3	17	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB2	18	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB3	18	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB2	18	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB3	18	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB2	19	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB3	19	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB2	19	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB3	19	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB2	20	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB3	20	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB2	20	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB3	20	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB2	21	1.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB3	21	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB2	21	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB3	21	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB2	22	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB3	22	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB2	22	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB3	22	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB2	23	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB3	23	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB2	23	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB3	23	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB2	24	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB3	24	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB2	24	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB3	24	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB2	25	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB3	25	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB2	25	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB3	25	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB2	26	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB3	26	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB2	26	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB3	26	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB2	27	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB3	27	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB2	27	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB3	27	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB2	28	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB3	28	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB2	28	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB3	28	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB2	29	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB3	29	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB2	29	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB3	29	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB2	30	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB2	1:A:22:LEU:HB3	30	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB2	30	1.54
(1,110)	1:A:22:LEU:HB3	1:A:22:LEU:HB3	30	1.54
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD1	27	1.52
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD2	27	1.52
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD1	27	1.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD2	27	1.52
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD1	27	1.52
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD2	27	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB2	1	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB3	1	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB2	1	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB3	1	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB2	2	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB3	2	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB2	2	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB3	2	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB2	3	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB3	3	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB2	3	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB3	3	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB2	4	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB3	4	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB2	4	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB3	4	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB2	5	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB3	5	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB2	5	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB3	5	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB2	6	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB3	6	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB2	6	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB3	6	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB2	7	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB3	7	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB2	7	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB3	7	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB2	8	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB3	8	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB2	8	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB3	8	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB2	9	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB3	9	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB2	9	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB3	9	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB2	10	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB3	10	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB2	10	1.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB3	10	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB2	11	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB3	11	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB2	11	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB3	11	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB2	12	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB3	12	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB2	12	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB3	12	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB2	13	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB3	13	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB2	13	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB3	13	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB2	14	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB3	14	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB2	14	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB3	14	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB2	15	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB3	15	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB2	15	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB3	15	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB2	16	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB3	16	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB2	16	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB3	16	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB2	17	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB3	17	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB2	17	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB3	17	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB2	18	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB3	18	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB2	18	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB3	18	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB2	19	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB3	19	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB2	19	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB3	19	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB2	20	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB3	20	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB2	20	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB3	20	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB2	21	1.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB3	21	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB2	21	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB3	21	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB2	22	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB3	22	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB2	22	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB3	22	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB2	23	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB3	23	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB2	23	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB3	23	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB2	24	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB3	24	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB2	24	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB3	24	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB2	25	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB3	25	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB2	25	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB3	25	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB2	26	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB3	26	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB2	26	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB3	26	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB2	27	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB3	27	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB2	27	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB3	27	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB2	28	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB3	28	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB2	28	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB3	28	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB2	29	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB3	29	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB2	29	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB3	29	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB2	30	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB2	1:A:18:CYS:HB3	30	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB2	30	1.52
(1,292)	1:A:18:CYS:HB3	1:A:18:CYS:HB3	30	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB2	1	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB3	1	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB2	1	1.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB3	1	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB2	2	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB3	2	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB2	2	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB3	2	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB2	3	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB3	3	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB2	3	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB3	3	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB2	4	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB3	4	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB2	4	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB3	4	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB2	5	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB3	5	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB2	5	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB3	5	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB2	6	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB3	6	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB2	6	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB3	6	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB2	7	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB3	7	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB2	7	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB3	7	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB2	8	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB3	8	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB2	8	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB3	8	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB2	9	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB3	9	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB2	9	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB3	9	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB2	10	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB3	10	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB2	10	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB3	10	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB2	11	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB3	11	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB2	11	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB3	11	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB2	12	1.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB3	12	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB2	12	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB3	12	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB2	13	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB3	13	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB2	13	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB3	13	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB2	14	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB3	14	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB2	14	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB3	14	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB2	15	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB3	15	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB2	15	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB3	15	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB2	16	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB3	16	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB2	16	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB3	16	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB2	17	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB3	17	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB2	17	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB3	17	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB2	18	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB3	18	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB2	18	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB3	18	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB2	19	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB3	19	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB2	19	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB3	19	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB2	20	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB3	20	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB2	20	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB3	20	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB2	21	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB3	21	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB2	21	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB3	21	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB2	22	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB3	22	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB2	22	1.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB3	22	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB2	23	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB3	23	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB2	23	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB3	23	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB2	24	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB3	24	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB2	24	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB3	24	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB2	25	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB3	25	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB2	25	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB3	25	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB2	26	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB3	26	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB2	26	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB3	26	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB2	27	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB3	27	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB2	27	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB3	27	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB2	28	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB3	28	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB2	28	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB3	28	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB2	29	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB3	29	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB2	29	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB3	29	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB2	30	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB2	1:A:55:GLN:HB3	30	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB2	30	1.52
(1,281)	1:A:55:GLN:HB3	1:A:55:GLN:HB3	30	1.52
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB2	1	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB3	1	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB2	1	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB3	1	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB2	2	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB3	2	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB2	2	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB3	2	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB2	3	1.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB3	3	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB2	3	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB3	3	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB2	4	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB3	4	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB2	4	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB3	4	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB2	5	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB3	5	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB2	5	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB3	5	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB2	6	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB3	6	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB2	6	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB3	6	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB2	7	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB3	7	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB2	7	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB3	7	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB2	8	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB3	8	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB2	8	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB3	8	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB2	9	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB3	9	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB2	9	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB3	9	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB2	10	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB3	10	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB2	10	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB3	10	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB2	11	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB3	11	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB2	11	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB3	11	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB2	12	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB3	12	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB2	12	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB3	12	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB2	13	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB3	13	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB2	13	1.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB3	13	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB2	14	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB3	14	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB2	14	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB3	14	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB2	15	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB3	15	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB2	15	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB3	15	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB2	16	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB3	16	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB2	16	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB3	16	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB2	17	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB3	17	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB2	17	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB3	17	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB2	18	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB3	18	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB2	18	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB3	18	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB2	19	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB3	19	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB2	19	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB3	19	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB2	20	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB3	20	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB2	20	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB3	20	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB2	21	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB3	21	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB2	21	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB3	21	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB2	22	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB3	22	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB2	22	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB3	22	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB2	23	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB3	23	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB2	23	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB3	23	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB2	24	1.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB3	24	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB2	24	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB3	24	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB2	25	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB3	25	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB2	25	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB3	25	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB2	26	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB3	26	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB2	26	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB3	26	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB2	27	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB3	27	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB2	27	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB3	27	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB2	28	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB3	28	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB2	28	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB3	28	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB2	29	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB3	29	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB2	29	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB3	29	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB2	30	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB2	1:A:112:ASN:HB3	30	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB2	30	1.51
(1,591)	1:A:112:ASN:HB3	1:A:112:ASN:HB3	30	1.51
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD1	19	1.51
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD2	19	1.51
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD1	19	1.51
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD2	19	1.51
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD1	19	1.51
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD2	19	1.51
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD1	2	1.5
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD2	2	1.5
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD1	2	1.5
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD2	2	1.5
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD1	2	1.5
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD2	2	1.5
(1,1511)	1:A:65:VAL:HG21	1:A:85:VAL:HG11	10	1.49
(1,1511)	1:A:65:VAL:HG21	1:A:85:VAL:HG12	10	1.49
(1,1511)	1:A:65:VAL:HG21	1:A:85:VAL:HG13	10	1.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1511)	1:A:65:VAL:HG22	1:A:85:VAL:HG11	10	1.49
(1,1511)	1:A:65:VAL:HG22	1:A:85:VAL:HG12	10	1.49
(1,1511)	1:A:65:VAL:HG22	1:A:85:VAL:HG13	10	1.49
(1,1511)	1:A:65:VAL:HG23	1:A:85:VAL:HG11	10	1.49
(1,1511)	1:A:65:VAL:HG23	1:A:85:VAL:HG12	10	1.49
(1,1511)	1:A:65:VAL:HG23	1:A:85:VAL:HG13	10	1.49
(1,1511)	1:A:89:VAL:HG21	1:A:85:VAL:HG11	10	1.49
(1,1511)	1:A:89:VAL:HG21	1:A:85:VAL:HG12	10	1.49
(1,1511)	1:A:89:VAL:HG21	1:A:85:VAL:HG13	10	1.49
(1,1511)	1:A:89:VAL:HG22	1:A:85:VAL:HG11	10	1.49
(1,1511)	1:A:89:VAL:HG22	1:A:85:VAL:HG12	10	1.49
(1,1511)	1:A:89:VAL:HG22	1:A:85:VAL:HG13	10	1.49
(1,1511)	1:A:89:VAL:HG23	1:A:85:VAL:HG11	10	1.49
(1,1511)	1:A:89:VAL:HG23	1:A:85:VAL:HG12	10	1.49
(1,1511)	1:A:89:VAL:HG23	1:A:85:VAL:HG13	10	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB2	1	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB3	1	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB2	1	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB3	1	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB2	2	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB3	2	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB2	2	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB3	2	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB2	3	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB3	3	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB2	3	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB3	3	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB2	4	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB3	4	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB2	4	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB3	4	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB2	5	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB3	5	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB2	5	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB3	5	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB2	6	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB3	6	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB2	6	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB3	6	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB2	7	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB3	7	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB2	7	1.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB3	7	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB2	8	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB3	8	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB2	8	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB3	8	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB2	9	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB3	9	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB2	9	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB3	9	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB2	10	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB3	10	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB2	10	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB3	10	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB2	11	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB3	11	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB2	11	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB3	11	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB2	12	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB3	12	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB2	12	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB3	12	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB2	13	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB3	13	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB2	13	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB3	13	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB2	14	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB3	14	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB2	14	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB3	14	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB2	15	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB3	15	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB2	15	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB3	15	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB2	16	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB3	16	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB2	16	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB3	16	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB2	17	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB3	17	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB2	17	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB3	17	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB2	18	1.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB3	18	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB2	18	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB3	18	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB2	19	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB3	19	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB2	19	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB3	19	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB2	20	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB3	20	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB2	20	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB3	20	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB2	21	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB3	21	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB2	21	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB3	21	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB2	22	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB3	22	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB2	22	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB3	22	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB2	23	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB3	23	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB2	23	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB3	23	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB2	24	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB3	24	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB2	24	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB3	24	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB2	25	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB3	25	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB2	25	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB3	25	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB2	26	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB3	26	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB2	26	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB3	26	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB2	27	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB3	27	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB2	27	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB3	27	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB2	28	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB3	28	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB2	28	1.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB3	28	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB2	29	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB3	29	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB2	29	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB3	29	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB2	30	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:90:ASP:HB3	30	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB2	30	1.49
(1,1193)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:90:ASP:HB3	30	1.49
(1,555)	1:A:96:ASN:H	1:A:92:ASN:HD22	19	1.48
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG21	6	1.48
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG22	6	1.48
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG23	6	1.48
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG21	6	1.48
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG22	6	1.48
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG23	6	1.48
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG21	6	1.48
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG22	6	1.48
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG23	6	1.48
(1,105)	1:A:81:VAL:HA	1:A:84:GLU:HG2	6	1.48
(1,105)	1:A:81:VAL:HA	1:A:84:GLU:HG2	22	1.47
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB2	1	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB3	1	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB2	1	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB3	1	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB2	2	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB3	2	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB2	2	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB3	2	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB2	3	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB3	3	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB2	3	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB3	3	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB2	4	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB3	4	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB2	4	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB3	4	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB2	5	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB3	5	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB2	5	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB3	5	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB2	6	1.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB3	6	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB2	6	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB3	6	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB2	7	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB3	7	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB2	7	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB3	7	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB2	8	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB3	8	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB2	8	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB3	8	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB2	9	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB3	9	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB2	9	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB3	9	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB2	10	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB3	10	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB2	10	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB3	10	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB2	11	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB3	11	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB2	11	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB3	11	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB2	12	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB3	12	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB2	12	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB3	12	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB2	13	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB3	13	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB2	13	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB3	13	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB2	14	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB3	14	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB2	14	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB3	14	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB2	15	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB3	15	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB2	15	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB3	15	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB2	16	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB3	16	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB2	16	1.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB3	16	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB2	17	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB3	17	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB2	17	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB3	17	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB2	18	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB3	18	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB2	18	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB3	18	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB2	19	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB3	19	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB2	19	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB3	19	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB2	20	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB3	20	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB2	20	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB3	20	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB2	21	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB3	21	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB2	21	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB3	21	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB2	22	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB3	22	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB2	22	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB3	22	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB2	23	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB3	23	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB2	23	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB3	23	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB2	24	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB3	24	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB2	24	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB3	24	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB2	25	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB3	25	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB2	25	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB3	25	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB2	26	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB3	26	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB2	26	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB3	26	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB2	27	1.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB3	27	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB2	27	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB3	27	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB2	28	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB3	28	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB2	28	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB3	28	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB2	29	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB3	29	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB2	29	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB3	29	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB2	30	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:10:ASP:HB3	30	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB2	30	1.46
(1,652)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:10:ASP:HB3	30	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB2	1	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB3	1	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB2	1	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB3	1	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB2	2	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB3	2	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB2	2	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB3	2	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB2	3	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB3	3	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB2	3	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB3	3	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB2	4	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB3	4	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB2	4	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB3	4	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB2	5	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB3	5	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB2	5	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB3	5	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB2	6	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB3	6	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB2	6	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB3	6	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB2	7	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB3	7	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB2	7	1.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB3	7	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB2	8	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB3	8	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB2	8	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB3	8	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB2	9	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB3	9	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB2	9	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB3	9	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB2	10	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB3	10	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB2	10	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB3	10	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB2	11	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB3	11	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB2	11	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB3	11	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB2	12	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB3	12	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB2	12	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB3	12	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB2	13	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB3	13	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB2	13	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB3	13	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB2	14	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB3	14	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB2	14	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB3	14	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB2	15	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB3	15	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB2	15	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB3	15	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB2	16	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB3	16	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB2	16	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB3	16	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB2	17	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB3	17	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB2	17	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB3	17	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB2	18	1.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB3	18	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB2	18	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB3	18	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB2	19	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB3	19	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB2	19	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB3	19	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB2	20	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB3	20	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB2	20	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB3	20	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB2	21	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB3	21	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB2	21	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB3	21	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB2	22	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB3	22	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB2	22	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB3	22	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB2	23	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB3	23	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB2	23	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB3	23	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB2	24	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB3	24	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB2	24	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB3	24	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB2	25	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB3	25	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB2	25	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB3	25	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB2	26	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB3	26	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB2	26	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB3	26	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB2	27	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB3	27	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB2	27	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB3	27	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB2	28	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB3	28	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB2	28	1.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB3	28	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB2	29	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB3	29	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB2	29	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB3	29	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB2	30	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB2	1:A:86:LEU:HB3	30	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB2	30	1.46
(1,416)	1:A:86:LEU:HB3	1:A:86:LEU:HB3	30	1.46
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB2	1	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB3	1	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB2	1	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB3	1	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB2	2	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB3	2	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB2	2	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB3	2	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB2	3	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB3	3	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB2	3	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB3	3	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB2	4	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB3	4	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB2	4	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB3	4	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB2	5	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB3	5	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB2	5	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB3	5	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB2	6	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB3	6	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB2	6	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB3	6	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB2	7	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB3	7	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB2	7	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB3	7	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB2	8	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB3	8	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB2	8	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB3	8	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB2	9	1.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB3	9	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB2	9	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB3	9	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB2	10	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB3	10	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB2	10	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB3	10	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB2	11	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB3	11	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB2	11	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB3	11	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB2	12	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB3	12	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB2	12	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB3	12	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB2	13	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB3	13	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB2	13	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB3	13	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB2	14	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB3	14	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB2	14	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB3	14	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB2	15	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB3	15	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB2	15	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB3	15	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB2	16	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB3	16	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB2	16	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB3	16	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB2	17	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB3	17	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB2	17	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB3	17	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB2	18	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB3	18	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB2	18	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB3	18	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB2	19	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB3	19	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB2	19	1.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB3	19	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB2	20	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB3	20	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB2	20	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB3	20	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB2	21	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB3	21	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB2	21	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB3	21	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB2	22	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB3	22	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB2	22	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB3	22	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB2	23	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB3	23	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB2	23	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB3	23	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB2	24	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB3	24	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB2	24	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB3	24	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB2	25	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB3	25	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB2	25	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB3	25	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB2	26	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB3	26	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB2	26	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB3	26	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB2	27	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB3	27	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB2	27	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB3	27	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB2	28	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB3	28	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB2	28	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB3	28	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB2	29	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB3	29	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB2	29	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB3	29	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB2	30	1.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,497)	1:A:3:PHE:HB2	1:A:3:PHE:HB3	30	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB2	30	1.45
(1,497)	1:A:3:PHE:HB3	1:A:3:PHE:HB3	30	1.45
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB2	1	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB3	1	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB2	1	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB3	1	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB2	2	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB3	2	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB2	2	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB3	2	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB2	3	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB3	3	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB2	3	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB3	3	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB2	4	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB3	4	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB2	4	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB3	4	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB2	5	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB3	5	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB2	5	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB3	5	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB2	6	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB3	6	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB2	6	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB3	6	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB2	7	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB3	7	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB2	7	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB3	7	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB2	8	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB3	8	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB2	8	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB3	8	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB2	9	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB3	9	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB2	9	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB3	9	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB2	10	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB3	10	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB2	10	1.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB3	10	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB2	11	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB3	11	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB2	11	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB3	11	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB2	12	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB3	12	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB2	12	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB3	12	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB2	13	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB3	13	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB2	13	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB3	13	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB2	14	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB3	14	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB2	14	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB3	14	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB2	15	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB3	15	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB2	15	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB3	15	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB2	16	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB3	16	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB2	16	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB3	16	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB2	17	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB3	17	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB2	17	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB3	17	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB2	18	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB3	18	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB2	18	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB3	18	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB2	19	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB3	19	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB2	19	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB3	19	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB2	20	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB3	20	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB2	20	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB3	20	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB2	21	1.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB3	21	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB2	21	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB3	21	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB2	22	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB3	22	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB2	22	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB3	22	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB2	23	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB3	23	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB2	23	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB3	23	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB2	24	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB3	24	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB2	24	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB3	24	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB2	25	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB3	25	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB2	25	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB3	25	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB2	26	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB3	26	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB2	26	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB3	26	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB2	27	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB3	27	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB2	27	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB3	27	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB2	28	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB3	28	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB2	28	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB3	28	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB2	29	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB3	29	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB2	29	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB3	29	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB2	30	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB2	1:A:76:ARG:HB3	30	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB2	30	1.44
(1,585)	1:A:76:ARG:HB3	1:A:76:ARG:HB3	30	1.44
(1,74)	1:A:85:VAL:HG21	1:A:108:PHE:HE1	10	1.43
(1,74)	1:A:85:VAL:HG21	1:A:108:PHE:HE2	10	1.43
(1,74)	1:A:85:VAL:HG22	1:A:108:PHE:HE1	10	1.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,74)	1:A:85:VAL:HG22	1:A:108:PHE:HE2	10	1.43
(1,74)	1:A:85:VAL:HG23	1:A:108:PHE:HE1	10	1.43
(1,74)	1:A:85:VAL:HG23	1:A:108:PHE:HE2	10	1.43
(1,921)	1:A:86:LEU:HA	1:A:85:VAL:HG11	10	1.42
(1,921)	1:A:86:LEU:HA	1:A:85:VAL:HG12	10	1.42
(1,921)	1:A:86:LEU:HA	1:A:85:VAL:HG13	10	1.42
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD1	13	1.42
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD2	13	1.42
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD1	13	1.42
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD2	13	1.42
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD1	13	1.42
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD2	13	1.42
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD21	6	1.42
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD22	6	1.42
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD23	6	1.42
(1,168)	1:A:50:VAL:HG21	1:A:18:CYS:HB2	28	1.41
(1,168)	1:A:50:VAL:HG21	1:A:18:CYS:HB3	28	1.41
(1,168)	1:A:50:VAL:HG22	1:A:18:CYS:HB2	28	1.41
(1,168)	1:A:50:VAL:HG22	1:A:18:CYS:HB3	28	1.41
(1,168)	1:A:50:VAL:HG23	1:A:18:CYS:HB2	28	1.41
(1,168)	1:A:50:VAL:HG23	1:A:18:CYS:HB3	28	1.41
(1,832)	1:A:70:HIS:HD2	1:A:70:HIS:H	22	1.4
(1,168)	1:A:50:VAL:HG21	1:A:18:CYS:HB2	18	1.4
(1,168)	1:A:50:VAL:HG21	1:A:18:CYS:HB3	18	1.4
(1,168)	1:A:50:VAL:HG22	1:A:18:CYS:HB2	18	1.4
(1,168)	1:A:50:VAL:HG22	1:A:18:CYS:HB3	18	1.4
(1,168)	1:A:50:VAL:HG23	1:A:18:CYS:HB2	18	1.4
(1,168)	1:A:50:VAL:HG23	1:A:18:CYS:HB3	18	1.4
(1,1489)	1:A:93:THR:H	1:A:103:ARG:HH11	4	1.4
(1,1489)	1:A:93:THR:H	1:A:103:ARG:HH12	4	1.4
(1,1489)	1:A:93:THR:H	1:A:103:ARG:HH21	4	1.4
(1,1489)	1:A:93:THR:H	1:A:103:ARG:HH22	4	1.4
(1,105)	1:A:81:VAL:HA	1:A:84:GLU:HG2	27	1.4
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB2	1	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB3	1	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB2	1	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB3	1	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB2	2	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB3	2	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB2	2	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB3	2	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB2	3	1.39

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB3	3	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB2	3	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB3	3	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB2	4	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB3	4	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB2	4	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB3	4	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB2	5	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB3	5	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB2	5	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB3	5	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB2	6	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB3	6	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB2	6	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB3	6	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB2	7	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB3	7	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB2	7	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB3	7	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB2	8	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB3	8	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB2	8	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB3	8	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB2	9	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB3	9	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB2	9	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB3	9	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB2	10	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB3	10	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB2	10	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB3	10	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB2	11	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB3	11	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB2	11	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB3	11	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB2	12	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB3	12	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB2	12	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB3	12	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB2	13	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB3	13	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB2	13	1.39

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB3	13	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB2	14	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB3	14	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB2	14	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB3	14	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB2	15	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB3	15	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB2	15	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB3	15	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB2	16	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB3	16	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB2	16	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB3	16	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB2	17	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB3	17	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB2	17	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB3	17	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB2	18	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB3	18	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB2	18	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB3	18	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB2	19	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB3	19	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB2	19	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB3	19	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB2	20	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB3	20	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB2	20	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB3	20	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB2	21	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB3	21	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB2	21	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB3	21	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB2	22	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB3	22	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB2	22	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB3	22	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB2	23	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB3	23	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB2	23	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB3	23	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB2	24	1.39

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB3	24	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB2	24	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB3	24	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB2	25	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB3	25	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB2	25	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB3	25	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB2	26	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB3	26	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB2	26	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB3	26	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB2	27	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB3	27	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB2	27	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB3	27	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB2	28	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB3	28	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB2	28	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB3	28	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB2	29	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB3	29	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB2	29	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB3	29	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB2	30	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB2	1:A:111:ASN:HB3	30	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB2	30	1.39
(1,782)	1:A:111:ASN:HB3	1:A:111:ASN:HB3	30	1.39
(1,580)	1:A:82:ARG:HG3	1:A:65:VAL:HG11	6	1.39
(1,580)	1:A:82:ARG:HG3	1:A:65:VAL:HG12	6	1.39
(1,580)	1:A:82:ARG:HG3	1:A:65:VAL:HG13	6	1.39
(1,105)	1:A:81:VAL:HA	1:A:84:GLU:HG2	21	1.39
(1,832)	1:A:70:HIS:HD2	1:A:70:HIS:H	14	1.38
(1,580)	1:A:82:ARG:HG3	1:A:65:VAL:HG11	13	1.38
(1,580)	1:A:82:ARG:HG3	1:A:65:VAL:HG12	13	1.38
(1,580)	1:A:82:ARG:HG3	1:A:65:VAL:HG13	13	1.38
(1,207)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE22	29	1.37
(1,207)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE22	29	1.37
(1,207)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE22	29	1.37
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG21	8	1.36
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG22	8	1.36
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG23	8	1.36
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG21	8	1.36

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG22	8	1.36
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG23	8	1.36
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG21	8	1.36
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG22	8	1.36
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG23	8	1.36
(1,1020)	1:A:50:VAL:HG11	1:A:51:PHE:HD1	18	1.36
(1,1020)	1:A:50:VAL:HG11	1:A:51:PHE:HD2	18	1.36
(1,1020)	1:A:50:VAL:HG12	1:A:51:PHE:HD1	18	1.36
(1,1020)	1:A:50:VAL:HG12	1:A:51:PHE:HD2	18	1.36
(1,1020)	1:A:50:VAL:HG13	1:A:51:PHE:HD1	18	1.36
(1,1020)	1:A:50:VAL:HG13	1:A:51:PHE:HD2	18	1.36
(1,832)	1:A:70:HIS:HD2	1:A:70:HIS:H	30	1.35
(1,105)	1:A:81:VAL:HA	1:A:84:GLU:HG2	8	1.35
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE21	30	1.35
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE21	30	1.35
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE21	30	1.35
(1,1587)	1:A:36:GLU:HB3	1:A:38:PRO:HD2	27	1.32
(1,1587)	1:A:31:LYS:HA	1:A:36:GLU:HB3	27	1.32
(1,1550)	1:A:52:ASN:HD21	1:A:57:PHE:H	25	1.32
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG21	21	1.29
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG22	21	1.29
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG23	21	1.29
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG21	21	1.29
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG22	21	1.29
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG23	21	1.29
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG21	21	1.29
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG22	21	1.29
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG23	21	1.29
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE21	10	1.26
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE21	10	1.26
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE21	10	1.26
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB2	1	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB3	1	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB2	1	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB3	1	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB2	2	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB3	2	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB2	2	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB3	2	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB2	3	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB3	3	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB2	3	1.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB3	3	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB2	4	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB3	4	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB2	4	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB3	4	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB2	5	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB3	5	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB2	5	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB3	5	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB2	6	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB3	6	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB2	6	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB3	6	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB2	7	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB3	7	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB2	7	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB3	7	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB2	8	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB3	8	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB2	8	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB3	8	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB2	9	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB3	9	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB2	9	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB3	9	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB2	10	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB3	10	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB2	10	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB3	10	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB2	11	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB3	11	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB2	11	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB3	11	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB2	12	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB3	12	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB2	12	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB3	12	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB2	13	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB3	13	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB2	13	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB3	13	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB2	14	1.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB3	14	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB2	14	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB3	14	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB2	15	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB3	15	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB2	15	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB3	15	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB2	16	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB3	16	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB2	16	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB3	16	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB2	17	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB3	17	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB2	17	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB3	17	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB2	18	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB3	18	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB2	18	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB3	18	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB2	19	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB3	19	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB2	19	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB3	19	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB2	20	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB3	20	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB2	20	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB3	20	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB2	21	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB3	21	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB2	21	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB3	21	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB2	22	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB3	22	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB2	22	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB3	22	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB2	23	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB3	23	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB2	23	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB3	23	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB2	24	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB3	24	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB2	24	1.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB3	24	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB2	25	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB3	25	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB2	25	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB3	25	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB2	26	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB3	26	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB2	26	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB3	26	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB2	27	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB3	27	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB2	27	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB3	27	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB2	28	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB3	28	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB2	28	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB3	28	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB2	29	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB3	29	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB2	29	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB3	29	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB2	30	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB2	1:A:59:ASP:HB3	30	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB2	30	1.25
(1,1151)	1:A:59:ASP:HB3	1:A:59:ASP:HB3	30	1.25
(1,105)	1:A:81:VAL:HA	1:A:84:GLU:HG2	10	1.25
(1,105)	1:A:81:VAL:HA	1:A:84:GLU:HG2	14	1.25
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG21	1	1.24
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG22	1	1.24
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG23	1	1.24
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG21	1	1.24
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG22	1	1.24
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG23	1	1.24
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG21	1	1.24
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG22	1	1.24
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG23	1	1.24
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG21	22	1.24
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG22	22	1.24
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG23	22	1.24
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG21	22	1.24
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG22	22	1.24
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG23	22	1.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG21	22	1.24
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG22	22	1.24
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG23	22	1.24
(1,832)	1:A:70:HIS:HD2	1:A:70:HIS:H	13	1.21
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE21	3	1.21
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE21	3	1.21
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE21	3	1.21
(1,832)	1:A:70:HIS:HD2	1:A:70:HIS:H	12	1.2
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	23	1.2
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	23	1.2
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	23	1.2
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	28	1.2
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	28	1.2
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	28	1.2
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG21	5	1.2
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG22	5	1.2
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG23	5	1.2
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG21	5	1.2
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG22	5	1.2
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG23	5	1.2
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG21	5	1.2
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG22	5	1.2
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG23	5	1.2
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE1	16	1.19
(1,952)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HE2	16	1.19
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE1	16	1.19
(1,952)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HE2	16	1.19
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE1	16	1.19
(1,952)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HE2	16	1.19
(1,832)	1:A:70:HIS:HD2	1:A:70:HIS:H	18	1.19
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	25	1.19
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	25	1.19
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	25	1.19
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG21	3	1.19
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG22	3	1.19
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG23	3	1.19
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG21	3	1.19
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG22	3	1.19
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG23	3	1.19
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG21	3	1.19
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG22	3	1.19
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG23	3	1.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG21	15	1.19
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG22	15	1.19
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG23	15	1.19
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG21	15	1.19
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG22	15	1.19
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG23	15	1.19
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG21	15	1.19
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG22	15	1.19
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG23	15	1.19
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG21	1	1.18
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG22	1	1.18
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG23	1	1.18
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	12	1.18
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	12	1.18
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	12	1.18
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	21	1.18
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	21	1.18
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	21	1.18
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	29	1.18
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	29	1.18
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	29	1.18
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE21	17	1.18
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE21	17	1.18
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE21	17	1.18
(1,1520)	1:A:111:ASN:HD21	1:A:107:CYS:HA	16	1.17
(1,1520)	1:A:111:ASN:HD21	1:A:108:PHE:HA	16	1.17
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	2	1.17
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	2	1.17
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	2	1.17
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	3	1.17
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	3	1.17
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	3	1.17
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	6	1.17
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	6	1.17
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	6	1.17
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	13	1.17
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	13	1.17
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	13	1.17
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	15	1.17
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	15	1.17
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	15	1.17
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	24	1.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	24	1.17
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	24	1.17
(1,1466)	1:A:85:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HB2	10	1.17
(1,1466)	1:A:85:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HB2	10	1.17
(1,1466)	1:A:85:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HB2	10	1.17
(1,1466)	1:A:68:LEU:HG	1:A:85:VAL:HG11	10	1.17
(1,1466)	1:A:68:LEU:HG	1:A:85:VAL:HG12	10	1.17
(1,1466)	1:A:68:LEU:HG	1:A:85:VAL:HG13	10	1.17
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE21	20	1.16
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE21	20	1.16
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE21	20	1.16
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	5	1.15
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	5	1.15
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	5	1.15
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	10	1.15
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	10	1.15
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	10	1.15
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	11	1.15
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	11	1.15
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	11	1.15
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	19	1.15
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	19	1.15
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	19	1.15
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	26	1.15
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	26	1.15
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	26	1.15
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	27	1.15
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	27	1.15
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	27	1.15
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE21	26	1.15
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE21	26	1.15
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE21	26	1.15
(1,832)	1:A:70:HIS:HD2	1:A:70:HIS:H	17	1.14
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	4	1.14
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	4	1.14
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	4	1.14
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	14	1.14
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	14	1.14
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	14	1.14
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	16	1.14
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	16	1.14
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	16	1.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	20	1.14
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	20	1.14
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	20	1.14
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD21	18	1.14
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD22	18	1.14
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD23	18	1.14
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG21	25	1.14
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG22	25	1.14
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG23	25	1.14
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG21	25	1.14
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG22	25	1.14
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG23	25	1.14
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG21	25	1.14
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG22	25	1.14
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG23	25	1.14
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:6:SER:H	1	1.14
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:6:SER:H	1	1.14
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:6:SER:H	1	1.14
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	18	1.13
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	18	1.13
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	18	1.13
(1,1550)	1:A:52:ASN:HD21	1:A:57:PHE:H	28	1.12
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD21	17	1.12
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD22	17	1.12
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD23	17	1.12
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG21	29	1.12
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG22	29	1.12
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG23	29	1.12
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG21	29	1.12
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG22	29	1.12
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG23	29	1.12
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG21	29	1.12
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG22	29	1.12
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG23	29	1.12
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:6:SER:H	5	1.12
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:6:SER:H	5	1.12
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:6:SER:H	5	1.12
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:6:SER:H	10	1.12
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:6:SER:H	10	1.12
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:6:SER:H	10	1.12
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD21	11	1.11
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD22	11	1.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD23	11	1.11
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:6:SER:H	6	1.11
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:6:SER:H	6	1.11
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:6:SER:H	6	1.11
(1,832)	1:A:70:HIS:HD2	1:A:70:HIS:H	11	1.1
(1,424)	1:A:50:VAL:HG21	1:A:15:ARG:HA	18	1.1
(1,424)	1:A:50:VAL:HG22	1:A:15:ARG:HA	18	1.1
(1,424)	1:A:50:VAL:HG23	1:A:15:ARG:HA	18	1.1
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG21	13	1.1
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG22	13	1.1
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG23	13	1.1
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG21	13	1.1
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG22	13	1.1
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG23	13	1.1
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG21	13	1.1
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG22	13	1.1
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG23	13	1.1
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG21	24	1.1
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG22	24	1.1
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG23	24	1.1
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG21	24	1.1
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG22	24	1.1
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG23	24	1.1
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG21	24	1.1
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG22	24	1.1
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG23	24	1.1
(1,105)	1:A:81:VAL:HA	1:A:84:GLU:HG2	4	1.1
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:6:SER:H	8	1.1
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:6:SER:H	8	1.1
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:6:SER:H	8	1.1
(1,319)	1:A:66:ASP:H	1:A:65:VAL:HB	6	1.09
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:6:SER:H	11	1.09
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:6:SER:H	11	1.09
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:6:SER:H	11	1.09
(1,832)	1:A:70:HIS:HD2	1:A:70:HIS:H	28	1.08
(1,319)	1:A:66:ASP:H	1:A:65:VAL:HB	13	1.08
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:6:SER:H	18	1.08
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:6:SER:H	18	1.08
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:6:SER:H	18	1.08
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:6:SER:H	28	1.08
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:6:SER:H	28	1.08
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:6:SER:H	28	1.08

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:6:SER:H	29	1.08
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:6:SER:H	29	1.08
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:6:SER:H	29	1.08
(1,376)	1:A:65:VAL:HG21	1:A:65:VAL:H	13	1.07
(1,376)	1:A:65:VAL:HG22	1:A:65:VAL:H	13	1.07
(1,376)	1:A:65:VAL:HG23	1:A:65:VAL:H	13	1.07
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	8	1.07
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	8	1.07
(1,1476)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	8	1.07
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG21	4	1.07
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG22	4	1.07
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG23	4	1.07
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG21	4	1.07
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG22	4	1.07
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG23	4	1.07
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG21	4	1.07
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG22	4	1.07
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG23	4	1.07
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:6:SER:H	15	1.07
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:6:SER:H	15	1.07
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:6:SER:H	15	1.07
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:6:SER:H	16	1.07
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:6:SER:H	16	1.07
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:6:SER:H	16	1.07
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:6:SER:H	21	1.07
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:6:SER:H	21	1.07
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:6:SER:H	21	1.07
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:6:SER:H	22	1.07
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:6:SER:H	22	1.07
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:6:SER:H	22	1.07
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:6:SER:H	25	1.07
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:6:SER:H	25	1.07
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:6:SER:H	25	1.07
(1,376)	1:A:65:VAL:HG21	1:A:65:VAL:H	6	1.06
(1,376)	1:A:65:VAL:HG22	1:A:65:VAL:H	6	1.06
(1,376)	1:A:65:VAL:HG23	1:A:65:VAL:H	6	1.06
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG21	9	1.06
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG22	9	1.06
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG23	9	1.06
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG21	9	1.06
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG22	9	1.06
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG23	9	1.06

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG21	9	1.06
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG22	9	1.06
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG23	9	1.06
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG21	20	1.06
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG22	20	1.06
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG23	20	1.06
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG21	20	1.06
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG22	20	1.06
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG23	20	1.06
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG21	20	1.06
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG22	20	1.06
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG23	20	1.06
(1,105)	1:A:81:VAL:HA	1:A:84:GLU:HG2	12	1.06
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:6:SER:H	13	1.06
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:6:SER:H	13	1.06
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:6:SER:H	13	1.06
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:6:SER:H	14	1.06
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:6:SER:H	14	1.06
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:6:SER:H	14	1.06
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:6:SER:H	26	1.06
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:6:SER:H	26	1.06
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:6:SER:H	26	1.06
(1,832)	1:A:70:HIS:HD2	1:A:70:HIS:H	16	1.04
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD21	22	1.04
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD22	22	1.04
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD23	22	1.04
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE21	14	1.04
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE21	14	1.04
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE21	14	1.04
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE21	21	1.04
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE21	21	1.04
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE21	21	1.04
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:6:SER:H	2	1.03
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:6:SER:H	2	1.03
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:6:SER:H	2	1.03
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:6:SER:H	9	1.03
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:6:SER:H	9	1.03
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:6:SER:H	9	1.03
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:6:SER:H	23	1.03
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:6:SER:H	23	1.03
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:6:SER:H	23	1.03
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:6:SER:H	24	1.03

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:6:SER:H	24	1.03
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:6:SER:H	24	1.03
(1,1179)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:58:ASP:HB3	22	1.02
(1,1126)	1:A:5:VAL:H	1:A:4:THR:HG21	26	1.02
(1,1126)	1:A:5:VAL:H	1:A:4:THR:HG22	26	1.02
(1,1126)	1:A:5:VAL:H	1:A:4:THR:HG23	26	1.02
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG21	10	1.02
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG22	10	1.02
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG23	10	1.02
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG21	10	1.02
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG22	10	1.02
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG23	10	1.02
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG21	10	1.02
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG22	10	1.02
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG23	10	1.02
(1,1440)	1:A:84:GLU:HA	1:A:87:LYS:HD2	29	1.01
(1,1440)	1:A:84:GLU:HA	1:A:87:LYS:HD3	29	1.01
(1,1159)	1:A:113:LEU:HG	1:A:117:LYS:HE2	13	1.01
(1,1159)	1:A:113:LEU:HG	1:A:117:LYS:HE2	22	1.01
(1,105)	1:A:81:VAL:HA	1:A:84:GLU:HG2	1	1.01
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE21	8	1.01
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE21	8	1.01
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE21	8	1.01
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:6:SER:H	7	1.01
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:6:SER:H	7	1.01
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:6:SER:H	7	1.01
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:6:SER:H	17	1.01
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:6:SER:H	17	1.01
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:6:SER:H	17	1.01
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:6:SER:H	30	1.01
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:6:SER:H	30	1.01
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:6:SER:H	30	1.01
(1,1159)	1:A:113:LEU:HG	1:A:117:LYS:HE2	26	1.0
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:6:SER:H	3	1.0
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:6:SER:H	3	1.0
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:6:SER:H	3	1.0
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:6:SER:H	4	1.0
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:6:SER:H	4	1.0
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:6:SER:H	4	1.0
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:6:SER:H	12	1.0
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:6:SER:H	12	1.0
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:6:SER:H	12	1.0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:6:SER:H	20	1.0
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:6:SER:H	20	1.0
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:6:SER:H	20	1.0
(1,1159)	1:A:113:LEU:HG	1:A:117:LYS:HE2	15	0.99
(1,105)	1:A:81:VAL:HA	1:A:84:GLU:HG2	16	0.99
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:6:SER:H	27	0.99
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:6:SER:H	27	0.99
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:6:SER:H	27	0.99
(1,712)	1:A:65:VAL:HA	1:A:85:VAL:HG11	10	0.98
(1,712)	1:A:65:VAL:HA	1:A:85:VAL:HG12	10	0.98
(1,712)	1:A:65:VAL:HA	1:A:85:VAL:HG13	10	0.98
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD1	30	0.98
(1,496)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:3:PHE:HD2	30	0.98
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD1	30	0.98
(1,496)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:3:PHE:HD2	30	0.98
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD1	30	0.98
(1,496)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:3:PHE:HD2	30	0.98
(1,207)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE22	3	0.98
(1,207)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE22	3	0.98
(1,207)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE22	3	0.98
(1,207)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE22	24	0.98
(1,207)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE22	24	0.98
(1,207)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE22	24	0.98
(1,145)	1:A:95:ASN:HA	1:A:92:ASN:HD22	19	0.98
(1,1179)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:58:ASP:HB3	6	0.98
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE21	25	0.98
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE21	25	0.98
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE21	25	0.98
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD21	21	0.96
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD22	21	0.96
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD23	21	0.96
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG21	17	0.96
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG22	17	0.96
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG23	17	0.96
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG21	17	0.96
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG22	17	0.96
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG23	17	0.96
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG21	17	0.96
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG22	17	0.96
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG23	17	0.96
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE21	5	0.96
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE21	5	0.96

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE21	5	0.96
(1,1020)	1:A:50:VAL:HG11	1:A:51:PHE:HD1	28	0.96
(1,1020)	1:A:50:VAL:HG11	1:A:51:PHE:HD2	28	0.96
(1,1020)	1:A:50:VAL:HG12	1:A:51:PHE:HD1	28	0.96
(1,1020)	1:A:50:VAL:HG12	1:A:51:PHE:HD2	28	0.96
(1,1020)	1:A:50:VAL:HG13	1:A:51:PHE:HD1	28	0.96
(1,1020)	1:A:50:VAL:HG13	1:A:51:PHE:HD2	28	0.96
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:6:SER:H	19	0.96
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:6:SER:H	19	0.96
(1,1002)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:6:SER:H	19	0.96
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD21	25	0.95
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD22	25	0.95
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD23	25	0.95
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD21	30	0.95
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD22	30	0.95
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD23	30	0.95
(1,1179)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:58:ASP:HB3	12	0.95
(1,1159)	1:A:113:LEU:HG	1:A:117:LYS:HE2	1	0.95
(1,1159)	1:A:113:LEU:HG	1:A:117:LYS:HE2	6	0.95
(1,1159)	1:A:113:LEU:HG	1:A:117:LYS:HE2	11	0.95
(1,1159)	1:A:113:LEU:HG	1:A:117:LYS:HE2	12	0.95
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG21	16	0.95
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG22	16	0.95
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG23	16	0.95
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG21	16	0.95
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG22	16	0.95
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG23	16	0.95
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG21	16	0.95
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG22	16	0.95
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG23	16	0.95
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG21	28	0.95
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG22	28	0.95
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG23	28	0.95
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG21	28	0.95
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG22	28	0.95
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG23	28	0.95
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG21	28	0.95
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG22	28	0.95
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG23	28	0.95
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD21	14	0.94
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD22	14	0.94
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD23	14	0.94

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1159)	1:A:113:LEU:HG	1:A:117:LYS:HE2	7	0.94
(1,1159)	1:A:113:LEU:HG	1:A:117:LYS:HE2	17	0.94
(1,856)	1:A:70:HIS:H	1:A:69:VAL:HB	1	0.93
(1,1547)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:38:PRO:HD2	24	0.93
(1,1547)	1:A:31:LYS:HA	1:A:36:GLU:HB2	24	0.93
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD21	26	0.93
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD22	26	0.93
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD23	26	0.93
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG21	27	0.93
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG22	27	0.93
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG23	27	0.93
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG21	27	0.93
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG22	27	0.93
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG23	27	0.93
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG21	27	0.93
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG22	27	0.93
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG23	27	0.93
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE21	24	0.93
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE21	24	0.93
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE21	24	0.93
(1,478)	1:A:50:VAL:HG21	1:A:46:TYR:HE1	28	0.92
(1,478)	1:A:50:VAL:HG21	1:A:46:TYR:HE2	28	0.92
(1,478)	1:A:50:VAL:HG22	1:A:46:TYR:HE1	28	0.92
(1,478)	1:A:50:VAL:HG22	1:A:46:TYR:HE2	28	0.92
(1,478)	1:A:50:VAL:HG23	1:A:46:TYR:HE1	28	0.92
(1,478)	1:A:50:VAL:HG23	1:A:46:TYR:HE2	28	0.92
(1,207)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE22	10	0.92
(1,207)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE22	10	0.92
(1,207)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE22	10	0.92
(1,207)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE22	20	0.92
(1,207)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE22	20	0.92
(1,207)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE22	20	0.92
(1,1179)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:58:ASP:HB3	1	0.92
(1,1159)	1:A:113:LEU:HG	1:A:117:LYS:HE2	9	0.92
(1,1520)	1:A:111:ASN:HD21	1:A:107:CYS:HA	30	0.91
(1,1520)	1:A:111:ASN:HD21	1:A:108:PHE:HA	30	0.91
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD21	3	0.91
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD22	3	0.91
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD23	3	0.91
(1,1179)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:58:ASP:HB3	9	0.91
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG21	19	0.91
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG22	19	0.91

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG23	19	0.91
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG21	19	0.91
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG22	19	0.91
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG23	19	0.91
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG21	19	0.91
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG22	19	0.91
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG23	19	0.91
(1,1179)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:58:ASP:HB3	8	0.9
(1,1179)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:58:ASP:HB3	23	0.9
(1,1159)	1:A:113:LEU:HG	1:A:117:LYS:HE2	5	0.9
(1,1159)	1:A:113:LEU:HG	1:A:117:LYS:HE2	18	0.9
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG21	30	0.9
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG22	30	0.9
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG23	30	0.9
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG21	30	0.9
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG22	30	0.9
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG23	30	0.9
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG21	30	0.9
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG22	30	0.9
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG23	30	0.9
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE21	18	0.9
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE21	18	0.9
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE21	18	0.9
(1,615)	1:A:86:LEU:H	1:A:85:VAL:HB	10	0.89
(1,1179)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:58:ASP:HB3	25	0.89
(1,1159)	1:A:113:LEU:HG	1:A:117:LYS:HE2	8	0.89
(1,1159)	1:A:113:LEU:HG	1:A:117:LYS:HE2	14	0.89
(1,1159)	1:A:113:LEU:HG	1:A:117:LYS:HE2	19	0.89
(1,1159)	1:A:113:LEU:HG	1:A:117:LYS:HE2	28	0.89
(1,105)	1:A:81:VAL:HA	1:A:84:GLU:HG2	18	0.89
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD21	7	0.88
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD22	7	0.88
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD23	7	0.88
(1,1159)	1:A:113:LEU:HG	1:A:117:LYS:HE2	23	0.88
(1,809)	1:A:64:LEU:HD21	1:A:64:LEU:HA	13	0.87
(1,809)	1:A:64:LEU:HD22	1:A:64:LEU:HA	13	0.87
(1,809)	1:A:64:LEU:HD23	1:A:64:LEU:HA	13	0.87
(1,207)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE22	30	0.87
(1,207)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE22	30	0.87
(1,207)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE22	30	0.87
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD21	16	0.87
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD22	16	0.87

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD23	16	0.87
(1,1159)	1:A:113:LEU:HG	1:A:117:LYS:HE2	16	0.87
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG21	2	0.87
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG22	2	0.87
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG23	2	0.87
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG21	2	0.87
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG22	2	0.87
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG23	2	0.87
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG21	2	0.87
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG22	2	0.87
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG23	2	0.87
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE21	27	0.87
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE21	27	0.87
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE21	27	0.87
(1,204)	1:A:87:LYS:H	1:A:87:LYS:HG3	25	0.86
(1,105)	1:A:81:VAL:HA	1:A:84:GLU:HG2	17	0.86
(1,809)	1:A:64:LEU:HD21	1:A:64:LEU:HA	7	0.85
(1,809)	1:A:64:LEU:HD22	1:A:64:LEU:HA	7	0.85
(1,809)	1:A:64:LEU:HD23	1:A:64:LEU:HA	7	0.85
(1,207)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE22	21	0.85
(1,207)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE22	21	0.85
(1,207)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE22	21	0.85
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG21	14	0.85
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG22	14	0.85
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG23	14	0.85
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG21	14	0.85
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG22	14	0.85
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG23	14	0.85
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG21	14	0.85
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG22	14	0.85
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG23	14	0.85
(1,424)	1:A:50:VAL:HG21	1:A:15:ARG:HA	28	0.84
(1,424)	1:A:50:VAL:HG22	1:A:15:ARG:HA	28	0.84
(1,424)	1:A:50:VAL:HG23	1:A:15:ARG:HA	28	0.84
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD21	12	0.84
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD22	12	0.84
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD23	12	0.84
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD21	14	0.84
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD22	14	0.84
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD23	14	0.84
(1,1179)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:58:ASP:HB3	24	0.84
(1,1159)	1:A:113:LEU:HG	1:A:117:LYS:HE2	25	0.84

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG21	12	0.83
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG22	12	0.83
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG23	12	0.83
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG21	12	0.83
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG22	12	0.83
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG23	12	0.83
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG21	12	0.83
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG22	12	0.83
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG23	12	0.83
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE21	11	0.83
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE21	11	0.83
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE21	11	0.83
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE21	22	0.83
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE21	22	0.83
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE21	22	0.83
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE21	23	0.83
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE21	23	0.83
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE21	23	0.83
(1,1569)	1:A:8:THR:HG21	1:A:12:GLN:HG2	21	0.82
(1,1569)	1:A:8:THR:HG22	1:A:12:GLN:HG2	21	0.82
(1,1569)	1:A:8:THR:HG23	1:A:12:GLN:HG2	21	0.82
(1,1179)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:58:ASP:HB3	17	0.82
(1,1179)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:58:ASP:HB3	20	0.82
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG21	23	0.82
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG22	23	0.82
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG23	23	0.82
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG21	23	0.82
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG22	23	0.82
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG23	23	0.82
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG21	23	0.82
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG22	23	0.82
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG23	23	0.82
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE21	16	0.82
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE21	16	0.82
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE21	16	0.82
(1,729)	1:A:91:LYS:H	1:A:91:LYS:HG3	18	0.81
(1,207)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE22	9	0.81
(1,207)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE22	9	0.81
(1,207)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE22	9	0.81
(1,1179)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:58:ASP:HB3	29	0.81
(1,207)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE22	25	0.8
(1,207)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE22	25	0.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,207)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE22	25	0.8
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD21	1	0.8
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD22	1	0.8
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD23	1	0.8
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD21	10	0.8
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD22	10	0.8
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD23	10	0.8
(1,1179)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:58:ASP:HB3	7	0.8
(1,1179)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:58:ASP:HB3	14	0.8
(1,1179)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:58:ASP:HB3	16	0.8
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE21	12	0.8
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE21	12	0.8
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE21	12	0.8
(1,1179)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:58:ASP:HB3	11	0.79
(1,1179)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:58:ASP:HB3	21	0.79
(1,809)	1:A:64:LEU:HD21	1:A:64:LEU:HA	12	0.78
(1,809)	1:A:64:LEU:HD22	1:A:64:LEU:HA	12	0.78
(1,809)	1:A:64:LEU:HD23	1:A:64:LEU:HA	12	0.78
(1,274)	1:A:28:TYR:HA	1:A:31:LYS:HG3	24	0.78
(1,1597)	1:A:53:LYS:HD2	1:A:14:TYR:HE1	22	0.78
(1,1597)	1:A:53:LYS:HD2	1:A:14:TYR:HE2	22	0.78
(1,1597)	1:A:53:LYS:HD3	1:A:14:TYR:HE1	22	0.78
(1,1597)	1:A:53:LYS:HD3	1:A:14:TYR:HE2	22	0.78
(1,1520)	1:A:111:ASN:HD21	1:A:107:CYS:HA	20	0.78
(1,1520)	1:A:111:ASN:HD21	1:A:108:PHE:HA	20	0.78
(1,1179)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:58:ASP:HB3	19	0.78
(1,809)	1:A:64:LEU:HD21	1:A:64:LEU:HA	29	0.77
(1,809)	1:A:64:LEU:HD22	1:A:64:LEU:HA	29	0.77
(1,809)	1:A:64:LEU:HD23	1:A:64:LEU:HA	29	0.77
(1,274)	1:A:28:TYR:HA	1:A:31:LYS:HG3	27	0.77
(1,1533)	1:A:9:GLU:HA	1:A:12:GLN:HG2	20	0.77
(1,1520)	1:A:111:ASN:HD21	1:A:107:CYS:HA	12	0.77
(1,1520)	1:A:111:ASN:HD21	1:A:108:PHE:HA	12	0.77
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD21	8	0.77
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD22	8	0.77
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD23	8	0.77
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD21	9	0.77
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD22	9	0.77
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD23	9	0.77
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD21	23	0.77
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD22	23	0.77
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD23	23	0.77

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE21	9	0.77
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE21	9	0.77
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE21	9	0.77
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG21	7	0.76
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG22	7	0.76
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG23	7	0.76
(1,1533)	1:A:9:GLU:HA	1:A:12:GLN:HG2	15	0.76
(1,1463)	1:A:38:PRO:HD2	1:A:31:LYS:HD3	29	0.76
(1,1179)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:58:ASP:HB3	3	0.76
(1,809)	1:A:64:LEU:HD21	1:A:64:LEU:HA	10	0.75
(1,809)	1:A:64:LEU:HD22	1:A:64:LEU:HA	10	0.75
(1,809)	1:A:64:LEU:HD23	1:A:64:LEU:HA	10	0.75
(1,590)	1:A:6:SER:HB2	1:A:54:MET:HE1	22	0.75
(1,590)	1:A:6:SER:HB2	1:A:54:MET:HE2	22	0.75
(1,590)	1:A:6:SER:HB2	1:A:54:MET:HE3	22	0.75
(1,1483)	1:A:111:ASN:HD22	1:A:110:LYS:HE2	18	0.75
(1,1483)	1:A:111:ASN:HD22	1:A:110:LYS:HE3	18	0.75
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD21	5	0.75
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD22	5	0.75
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD23	5	0.75
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE21	7	0.75
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE21	7	0.75
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE21	7	0.75
(1,463)	1:A:69:VAL:H	1:A:69:VAL:HB	1	0.74
(1,1179)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:58:ASP:HB3	13	0.74
(1,590)	1:A:6:SER:HB2	1:A:54:MET:HE1	10	0.73
(1,590)	1:A:6:SER:HB2	1:A:54:MET:HE2	10	0.73
(1,590)	1:A:6:SER:HB2	1:A:54:MET:HE3	10	0.73
(1,1483)	1:A:111:ASN:HD22	1:A:110:LYS:HE2	19	0.73
(1,1483)	1:A:111:ASN:HD22	1:A:110:LYS:HE3	19	0.73
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD21	15	0.73
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD22	15	0.73
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD23	15	0.73
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD21	20	0.73
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD22	20	0.73
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD23	20	0.73
(1,1179)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:58:ASP:HB3	2	0.73
(1,1179)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:58:ASP:HB3	5	0.73
(1,1179)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:58:ASP:HB3	18	0.73
(1,1179)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:58:ASP:HB3	30	0.73
(1,10)	1:A:82:ARG:HG3	1:A:69:VAL:HG21	1	0.73
(1,10)	1:A:82:ARG:HG3	1:A:69:VAL:HG22	1	0.73

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,10)	1:A:82:ARG:HG3	1:A:69:VAL:HG23	1	0.73
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG21	20	0.72
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG22	20	0.72
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG23	20	0.72
(1,295)	1:A:80:GLU:HA	1:A:80:GLU:HG3	3	0.72
(1,1483)	1:A:111:ASN:HD22	1:A:110:LYS:HE2	6	0.72
(1,1483)	1:A:111:ASN:HD22	1:A:110:LYS:HE3	6	0.72
(1,1179)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:58:ASP:HB3	15	0.72
(1,207)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE22	17	0.71
(1,207)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE22	17	0.71
(1,207)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE22	17	0.71
(1,1587)	1:A:36:GLU:HB3	1:A:38:PRO:HD2	28	0.71
(1,1587)	1:A:31:LYS:HA	1:A:36:GLU:HB3	28	0.71
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD21	6	0.71
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD22	6	0.71
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD23	6	0.71
(1,1179)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:58:ASP:HB3	26	0.71
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG21	7	0.71
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG22	7	0.71
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG23	7	0.71
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG21	7	0.71
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG22	7	0.71
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG23	7	0.71
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG21	7	0.71
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG22	7	0.71
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG23	7	0.71
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG21	11	0.71
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG22	11	0.71
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG23	11	0.71
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG21	11	0.71
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG22	11	0.71
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG23	11	0.71
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG21	11	0.71
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG22	11	0.71
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG23	11	0.71
(1,1070)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:67:ASN:HA	19	0.71
(1,955)	1:A:51:PHE:H	1:A:50:VAL:HB	28	0.7
(1,274)	1:A:28:TYR:HA	1:A:31:LYS:HG3	28	0.7
(1,207)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE22	26	0.7
(1,207)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE22	26	0.7
(1,207)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE22	26	0.7
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD21	19	0.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD22	19	0.7
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD23	19	0.7
(1,1179)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:58:ASP:HB3	4	0.7
(1,1179)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:58:ASP:HB3	28	0.7
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG21	30	0.69
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG22	30	0.69
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG23	30	0.69
(1,295)	1:A:80:GLU:HA	1:A:80:GLU:HG3	8	0.69
(1,207)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE22	8	0.69
(1,207)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE22	8	0.69
(1,207)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE22	8	0.69
(1,1597)	1:A:53:LYS:HD2	1:A:14:TYR:HE1	1	0.69
(1,1597)	1:A:53:LYS:HD2	1:A:14:TYR:HE2	1	0.69
(1,1597)	1:A:53:LYS:HD3	1:A:14:TYR:HE1	1	0.69
(1,1597)	1:A:53:LYS:HD3	1:A:14:TYR:HE2	1	0.69
(1,1159)	1:A:113:LEU:HG	1:A:117:LYS:HE2	27	0.69
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB2	20	0.68
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB3	20	0.68
(1,1483)	1:A:111:ASN:HD22	1:A:110:LYS:HE2	14	0.68
(1,1483)	1:A:111:ASN:HD22	1:A:110:LYS:HE3	14	0.68
(1,145)	1:A:95:ASN:HA	1:A:92:ASN:HD22	9	0.68
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD21	24	0.68
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD22	24	0.68
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD23	24	0.68
(1,955)	1:A:51:PHE:H	1:A:50:VAL:HB	18	0.67
(1,639)	1:A:85:VAL:H	1:A:85:VAL:HB	10	0.67
(1,295)	1:A:80:GLU:HA	1:A:80:GLU:HG3	9	0.67
(1,295)	1:A:80:GLU:HA	1:A:80:GLU:HG3	21	0.67
(1,1547)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:38:PRO:HD2	12	0.67
(1,1547)	1:A:31:LYS:HA	1:A:36:GLU:HB2	12	0.67
(1,1509)	1:A:50:VAL:HG11	1:A:54:MET:HG3	28	0.67
(1,1509)	1:A:50:VAL:HG12	1:A:54:MET:HG3	28	0.67
(1,1509)	1:A:50:VAL:HG13	1:A:54:MET:HG3	28	0.67
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD21	7	0.67
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD22	7	0.67
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD23	7	0.67
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG21	26	0.67
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG22	26	0.67
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:7:THR:HG23	26	0.67
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG21	26	0.67
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG22	26	0.67
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:7:THR:HG23	26	0.67

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG21	26	0.67
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG22	26	0.67
(1,1112)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:7:THR:HG23	26	0.67
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD21	27	0.66
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD22	27	0.66
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD23	27	0.66
(1,295)	1:A:80:GLU:HA	1:A:80:GLU:HG3	26	0.65
(1,295)	1:A:80:GLU:HA	1:A:80:GLU:HG3	27	0.65
(1,207)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE22	5	0.65
(1,207)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE22	5	0.65
(1,207)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE22	5	0.65
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG21	4	0.64
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG22	4	0.64
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG23	4	0.64
(1,478)	1:A:50:VAL:HG21	1:A:46:TYR:HE1	18	0.64
(1,478)	1:A:50:VAL:HG21	1:A:46:TYR:HE2	18	0.64
(1,478)	1:A:50:VAL:HG22	1:A:46:TYR:HE1	18	0.64
(1,478)	1:A:50:VAL:HG22	1:A:46:TYR:HE2	18	0.64
(1,478)	1:A:50:VAL:HG23	1:A:46:TYR:HE1	18	0.64
(1,478)	1:A:50:VAL:HG23	1:A:46:TYR:HE2	18	0.64
(1,1533)	1:A:9:GLU:HA	1:A:12:GLN:HG2	12	0.64
(1,295)	1:A:80:GLU:HA	1:A:80:GLU:HG3	5	0.63
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG21	2	0.62
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG22	2	0.62
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG23	2	0.62
(1,321)	1:A:30:GLU:HG2	1:A:30:GLU:H	9	0.62
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD21	2	0.62
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD22	2	0.62
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD23	2	0.62
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG21	22	0.61
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG22	22	0.61
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG23	22	0.61
(1,295)	1:A:80:GLU:HA	1:A:80:GLU:HG3	23	0.61
(1,1533)	1:A:9:GLU:HA	1:A:12:GLN:HG2	22	0.61
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD21	13	0.61
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD22	13	0.61
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD23	13	0.61
(1,1382)	1:A:16:THR:HG21	1:A:20:SER:HB2	7	0.61
(1,1382)	1:A:16:THR:HG21	1:A:20:SER:HB3	7	0.61
(1,1382)	1:A:16:THR:HG22	1:A:20:SER:HB2	7	0.61
(1,1382)	1:A:16:THR:HG22	1:A:20:SER:HB3	7	0.61
(1,1382)	1:A:16:THR:HG23	1:A:20:SER:HB2	7	0.61

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1382)	1:A:16:THR:HG23	1:A:20:SER:HB3	7	0.61
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD21	19	0.61
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD22	19	0.61
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD23	19	0.61
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB2	14	0.6
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB3	14	0.6
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB2	28	0.6
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB3	28	0.6
(1,53)	1:A:115:LEU:HD11	1:A:115:LEU:HB3	2	0.6
(1,53)	1:A:115:LEU:HD12	1:A:115:LEU:HB3	2	0.6
(1,53)	1:A:115:LEU:HD13	1:A:115:LEU:HB3	2	0.6
(1,53)	1:A:115:LEU:HD11	1:A:115:LEU:HB3	28	0.6
(1,53)	1:A:115:LEU:HD12	1:A:115:LEU:HB3	28	0.6
(1,53)	1:A:115:LEU:HD13	1:A:115:LEU:HB3	28	0.6
(1,436)	1:A:12:GLN:H	1:A:12:GLN:HB3	12	0.6
(1,436)	1:A:12:GLN:H	1:A:12:GLN:HB3	20	0.6
(1,1587)	1:A:36:GLU:HB3	1:A:38:PRO:HD2	26	0.6
(1,1587)	1:A:31:LYS:HA	1:A:36:GLU:HB3	26	0.6
(1,1159)	1:A:113:LEU:HG	1:A:117:LYS:HE2	3	0.6
(1,1070)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:67:ASN:HA	7	0.6
(1,53)	1:A:115:LEU:HD11	1:A:115:LEU:HB3	4	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD12	1:A:115:LEU:HB3	4	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD13	1:A:115:LEU:HB3	4	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD11	1:A:115:LEU:HB3	5	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD12	1:A:115:LEU:HB3	5	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD13	1:A:115:LEU:HB3	5	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD11	1:A:115:LEU:HB3	6	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD12	1:A:115:LEU:HB3	6	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD13	1:A:115:LEU:HB3	6	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD11	1:A:115:LEU:HB3	7	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD12	1:A:115:LEU:HB3	7	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD13	1:A:115:LEU:HB3	7	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD11	1:A:115:LEU:HB3	8	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD12	1:A:115:LEU:HB3	8	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD13	1:A:115:LEU:HB3	8	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD11	1:A:115:LEU:HB3	9	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD12	1:A:115:LEU:HB3	9	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD13	1:A:115:LEU:HB3	9	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD11	1:A:115:LEU:HB3	10	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD12	1:A:115:LEU:HB3	10	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD13	1:A:115:LEU:HB3	10	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD11	1:A:115:LEU:HB3	11	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,53)	1:A:115:LEU:HD12	1:A:115:LEU:HB3	11	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD13	1:A:115:LEU:HB3	11	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD11	1:A:115:LEU:HB3	13	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD12	1:A:115:LEU:HB3	13	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD13	1:A:115:LEU:HB3	13	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD11	1:A:115:LEU:HB3	14	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD12	1:A:115:LEU:HB3	14	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD13	1:A:115:LEU:HB3	14	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD11	1:A:115:LEU:HB3	15	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD12	1:A:115:LEU:HB3	15	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD13	1:A:115:LEU:HB3	15	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD11	1:A:115:LEU:HB3	16	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD12	1:A:115:LEU:HB3	16	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD13	1:A:115:LEU:HB3	16	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD11	1:A:115:LEU:HB3	18	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD12	1:A:115:LEU:HB3	18	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD13	1:A:115:LEU:HB3	18	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD11	1:A:115:LEU:HB3	19	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD12	1:A:115:LEU:HB3	19	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD13	1:A:115:LEU:HB3	19	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD11	1:A:115:LEU:HB3	20	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD12	1:A:115:LEU:HB3	20	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD13	1:A:115:LEU:HB3	20	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD11	1:A:115:LEU:HB3	21	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD12	1:A:115:LEU:HB3	21	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD13	1:A:115:LEU:HB3	21	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD11	1:A:115:LEU:HB3	22	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD12	1:A:115:LEU:HB3	22	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD13	1:A:115:LEU:HB3	22	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD11	1:A:115:LEU:HB3	23	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD12	1:A:115:LEU:HB3	23	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD13	1:A:115:LEU:HB3	23	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD11	1:A:115:LEU:HB3	24	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD12	1:A:115:LEU:HB3	24	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD13	1:A:115:LEU:HB3	24	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD11	1:A:115:LEU:HB3	25	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD12	1:A:115:LEU:HB3	25	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD13	1:A:115:LEU:HB3	25	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD11	1:A:115:LEU:HB3	26	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD12	1:A:115:LEU:HB3	26	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD13	1:A:115:LEU:HB3	26	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD11	1:A:115:LEU:HB3	27	0.59

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,53)	1:A:115:LEU:HD12	1:A:115:LEU:HB3	27	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD13	1:A:115:LEU:HB3	27	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD11	1:A:115:LEU:HB3	29	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD12	1:A:115:LEU:HB3	29	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD13	1:A:115:LEU:HB3	29	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD11	1:A:115:LEU:HB3	30	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD12	1:A:115:LEU:HB3	30	0.59
(1,53)	1:A:115:LEU:HD13	1:A:115:LEU:HB3	30	0.59
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG21	5	0.59
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG22	5	0.59
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG23	5	0.59
(1,436)	1:A:12:GLN:H	1:A:12:GLN:HB3	11	0.59
(1,436)	1:A:12:GLN:H	1:A:12:GLN:HB3	15	0.59
(1,246)	1:A:84:GLU:HG3	1:A:84:GLU:HA	15	0.59
(1,1587)	1:A:36:GLU:HB3	1:A:38:PRO:HD2	29	0.59
(1,1587)	1:A:31:LYS:HA	1:A:36:GLU:HB3	29	0.59
(1,1179)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:58:ASP:HB3	27	0.59
(1,886)	1:A:66:ASP:HB3	1:A:66:ASP:H	21	0.58
(1,641)	1:A:52:ASN:HB2	1:A:53:LYS:H	11	0.58
(1,53)	1:A:115:LEU:HD11	1:A:115:LEU:HB3	1	0.58
(1,53)	1:A:115:LEU:HD12	1:A:115:LEU:HB3	1	0.58
(1,53)	1:A:115:LEU:HD13	1:A:115:LEU:HB3	1	0.58
(1,53)	1:A:115:LEU:HD11	1:A:115:LEU:HB3	3	0.58
(1,53)	1:A:115:LEU:HD12	1:A:115:LEU:HB3	3	0.58
(1,53)	1:A:115:LEU:HD13	1:A:115:LEU:HB3	3	0.58
(1,53)	1:A:115:LEU:HD11	1:A:115:LEU:HB3	12	0.58
(1,53)	1:A:115:LEU:HD12	1:A:115:LEU:HB3	12	0.58
(1,53)	1:A:115:LEU:HD13	1:A:115:LEU:HB3	12	0.58
(1,53)	1:A:115:LEU:HD11	1:A:115:LEU:HB3	17	0.58
(1,53)	1:A:115:LEU:HD12	1:A:115:LEU:HB3	17	0.58
(1,53)	1:A:115:LEU:HD13	1:A:115:LEU:HB3	17	0.58
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG21	6	0.58
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG22	6	0.58
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG23	6	0.58
(1,436)	1:A:12:GLN:H	1:A:12:GLN:HB3	1	0.58
(1,436)	1:A:12:GLN:H	1:A:12:GLN:HB3	6	0.58
(1,436)	1:A:12:GLN:H	1:A:12:GLN:HB3	8	0.58
(1,436)	1:A:12:GLN:H	1:A:12:GLN:HB3	13	0.58
(1,436)	1:A:12:GLN:H	1:A:12:GLN:HB3	16	0.58
(1,436)	1:A:12:GLN:H	1:A:12:GLN:HB3	17	0.58
(1,436)	1:A:12:GLN:H	1:A:12:GLN:HB3	19	0.58
(1,207)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE22	11	0.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,207)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE22	11	0.58
(1,207)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE22	11	0.58
(1,207)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE22	12	0.58
(1,207)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE22	12	0.58
(1,207)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE22	12	0.58
(1,1366)	1:A:89:VAL:HA	1:A:63:PRO:HG3	19	0.58
(1,105)	1:A:81:VAL:HA	1:A:84:GLU:HG2	13	0.58
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE21	19	0.58
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE21	19	0.58
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE21	19	0.58
(1,886)	1:A:66:ASP:HB3	1:A:66:ASP:H	13	0.57
(1,886)	1:A:66:ASP:HB3	1:A:66:ASP:H	16	0.57
(1,886)	1:A:66:ASP:HB3	1:A:66:ASP:H	27	0.57
(1,641)	1:A:52:ASN:HB2	1:A:53:LYS:H	26	0.57
(1,436)	1:A:12:GLN:H	1:A:12:GLN:HB3	2	0.57
(1,436)	1:A:12:GLN:H	1:A:12:GLN:HB3	3	0.57
(1,436)	1:A:12:GLN:H	1:A:12:GLN:HB3	4	0.57
(1,436)	1:A:12:GLN:H	1:A:12:GLN:HB3	7	0.57
(1,436)	1:A:12:GLN:H	1:A:12:GLN:HB3	9	0.57
(1,436)	1:A:12:GLN:H	1:A:12:GLN:HB3	10	0.57
(1,436)	1:A:12:GLN:H	1:A:12:GLN:HB3	14	0.57
(1,436)	1:A:12:GLN:H	1:A:12:GLN:HB3	22	0.57
(1,436)	1:A:12:GLN:H	1:A:12:GLN:HB3	24	0.57
(1,436)	1:A:12:GLN:H	1:A:12:GLN:HB3	25	0.57
(1,436)	1:A:12:GLN:H	1:A:12:GLN:HB3	26	0.57
(1,436)	1:A:12:GLN:H	1:A:12:GLN:HB3	28	0.57
(1,226)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	26	0.57
(1,226)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	26	0.57
(1,226)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	26	0.57
(1,207)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE22	16	0.57
(1,207)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE22	16	0.57
(1,207)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE22	16	0.57
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB2	5	0.56
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB3	5	0.56
(1,641)	1:A:52:ASN:HB2	1:A:53:LYS:H	1	0.56
(1,436)	1:A:12:GLN:H	1:A:12:GLN:HB3	18	0.56
(1,436)	1:A:12:GLN:H	1:A:12:GLN:HB3	23	0.56
(1,436)	1:A:12:GLN:H	1:A:12:GLN:HB3	27	0.56
(1,436)	1:A:12:GLN:H	1:A:12:GLN:HB3	30	0.56
(1,295)	1:A:80:GLU:HA	1:A:80:GLU:HG3	15	0.56
(1,274)	1:A:28:TYR:HA	1:A:31:LYS:HG3	26	0.56
(1,1179)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:58:ASP:HB3	10	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1070)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:67:ASN:HA	4	0.56
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE21	1	0.56
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE21	1	0.56
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE21	1	0.56
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB2	19	0.55
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB3	19	0.55
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB2	26	0.55
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB3	26	0.55
(1,886)	1:A:66:ASP:HB3	1:A:66:ASP:H	18	0.55
(1,806)	1:A:123:ASP:H	1:A:122:LYS:HA	5	0.55
(1,641)	1:A:52:ASN:HB2	1:A:53:LYS:H	4	0.55
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG21	16	0.55
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG22	16	0.55
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG23	16	0.55
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG21	19	0.55
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG22	19	0.55
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG23	19	0.55
(1,436)	1:A:12:GLN:H	1:A:12:GLN:HB3	5	0.55
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD1	30	0.55
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD2	30	0.55
(1,207)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE22	14	0.55
(1,207)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE22	14	0.55
(1,207)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE22	14	0.55
(1,1597)	1:A:53:LYS:HD2	1:A:14:TYR:HE1	4	0.55
(1,1597)	1:A:53:LYS:HD2	1:A:14:TYR:HE2	4	0.55
(1,1597)	1:A:53:LYS:HD3	1:A:14:TYR:HE1	4	0.55
(1,1597)	1:A:53:LYS:HD3	1:A:14:TYR:HE2	4	0.55
(1,1070)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:67:ASN:HA	2	0.55
(1,1070)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:67:ASN:HA	28	0.55
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB2	9	0.54
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB3	9	0.54
(1,76)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	7	0.54
(1,76)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	7	0.54
(1,76)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	7	0.54
(1,76)	1:A:113:LEU:HD11	1:A:117:LYS:HE2	7	0.54
(1,76)	1:A:113:LEU:HD12	1:A:117:LYS:HE2	7	0.54
(1,76)	1:A:113:LEU:HD13	1:A:117:LYS:HE2	7	0.54
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG21	8	0.54
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG22	8	0.54
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG23	8	0.54
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD1	1	0.54
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD2	1	0.54

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD1	28	0.54
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD2	28	0.54
(1,321)	1:A:30:GLU:HG2	1:A:30:GLU:H	19	0.54
(1,207)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE22	23	0.54
(1,207)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE22	23	0.54
(1,207)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE22	23	0.54
(1,207)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE22	27	0.54
(1,207)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE22	27	0.54
(1,207)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE22	27	0.54
(1,1587)	1:A:36:GLU:HB3	1:A:38:PRO:HD2	30	0.54
(1,1587)	1:A:31:LYS:HA	1:A:36:GLU:HB3	30	0.54
(1,1533)	1:A:9:GLU:HA	1:A:12:GLN:HG2	1	0.54
(1,1447)	1:A:16:THR:HG21	1:A:17:GLU:HA	4	0.54
(1,1447)	1:A:16:THR:HG22	1:A:17:GLU:HA	4	0.54
(1,1447)	1:A:16:THR:HG23	1:A:17:GLU:HA	4	0.54
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB2	27	0.53
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB3	27	0.53
(1,641)	1:A:52:ASN:HB2	1:A:53:LYS:H	2	0.53
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG21	26	0.53
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG22	26	0.53
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG23	26	0.53
(1,1509)	1:A:50:VAL:HG11	1:A:54:MET:HG3	18	0.53
(1,1509)	1:A:50:VAL:HG12	1:A:54:MET:HG3	18	0.53
(1,1509)	1:A:50:VAL:HG13	1:A:54:MET:HG3	18	0.53
(1,1070)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:67:ASN:HA	27	0.53
(1,1070)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:67:ASN:HA	29	0.53
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB2	6	0.52
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB3	6	0.52
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB2	7	0.52
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB3	7	0.52
(1,590)	1:A:6:SER:HB2	1:A:54:MET:HE1	3	0.52
(1,590)	1:A:6:SER:HB2	1:A:54:MET:HE2	3	0.52
(1,590)	1:A:6:SER:HB2	1:A:54:MET:HE3	3	0.52
(1,1533)	1:A:9:GLU:HA	1:A:12:GLN:HG2	24	0.52
(1,1478)	1:A:9:GLU:HA	1:A:8:THR:HG21	20	0.52
(1,1478)	1:A:9:GLU:HA	1:A:8:THR:HG22	20	0.52
(1,1478)	1:A:9:GLU:HA	1:A:8:THR:HG23	20	0.52
(1,1228)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:LYS:HB2	23	0.52
(1,1070)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:67:ASN:HA	10	0.52
(1,1070)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:67:ASN:HA	15	0.52
(1,105)	1:A:81:VAL:HA	1:A:84:GLU:HG2	2	0.52
(1,1010)	1:A:54:MET:HG2	1:A:54:MET:HE1	3	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1010)	1:A:54:MET:HG2	1:A:54:MET:HE2	3	0.52
(1,1010)	1:A:54:MET:HG2	1:A:54:MET:HE3	3	0.52
(1,1010)	1:A:54:MET:HG2	1:A:54:MET:HE1	10	0.52
(1,1010)	1:A:54:MET:HG2	1:A:54:MET:HE2	10	0.52
(1,1010)	1:A:54:MET:HG2	1:A:54:MET:HE3	10	0.52
(1,1010)	1:A:54:MET:HG2	1:A:54:MET:HE1	22	0.52
(1,1010)	1:A:54:MET:HG2	1:A:54:MET:HE2	22	0.52
(1,1010)	1:A:54:MET:HG2	1:A:54:MET:HE3	22	0.52
(1,76)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	12	0.51
(1,76)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	12	0.51
(1,76)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	12	0.51
(1,76)	1:A:113:LEU:HD11	1:A:117:LYS:HE2	12	0.51
(1,76)	1:A:113:LEU:HD12	1:A:117:LYS:HE2	12	0.51
(1,76)	1:A:113:LEU:HD13	1:A:117:LYS:HE2	12	0.51
(1,641)	1:A:52:ASN:HB2	1:A:53:LYS:H	13	0.51
(1,641)	1:A:52:ASN:HB2	1:A:53:LYS:H	22	0.51
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG21	14	0.51
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG22	14	0.51
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG23	14	0.51
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD1	7	0.51
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD2	7	0.51
(1,226)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	22	0.51
(1,226)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	22	0.51
(1,226)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	22	0.51
(1,1533)	1:A:9:GLU:HA	1:A:12:GLN:HG2	2	0.51
(1,1070)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:67:ASN:HA	6	0.51
(1,1010)	1:A:54:MET:HG2	1:A:54:MET:HE1	2	0.51
(1,1010)	1:A:54:MET:HG2	1:A:54:MET:HE2	2	0.51
(1,1010)	1:A:54:MET:HG2	1:A:54:MET:HE3	2	0.51
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB2	3	0.5
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB3	3	0.5
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB2	8	0.5
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB3	8	0.5
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB2	13	0.5
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB3	13	0.5
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB2	21	0.5
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB3	21	0.5
(1,76)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	28	0.5
(1,76)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	28	0.5
(1,76)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	28	0.5
(1,76)	1:A:113:LEU:HD11	1:A:117:LYS:HE2	28	0.5
(1,76)	1:A:113:LEU:HD12	1:A:117:LYS:HE2	28	0.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,76)	1:A:113:LEU:HD13	1:A:117:LYS:HE2	28	0.5
(1,641)	1:A:52:ASN:HB2	1:A:53:LYS:H	12	0.5
(1,641)	1:A:52:ASN:HB2	1:A:53:LYS:H	27	0.5
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD1	25	0.5
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD2	25	0.5
(1,1367)	1:A:54:MET:HE1	1:A:11:LEU:HD11	11	0.5
(1,1367)	1:A:54:MET:HE1	1:A:11:LEU:HD12	11	0.5
(1,1367)	1:A:54:MET:HE1	1:A:11:LEU:HD13	11	0.5
(1,1367)	1:A:54:MET:HE2	1:A:11:LEU:HD11	11	0.5
(1,1367)	1:A:54:MET:HE2	1:A:11:LEU:HD12	11	0.5
(1,1367)	1:A:54:MET:HE2	1:A:11:LEU:HD13	11	0.5
(1,1367)	1:A:54:MET:HE3	1:A:11:LEU:HD11	11	0.5
(1,1367)	1:A:54:MET:HE3	1:A:11:LEU:HD12	11	0.5
(1,1367)	1:A:54:MET:HE3	1:A:11:LEU:HD13	11	0.5
(1,1308)	1:A:13:ARG:HA	1:A:13:ARG:HG3	8	0.5
(1,1070)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:67:ASN:HA	23	0.5
(1,1010)	1:A:54:MET:HG2	1:A:54:MET:HE1	20	0.5
(1,1010)	1:A:54:MET:HG2	1:A:54:MET:HE2	20	0.5
(1,1010)	1:A:54:MET:HG2	1:A:54:MET:HE3	20	0.5
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB2	10	0.49
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB3	10	0.49
(1,920)	1:A:62:GLY:HA2	1:A:63:PRO:HD2	18	0.49
(1,76)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	26	0.49
(1,76)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	26	0.49
(1,76)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	26	0.49
(1,76)	1:A:113:LEU:HD11	1:A:117:LYS:HE2	26	0.49
(1,76)	1:A:113:LEU:HD12	1:A:117:LYS:HE2	26	0.49
(1,76)	1:A:113:LEU:HD13	1:A:117:LYS:HE2	26	0.49
(1,641)	1:A:52:ASN:HB2	1:A:53:LYS:H	3	0.49
(1,641)	1:A:52:ASN:HB2	1:A:53:LYS:H	7	0.49
(1,641)	1:A:52:ASN:HB2	1:A:53:LYS:H	8	0.49
(1,641)	1:A:52:ASN:HB2	1:A:53:LYS:H	15	0.49
(1,641)	1:A:52:ASN:HB2	1:A:53:LYS:H	16	0.49
(1,641)	1:A:52:ASN:HB2	1:A:53:LYS:H	24	0.49
(1,641)	1:A:52:ASN:HB2	1:A:53:LYS:H	30	0.49
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG21	13	0.49
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG22	13	0.49
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG23	13	0.49
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD1	9	0.49
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD2	9	0.49
(1,321)	1:A:30:GLU:HG2	1:A:30:GLU:H	22	0.49
(1,207)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE22	19	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,207)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE22	19	0.49
(1,207)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE22	19	0.49
(1,194)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:6:SER:HB2	20	0.49
(1,194)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:6:SER:HB2	20	0.49
(1,1597)	1:A:53:LYS:HD2	1:A:14:TYR:HE1	10	0.49
(1,1597)	1:A:53:LYS:HD2	1:A:14:TYR:HE2	10	0.49
(1,1597)	1:A:53:LYS:HD3	1:A:14:TYR:HE1	10	0.49
(1,1597)	1:A:53:LYS:HD3	1:A:14:TYR:HE2	10	0.49
(1,1587)	1:A:36:GLU:HB3	1:A:38:PRO:HD2	20	0.49
(1,1587)	1:A:31:LYS:HA	1:A:36:GLU:HB3	20	0.49
(1,1382)	1:A:16:THR:HG21	1:A:20:SER:HB2	8	0.49
(1,1382)	1:A:16:THR:HG21	1:A:20:SER:HB3	8	0.49
(1,1382)	1:A:16:THR:HG22	1:A:20:SER:HB2	8	0.49
(1,1382)	1:A:16:THR:HG22	1:A:20:SER:HB3	8	0.49
(1,1382)	1:A:16:THR:HG23	1:A:20:SER:HB2	8	0.49
(1,1382)	1:A:16:THR:HG23	1:A:20:SER:HB3	8	0.49
(1,1070)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:67:ASN:HA	24	0.49
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB2	4	0.48
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB3	4	0.48
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB2	11	0.48
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB3	11	0.48
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB2	18	0.48
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB3	18	0.48
(1,922)	1:A:38:PRO:HD3	1:A:38:PRO:HB3	2	0.48
(1,922)	1:A:38:PRO:HD3	1:A:38:PRO:HB3	4	0.48
(1,922)	1:A:38:PRO:HD3	1:A:38:PRO:HB3	7	0.48
(1,922)	1:A:38:PRO:HD3	1:A:38:PRO:HB3	8	0.48
(1,922)	1:A:38:PRO:HD3	1:A:38:PRO:HB3	10	0.48
(1,922)	1:A:38:PRO:HD3	1:A:38:PRO:HB3	11	0.48
(1,922)	1:A:38:PRO:HD3	1:A:38:PRO:HB3	12	0.48
(1,922)	1:A:38:PRO:HD3	1:A:38:PRO:HB3	14	0.48
(1,922)	1:A:38:PRO:HD3	1:A:38:PRO:HB3	18	0.48
(1,922)	1:A:38:PRO:HD3	1:A:38:PRO:HB3	19	0.48
(1,922)	1:A:38:PRO:HD3	1:A:38:PRO:HB3	20	0.48
(1,922)	1:A:38:PRO:HD3	1:A:38:PRO:HB3	21	0.48
(1,922)	1:A:38:PRO:HD3	1:A:38:PRO:HB3	24	0.48
(1,922)	1:A:38:PRO:HD3	1:A:38:PRO:HB3	28	0.48
(1,922)	1:A:38:PRO:HD3	1:A:38:PRO:HB3	30	0.48
(1,641)	1:A:52:ASN:HB2	1:A:53:LYS:H	5	0.48
(1,641)	1:A:52:ASN:HB2	1:A:53:LYS:H	6	0.48
(1,641)	1:A:52:ASN:HB2	1:A:53:LYS:H	17	0.48
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD1	18	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD2	18	0.48
(1,388)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:70:HIS:H	1	0.48
(1,388)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:70:HIS:H	2	0.48
(1,1618)	1:A:43:THR:H	1:A:40:ASP:OD1	8	0.48
(1,1587)	1:A:36:GLU:HB3	1:A:38:PRO:HD2	17	0.48
(1,1587)	1:A:31:LYS:HA	1:A:36:GLU:HB3	17	0.48
(1,1533)	1:A:9:GLU:HA	1:A:12:GLN:HG2	11	0.48
(1,1533)	1:A:9:GLU:HA	1:A:12:GLN:HG2	27	0.48
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD21	4	0.48
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD22	4	0.48
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD23	4	0.48
(1,1070)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:67:ASN:HA	3	0.48
(1,1070)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:67:ASN:HA	8	0.48
(1,1070)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:67:ASN:HA	20	0.48
(1,105)	1:A:81:VAL:HA	1:A:84:GLU:HG2	25	0.48
(1,922)	1:A:38:PRO:HD3	1:A:38:PRO:HB3	3	0.47
(1,922)	1:A:38:PRO:HD3	1:A:38:PRO:HB3	5	0.47
(1,922)	1:A:38:PRO:HD3	1:A:38:PRO:HB3	6	0.47
(1,922)	1:A:38:PRO:HD3	1:A:38:PRO:HB3	9	0.47
(1,922)	1:A:38:PRO:HD3	1:A:38:PRO:HB3	13	0.47
(1,922)	1:A:38:PRO:HD3	1:A:38:PRO:HB3	15	0.47
(1,922)	1:A:38:PRO:HD3	1:A:38:PRO:HB3	16	0.47
(1,922)	1:A:38:PRO:HD3	1:A:38:PRO:HB3	17	0.47
(1,922)	1:A:38:PRO:HD3	1:A:38:PRO:HB3	22	0.47
(1,922)	1:A:38:PRO:HD3	1:A:38:PRO:HB3	23	0.47
(1,922)	1:A:38:PRO:HD3	1:A:38:PRO:HB3	25	0.47
(1,922)	1:A:38:PRO:HD3	1:A:38:PRO:HB3	26	0.47
(1,922)	1:A:38:PRO:HD3	1:A:38:PRO:HB3	27	0.47
(1,922)	1:A:38:PRO:HD3	1:A:38:PRO:HB3	29	0.47
(1,920)	1:A:62:GLY:HA2	1:A:63:PRO:HD2	19	0.47
(1,641)	1:A:52:ASN:HB2	1:A:53:LYS:H	9	0.47
(1,641)	1:A:52:ASN:HB2	1:A:53:LYS:H	10	0.47
(1,641)	1:A:52:ASN:HB2	1:A:53:LYS:H	29	0.47
(1,388)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:70:HIS:H	5	0.47
(1,388)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:70:HIS:H	8	0.47
(1,388)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:70:HIS:H	25	0.47
(1,246)	1:A:84:GLU:HG3	1:A:84:GLU:HA	29	0.47
(1,226)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	13	0.47
(1,226)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	13	0.47
(1,226)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	13	0.47
(1,207)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE22	18	0.47
(1,207)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE22	18	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,207)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE22	18	0.47
(1,1228)	1:A:92:ASN:H	1:A:91:LYS:HB2	1	0.47
(1,1171)	1:A:50:VAL:HB	1:A:50:VAL:H	18	0.47
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB2	16	0.46
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB3	16	0.46
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB2	30	0.46
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB3	30	0.46
(1,80)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	5	0.46
(1,80)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	5	0.46
(1,80)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	5	0.46
(1,80)	1:A:89:VAL:HG21	1:A:63:PRO:HG3	5	0.46
(1,80)	1:A:89:VAL:HG22	1:A:63:PRO:HG3	5	0.46
(1,80)	1:A:89:VAL:HG23	1:A:63:PRO:HG3	5	0.46
(1,80)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	12	0.46
(1,80)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	12	0.46
(1,80)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	12	0.46
(1,80)	1:A:89:VAL:HG21	1:A:63:PRO:HG3	12	0.46
(1,80)	1:A:89:VAL:HG22	1:A:63:PRO:HG3	12	0.46
(1,80)	1:A:89:VAL:HG23	1:A:63:PRO:HG3	12	0.46
(1,76)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	6	0.46
(1,76)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	6	0.46
(1,76)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	6	0.46
(1,76)	1:A:113:LEU:HD11	1:A:117:LYS:HE2	6	0.46
(1,76)	1:A:113:LEU:HD12	1:A:117:LYS:HE2	6	0.46
(1,76)	1:A:113:LEU:HD13	1:A:117:LYS:HE2	6	0.46
(1,76)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	11	0.46
(1,76)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	11	0.46
(1,76)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	11	0.46
(1,76)	1:A:113:LEU:HD11	1:A:117:LYS:HE2	11	0.46
(1,76)	1:A:113:LEU:HD12	1:A:117:LYS:HE2	11	0.46
(1,76)	1:A:113:LEU:HD13	1:A:117:LYS:HE2	11	0.46
(1,641)	1:A:52:ASN:HB2	1:A:53:LYS:H	14	0.46
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD1	6	0.46
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD2	6	0.46
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD1	22	0.46
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD2	22	0.46
(1,388)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:70:HIS:H	3	0.46
(1,388)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:70:HIS:H	4	0.46
(1,388)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:70:HIS:H	15	0.46
(1,388)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:70:HIS:H	19	0.46
(1,388)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:70:HIS:H	23	0.46
(1,388)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:70:HIS:H	27	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,226)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	12	0.46
(1,226)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	12	0.46
(1,226)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	12	0.46
(1,1587)	1:A:36:GLU:HB3	1:A:38:PRO:HD2	3	0.46
(1,1587)	1:A:31:LYS:HA	1:A:36:GLU:HB3	3	0.46
(1,1547)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:38:PRO:HD2	27	0.46
(1,1547)	1:A:31:LYS:HA	1:A:36:GLU:HB2	27	0.46
(1,1533)	1:A:9:GLU:HA	1:A:12:GLN:HG2	6	0.46
(1,1533)	1:A:9:GLU:HA	1:A:12:GLN:HG2	13	0.46
(1,1520)	1:A:111:ASN:HD21	1:A:107:CYS:HA	13	0.46
(1,1520)	1:A:111:ASN:HD21	1:A:108:PHE:HA	13	0.46
(1,1440)	1:A:84:GLU:HA	1:A:87:LYS:HD2	25	0.46
(1,1440)	1:A:84:GLU:HA	1:A:87:LYS:HD3	25	0.46
(1,1366)	1:A:89:VAL:HA	1:A:63:PRO:HG3	6	0.46
(1,1070)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:67:ASN:HA	5	0.46
(1,1070)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:67:ASN:HA	9	0.46
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB2	25	0.45
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB3	25	0.45
(1,925)	1:A:55:GLN:HA	1:A:55:GLN:HG3	5	0.45
(1,920)	1:A:62:GLY:HA2	1:A:63:PRO:HD2	3	0.45
(1,920)	1:A:62:GLY:HA2	1:A:63:PRO:HD2	25	0.45
(1,901)	1:A:69:VAL:H	1:A:69:VAL:HG21	1	0.45
(1,901)	1:A:69:VAL:H	1:A:69:VAL:HG22	1	0.45
(1,901)	1:A:69:VAL:H	1:A:69:VAL:HG23	1	0.45
(1,76)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	14	0.45
(1,76)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	14	0.45
(1,76)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	14	0.45
(1,76)	1:A:113:LEU:HD11	1:A:117:LYS:HE2	14	0.45
(1,76)	1:A:113:LEU:HD12	1:A:117:LYS:HE2	14	0.45
(1,76)	1:A:113:LEU:HD13	1:A:117:LYS:HE2	14	0.45
(1,641)	1:A:52:ASN:HB2	1:A:53:LYS:H	20	0.45
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG21	3	0.45
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG22	3	0.45
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG23	3	0.45
(1,388)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:70:HIS:H	6	0.45
(1,388)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:70:HIS:H	7	0.45
(1,388)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:70:HIS:H	9	0.45
(1,388)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:70:HIS:H	10	0.45
(1,388)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:70:HIS:H	20	0.45
(1,388)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:70:HIS:H	21	0.45
(1,388)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:70:HIS:H	24	0.45
(1,388)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:70:HIS:H	26	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,388)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:70:HIS:H	29	0.45
(1,226)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	15	0.45
(1,226)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	15	0.45
(1,226)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	15	0.45
(1,1618)	1:A:43:THR:H	1:A:40:ASP:OD1	19	0.45
(1,1447)	1:A:16:THR:HG21	1:A:17:GLU:HA	25	0.45
(1,1447)	1:A:16:THR:HG22	1:A:17:GLU:HA	25	0.45
(1,1447)	1:A:16:THR:HG23	1:A:17:GLU:HA	25	0.45
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD21	28	0.45
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD22	28	0.45
(1,1443)	1:A:71:GLN:HG3	1:A:56:LEU:HD23	28	0.45
(1,1382)	1:A:16:THR:HG21	1:A:20:SER:HB2	29	0.45
(1,1382)	1:A:16:THR:HG21	1:A:20:SER:HB3	29	0.45
(1,1382)	1:A:16:THR:HG22	1:A:20:SER:HB2	29	0.45
(1,1382)	1:A:16:THR:HG22	1:A:20:SER:HB3	29	0.45
(1,1382)	1:A:16:THR:HG23	1:A:20:SER:HB2	29	0.45
(1,1382)	1:A:16:THR:HG23	1:A:20:SER:HB3	29	0.45
(1,1070)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:67:ASN:HA	26	0.45
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB2	15	0.44
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB3	15	0.44
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB2	23	0.44
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB3	23	0.44
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB2	24	0.44
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB3	24	0.44
(1,925)	1:A:55:GLN:HA	1:A:55:GLN:HG3	21	0.44
(1,920)	1:A:62:GLY:HA2	1:A:63:PRO:HD2	12	0.44
(1,80)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	13	0.44
(1,80)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	13	0.44
(1,80)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	13	0.44
(1,80)	1:A:89:VAL:HG21	1:A:63:PRO:HG3	13	0.44
(1,80)	1:A:89:VAL:HG22	1:A:63:PRO:HG3	13	0.44
(1,80)	1:A:89:VAL:HG23	1:A:63:PRO:HG3	13	0.44
(1,80)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	27	0.44
(1,80)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	27	0.44
(1,80)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	27	0.44
(1,80)	1:A:89:VAL:HG21	1:A:63:PRO:HG3	27	0.44
(1,80)	1:A:89:VAL:HG22	1:A:63:PRO:HG3	27	0.44
(1,80)	1:A:89:VAL:HG23	1:A:63:PRO:HG3	27	0.44
(1,80)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	28	0.44
(1,80)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	28	0.44
(1,80)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	28	0.44
(1,80)	1:A:89:VAL:HG21	1:A:63:PRO:HG3	28	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,80)	1:A:89:VAL:HG22	1:A:63:PRO:HG3	28	0.44
(1,80)	1:A:89:VAL:HG23	1:A:63:PRO:HG3	28	0.44
(1,76)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	5	0.44
(1,76)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	5	0.44
(1,76)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	5	0.44
(1,76)	1:A:113:LEU:HD11	1:A:117:LYS:HE2	5	0.44
(1,76)	1:A:113:LEU:HD12	1:A:117:LYS:HE2	5	0.44
(1,76)	1:A:113:LEU:HD13	1:A:117:LYS:HE2	5	0.44
(1,76)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	16	0.44
(1,76)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	16	0.44
(1,76)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	16	0.44
(1,76)	1:A:113:LEU:HD11	1:A:117:LYS:HE2	16	0.44
(1,76)	1:A:113:LEU:HD12	1:A:117:LYS:HE2	16	0.44
(1,76)	1:A:113:LEU:HD13	1:A:117:LYS:HE2	16	0.44
(1,76)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	22	0.44
(1,76)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	22	0.44
(1,76)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	22	0.44
(1,76)	1:A:113:LEU:HD11	1:A:117:LYS:HE2	22	0.44
(1,76)	1:A:113:LEU:HD12	1:A:117:LYS:HE2	22	0.44
(1,76)	1:A:113:LEU:HD13	1:A:117:LYS:HE2	22	0.44
(1,641)	1:A:52:ASN:HB2	1:A:53:LYS:H	19	0.44
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD1	8	0.44
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD2	8	0.44
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD1	15	0.44
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD2	15	0.44
(1,388)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:70:HIS:H	28	0.44
(1,226)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	6	0.44
(1,226)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	6	0.44
(1,226)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	6	0.44
(1,226)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	7	0.44
(1,226)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	7	0.44
(1,226)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	7	0.44
(1,1447)	1:A:16:THR:HG21	1:A:17:GLU:HA	2	0.44
(1,1447)	1:A:16:THR:HG22	1:A:17:GLU:HA	2	0.44
(1,1447)	1:A:16:THR:HG23	1:A:17:GLU:HA	2	0.44
(1,1393)	1:A:38:PRO:HD2	1:A:31:LYS:HD2	27	0.44
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG21	5	0.44
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG22	5	0.44
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG23	5	0.44
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG21	14	0.44
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG22	14	0.44
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG23	14	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG21	30	0.44
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG22	30	0.44
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG23	30	0.44
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB2	1	0.43
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB3	1	0.43
(1,925)	1:A:55:GLN:HA	1:A:55:GLN:HG3	9	0.43
(1,920)	1:A:62:GLY:HA2	1:A:63:PRO:HD2	5	0.43
(1,920)	1:A:62:GLY:HA2	1:A:63:PRO:HD2	10	0.43
(1,920)	1:A:62:GLY:HA2	1:A:63:PRO:HD2	29	0.43
(1,80)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	14	0.43
(1,80)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	14	0.43
(1,80)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	14	0.43
(1,80)	1:A:89:VAL:HG21	1:A:63:PRO:HG3	14	0.43
(1,80)	1:A:89:VAL:HG22	1:A:63:PRO:HG3	14	0.43
(1,80)	1:A:89:VAL:HG23	1:A:63:PRO:HG3	14	0.43
(1,80)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	18	0.43
(1,80)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	18	0.43
(1,80)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	18	0.43
(1,80)	1:A:89:VAL:HG21	1:A:63:PRO:HG3	18	0.43
(1,80)	1:A:89:VAL:HG22	1:A:63:PRO:HG3	18	0.43
(1,80)	1:A:89:VAL:HG23	1:A:63:PRO:HG3	18	0.43
(1,80)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	23	0.43
(1,80)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	23	0.43
(1,80)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	23	0.43
(1,80)	1:A:89:VAL:HG21	1:A:63:PRO:HG3	23	0.43
(1,80)	1:A:89:VAL:HG22	1:A:63:PRO:HG3	23	0.43
(1,80)	1:A:89:VAL:HG23	1:A:63:PRO:HG3	23	0.43
(1,76)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	15	0.43
(1,76)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	15	0.43
(1,76)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	15	0.43
(1,76)	1:A:113:LEU:HD11	1:A:117:LYS:HE2	15	0.43
(1,76)	1:A:113:LEU:HD12	1:A:117:LYS:HE2	15	0.43
(1,76)	1:A:113:LEU:HD13	1:A:117:LYS:HE2	15	0.43
(1,641)	1:A:52:ASN:HB2	1:A:53:LYS:H	21	0.43
(1,407)	1:A:76:ARG:HA	1:A:76:ARG:HG3	20	0.43
(1,226)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	11	0.43
(1,226)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	11	0.43
(1,226)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	11	0.43
(1,226)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	17	0.43
(1,226)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	17	0.43
(1,226)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	17	0.43
(1,1618)	1:A:43:THR:H	1:A:40:ASP:OD1	5	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1382)	1:A:16:THR:HG21	1:A:20:SER:HB2	6	0.43
(1,1382)	1:A:16:THR:HG21	1:A:20:SER:HB3	6	0.43
(1,1382)	1:A:16:THR:HG22	1:A:20:SER:HB2	6	0.43
(1,1382)	1:A:16:THR:HG22	1:A:20:SER:HB3	6	0.43
(1,1382)	1:A:16:THR:HG23	1:A:20:SER:HB2	6	0.43
(1,1382)	1:A:16:THR:HG23	1:A:20:SER:HB3	6	0.43
(1,1382)	1:A:16:THR:HG21	1:A:20:SER:HB2	12	0.43
(1,1382)	1:A:16:THR:HG21	1:A:20:SER:HB3	12	0.43
(1,1382)	1:A:16:THR:HG22	1:A:20:SER:HB2	12	0.43
(1,1382)	1:A:16:THR:HG22	1:A:20:SER:HB3	12	0.43
(1,1382)	1:A:16:THR:HG23	1:A:20:SER:HB2	12	0.43
(1,1382)	1:A:16:THR:HG23	1:A:20:SER:HB3	12	0.43
(1,1171)	1:A:50:VAL:HB	1:A:50:VAL:H	28	0.43
(1,1127)	1:A:55:GLN:HA	1:A:55:GLN:HG2	24	0.43
(1,1127)	1:A:55:GLN:HA	1:A:55:GLN:HG2	27	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG21	1	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG22	1	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG23	1	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG21	2	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG22	2	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG23	2	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG21	3	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG22	3	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG23	3	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG21	6	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG22	6	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG23	6	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG21	7	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG22	7	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG23	7	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG21	8	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG22	8	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG23	8	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG21	9	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG22	9	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG23	9	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG21	10	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG22	10	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG23	10	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG21	11	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG22	11	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG23	11	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG21	12	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG22	12	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG23	12	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG21	13	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG22	13	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG23	13	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG21	15	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG22	15	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG23	15	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG21	16	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG22	16	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG23	16	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG21	17	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG22	17	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG23	17	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG21	18	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG22	18	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG23	18	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG21	19	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG22	19	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG23	19	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG21	20	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG22	20	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG23	20	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG21	21	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG22	21	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG23	21	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG21	22	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG22	22	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG23	22	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG21	23	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG22	23	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG23	23	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG21	24	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG22	24	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG23	24	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG21	26	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG22	26	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG23	26	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG21	27	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG22	27	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG23	27	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG21	28	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG22	28	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG23	28	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG21	29	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG22	29	0.43
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG23	29	0.43
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE21	15	0.43
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE21	15	0.43
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE21	15	0.43
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB2	12	0.42
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB3	12	0.42
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB2	17	0.42
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB3	17	0.42
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB2	22	0.42
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB3	22	0.42
(1,920)	1:A:62:GLY:HA2	1:A:63:PRO:HD2	13	0.42
(1,920)	1:A:62:GLY:HA2	1:A:63:PRO:HD2	14	0.42
(1,920)	1:A:62:GLY:HA2	1:A:63:PRO:HD2	28	0.42
(1,826)	1:A:87:LYS:HA	1:A:87:LYS:HG2	10	0.42
(1,80)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	4	0.42
(1,80)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	4	0.42
(1,80)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	4	0.42
(1,80)	1:A:89:VAL:HG21	1:A:63:PRO:HG3	4	0.42
(1,80)	1:A:89:VAL:HG22	1:A:63:PRO:HG3	4	0.42
(1,80)	1:A:89:VAL:HG23	1:A:63:PRO:HG3	4	0.42
(1,80)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	6	0.42
(1,80)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	6	0.42
(1,80)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	6	0.42
(1,80)	1:A:89:VAL:HG21	1:A:63:PRO:HG3	6	0.42
(1,80)	1:A:89:VAL:HG22	1:A:63:PRO:HG3	6	0.42
(1,80)	1:A:89:VAL:HG23	1:A:63:PRO:HG3	6	0.42
(1,80)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	15	0.42
(1,80)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	15	0.42
(1,80)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	15	0.42
(1,80)	1:A:89:VAL:HG21	1:A:63:PRO:HG3	15	0.42
(1,80)	1:A:89:VAL:HG22	1:A:63:PRO:HG3	15	0.42
(1,80)	1:A:89:VAL:HG23	1:A:63:PRO:HG3	15	0.42
(1,80)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	21	0.42
(1,80)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	21	0.42
(1,80)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	21	0.42
(1,80)	1:A:89:VAL:HG21	1:A:63:PRO:HG3	21	0.42
(1,80)	1:A:89:VAL:HG22	1:A:63:PRO:HG3	21	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,80)	1:A:89:VAL:HG23	1:A:63:PRO:HG3	21	0.42
(1,80)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	24	0.42
(1,80)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	24	0.42
(1,80)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	24	0.42
(1,80)	1:A:89:VAL:HG21	1:A:63:PRO:HG3	24	0.42
(1,80)	1:A:89:VAL:HG22	1:A:63:PRO:HG3	24	0.42
(1,80)	1:A:89:VAL:HG23	1:A:63:PRO:HG3	24	0.42
(1,76)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	9	0.42
(1,76)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	9	0.42
(1,76)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	9	0.42
(1,76)	1:A:113:LEU:HD11	1:A:117:LYS:HE2	9	0.42
(1,76)	1:A:113:LEU:HD12	1:A:117:LYS:HE2	9	0.42
(1,76)	1:A:113:LEU:HD13	1:A:117:LYS:HE2	9	0.42
(1,555)	1:A:96:ASN:H	1:A:92:ASN:HD22	9	0.42
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD1	2	0.42
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD2	2	0.42
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD1	19	0.42
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD2	19	0.42
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD1	23	0.42
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD2	23	0.42
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD1	26	0.42
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD2	26	0.42
(1,246)	1:A:84:GLU:HG3	1:A:84:GLU:HA	11	0.42
(1,207)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE22	28	0.42
(1,207)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE22	28	0.42
(1,207)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE22	28	0.42
(1,1597)	1:A:53:LYS:HD2	1:A:14:TYR:HE1	14	0.42
(1,1597)	1:A:53:LYS:HD2	1:A:14:TYR:HE2	14	0.42
(1,1597)	1:A:53:LYS:HD3	1:A:14:TYR:HE1	14	0.42
(1,1597)	1:A:53:LYS:HD3	1:A:14:TYR:HE2	14	0.42
(1,1587)	1:A:36:GLU:HB3	1:A:38:PRO:HD2	1	0.42
(1,1587)	1:A:31:LYS:HA	1:A:36:GLU:HB3	1	0.42
(1,1127)	1:A:55:GLN:HA	1:A:55:GLN:HG2	26	0.42
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG21	4	0.42
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG22	4	0.42
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG23	4	0.42
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG21	25	0.42
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG22	25	0.42
(1,1057)	1:A:120:ILE:HG13	1:A:120:ILE:HG23	25	0.42
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE21	2	0.42
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE21	2	0.42
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE21	2	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB2	29	0.41
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB3	29	0.41
(1,925)	1:A:55:GLN:HA	1:A:55:GLN:HG3	20	0.41
(1,920)	1:A:62:GLY:HA2	1:A:63:PRO:HD2	21	0.41
(1,80)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	20	0.41
(1,80)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	20	0.41
(1,80)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	20	0.41
(1,80)	1:A:89:VAL:HG21	1:A:63:PRO:HG3	20	0.41
(1,80)	1:A:89:VAL:HG22	1:A:63:PRO:HG3	20	0.41
(1,80)	1:A:89:VAL:HG23	1:A:63:PRO:HG3	20	0.41
(1,76)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	13	0.41
(1,76)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	13	0.41
(1,76)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	13	0.41
(1,76)	1:A:113:LEU:HD11	1:A:117:LYS:HE2	13	0.41
(1,76)	1:A:113:LEU:HD12	1:A:117:LYS:HE2	13	0.41
(1,76)	1:A:113:LEU:HD13	1:A:117:LYS:HE2	13	0.41
(1,76)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	17	0.41
(1,76)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	17	0.41
(1,76)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	17	0.41
(1,76)	1:A:113:LEU:HD11	1:A:117:LYS:HE2	17	0.41
(1,76)	1:A:113:LEU:HD12	1:A:117:LYS:HE2	17	0.41
(1,76)	1:A:113:LEU:HD13	1:A:117:LYS:HE2	17	0.41
(1,533)	1:A:50:VAL:HG21	1:A:50:VAL:HA	18	0.41
(1,533)	1:A:50:VAL:HG22	1:A:50:VAL:HA	18	0.41
(1,533)	1:A:50:VAL:HG23	1:A:50:VAL:HA	18	0.41
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD1	4	0.41
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD2	4	0.41
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD1	27	0.41
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD2	27	0.41
(1,207)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE22	22	0.41
(1,207)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE22	22	0.41
(1,207)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE22	22	0.41
(1,1533)	1:A:9:GLU:HA	1:A:12:GLN:HG2	19	0.41
(1,1142)	1:A:77:ASP:H	1:A:77:ASP:HB3	12	0.41
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB2	2	0.4
(1,960)	1:A:104:GLY:HA3	1:A:107:CYS:HB3	2	0.4
(1,925)	1:A:55:GLN:HA	1:A:55:GLN:HG3	3	0.4
(1,920)	1:A:62:GLY:HA2	1:A:63:PRO:HD2	8	0.4
(1,920)	1:A:62:GLY:HA2	1:A:63:PRO:HD2	11	0.4
(1,920)	1:A:62:GLY:HA2	1:A:63:PRO:HD2	27	0.4
(1,80)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	2	0.4
(1,80)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	2	0.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,80)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	2	0.4
(1,80)	1:A:89:VAL:HG21	1:A:63:PRO:HG3	2	0.4
(1,80)	1:A:89:VAL:HG22	1:A:63:PRO:HG3	2	0.4
(1,80)	1:A:89:VAL:HG23	1:A:63:PRO:HG3	2	0.4
(1,80)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	3	0.4
(1,80)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	3	0.4
(1,80)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	3	0.4
(1,80)	1:A:89:VAL:HG21	1:A:63:PRO:HG3	3	0.4
(1,80)	1:A:89:VAL:HG22	1:A:63:PRO:HG3	3	0.4
(1,80)	1:A:89:VAL:HG23	1:A:63:PRO:HG3	3	0.4
(1,80)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	10	0.4
(1,80)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	10	0.4
(1,80)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	10	0.4
(1,80)	1:A:89:VAL:HG21	1:A:63:PRO:HG3	10	0.4
(1,80)	1:A:89:VAL:HG22	1:A:63:PRO:HG3	10	0.4
(1,80)	1:A:89:VAL:HG23	1:A:63:PRO:HG3	10	0.4
(1,80)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	11	0.4
(1,80)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	11	0.4
(1,80)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	11	0.4
(1,80)	1:A:89:VAL:HG21	1:A:63:PRO:HG3	11	0.4
(1,80)	1:A:89:VAL:HG22	1:A:63:PRO:HG3	11	0.4
(1,80)	1:A:89:VAL:HG23	1:A:63:PRO:HG3	11	0.4
(1,80)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	29	0.4
(1,80)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	29	0.4
(1,80)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	29	0.4
(1,80)	1:A:89:VAL:HG21	1:A:63:PRO:HG3	29	0.4
(1,80)	1:A:89:VAL:HG22	1:A:63:PRO:HG3	29	0.4
(1,80)	1:A:89:VAL:HG23	1:A:63:PRO:HG3	29	0.4
(1,76)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	19	0.4
(1,76)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	19	0.4
(1,76)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	19	0.4
(1,76)	1:A:113:LEU:HD11	1:A:117:LYS:HE2	19	0.4
(1,76)	1:A:113:LEU:HD12	1:A:117:LYS:HE2	19	0.4
(1,76)	1:A:113:LEU:HD13	1:A:117:LYS:HE2	19	0.4
(1,76)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	23	0.4
(1,76)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	23	0.4
(1,76)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	23	0.4
(1,76)	1:A:113:LEU:HD11	1:A:117:LYS:HE2	23	0.4
(1,76)	1:A:113:LEU:HD12	1:A:117:LYS:HE2	23	0.4
(1,76)	1:A:113:LEU:HD13	1:A:117:LYS:HE2	23	0.4
(1,76)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	25	0.4
(1,76)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	25	0.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,76)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	25	0.4
(1,76)	1:A:113:LEU:HD11	1:A:117:LYS:HE2	25	0.4
(1,76)	1:A:113:LEU:HD12	1:A:117:LYS:HE2	25	0.4
(1,76)	1:A:113:LEU:HD13	1:A:117:LYS:HE2	25	0.4
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG21	24	0.4
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG22	24	0.4
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG23	24	0.4
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD1	20	0.4
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD2	20	0.4
(1,246)	1:A:84:GLU:HG3	1:A:84:GLU:HA	20	0.4
(1,226)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	9	0.4
(1,226)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	9	0.4
(1,226)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	9	0.4
(1,226)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	28	0.4
(1,226)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	28	0.4
(1,226)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	28	0.4
(1,1587)	1:A:36:GLU:HB3	1:A:38:PRO:HD2	16	0.4
(1,1587)	1:A:31:LYS:HA	1:A:36:GLU:HB3	16	0.4
(1,1144)	1:A:85:VAL:HA	1:A:85:VAL:HG21	10	0.4
(1,1144)	1:A:85:VAL:HA	1:A:85:VAL:HG22	10	0.4
(1,1144)	1:A:85:VAL:HA	1:A:85:VAL:HG23	10	0.4
(1,1142)	1:A:77:ASP:H	1:A:77:ASP:HB3	2	0.4
(1,1142)	1:A:77:ASP:H	1:A:77:ASP:HB3	22	0.4
(1,105)	1:A:81:VAL:HA	1:A:84:GLU:HG2	19	0.4
(1,969)	1:A:48:LYS:HA	1:A:48:LYS:HG2	4	0.39
(1,969)	1:A:48:LYS:HA	1:A:48:LYS:HG3	4	0.39
(1,934)	1:A:106:LYS:HA	1:A:109:GLN:HG3	2	0.39
(1,920)	1:A:62:GLY:HA2	1:A:63:PRO:HD2	2	0.39
(1,80)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	25	0.39
(1,80)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	25	0.39
(1,80)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	25	0.39
(1,80)	1:A:89:VAL:HG21	1:A:63:PRO:HG3	25	0.39
(1,80)	1:A:89:VAL:HG22	1:A:63:PRO:HG3	25	0.39
(1,80)	1:A:89:VAL:HG23	1:A:63:PRO:HG3	25	0.39
(1,76)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	8	0.39
(1,76)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	8	0.39
(1,76)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	8	0.39
(1,76)	1:A:113:LEU:HD11	1:A:117:LYS:HE2	8	0.39
(1,76)	1:A:113:LEU:HD12	1:A:117:LYS:HE2	8	0.39
(1,76)	1:A:113:LEU:HD13	1:A:117:LYS:HE2	8	0.39
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG21	29	0.39
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG22	29	0.39

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG23	29	0.39
(1,246)	1:A:84:GLU:HG3	1:A:84:GLU:HA	13	0.39
(1,246)	1:A:84:GLU:HG3	1:A:84:GLU:HA	28	0.39
(1,226)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	23	0.39
(1,226)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	23	0.39
(1,226)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	23	0.39
(1,1533)	1:A:9:GLU:HA	1:A:12:GLN:HG2	23	0.39
(1,1382)	1:A:16:THR:HG21	1:A:20:SER:HB2	27	0.39
(1,1382)	1:A:16:THR:HG21	1:A:20:SER:HB3	27	0.39
(1,1382)	1:A:16:THR:HG22	1:A:20:SER:HB2	27	0.39
(1,1382)	1:A:16:THR:HG22	1:A:20:SER:HB3	27	0.39
(1,1382)	1:A:16:THR:HG23	1:A:20:SER:HB2	27	0.39
(1,1382)	1:A:16:THR:HG23	1:A:20:SER:HB3	27	0.39
(1,1142)	1:A:77:ASP:H	1:A:77:ASP:HB3	7	0.39
(1,1142)	1:A:77:ASP:H	1:A:77:ASP:HB3	8	0.39
(1,1142)	1:A:77:ASP:H	1:A:77:ASP:HB3	11	0.39
(1,1142)	1:A:77:ASP:H	1:A:77:ASP:HB3	14	0.39
(1,1142)	1:A:77:ASP:H	1:A:77:ASP:HB3	15	0.39
(1,1142)	1:A:77:ASP:H	1:A:77:ASP:HB3	19	0.39
(1,1142)	1:A:77:ASP:H	1:A:77:ASP:HB3	24	0.39
(1,1142)	1:A:77:ASP:H	1:A:77:ASP:HB3	25	0.39
(1,1142)	1:A:77:ASP:H	1:A:77:ASP:HB3	29	0.39
(1,1070)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:67:ASN:HA	1	0.39
(1,920)	1:A:62:GLY:HA2	1:A:63:PRO:HD2	23	0.38
(1,916)	1:A:38:PRO:HB2	1:A:38:PRO:HA	3	0.38
(1,916)	1:A:38:PRO:HB2	1:A:38:PRO:HA	16	0.38
(1,76)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	1	0.38
(1,76)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	1	0.38
(1,76)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	1	0.38
(1,76)	1:A:113:LEU:HD11	1:A:117:LYS:HE2	1	0.38
(1,76)	1:A:113:LEU:HD12	1:A:117:LYS:HE2	1	0.38
(1,76)	1:A:113:LEU:HD13	1:A:117:LYS:HE2	1	0.38
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD1	5	0.38
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD2	5	0.38
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD1	11	0.38
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD2	11	0.38
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD1	13	0.38
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD2	13	0.38
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD1	14	0.38
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD2	14	0.38
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD1	16	0.38
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD2	16	0.38

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD1	21	0.38
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD2	21	0.38
(1,246)	1:A:84:GLU:HG3	1:A:84:GLU:HA	9	0.38
(1,246)	1:A:84:GLU:HG3	1:A:84:GLU:HA	25	0.38
(1,226)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	5	0.38
(1,226)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	5	0.38
(1,226)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	5	0.38
(1,226)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	14	0.38
(1,226)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	14	0.38
(1,226)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	14	0.38
(1,226)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	18	0.38
(1,226)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	18	0.38
(1,226)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	18	0.38
(1,226)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	19	0.38
(1,226)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	19	0.38
(1,226)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	19	0.38
(1,207)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE22	7	0.38
(1,207)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE22	7	0.38
(1,207)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE22	7	0.38
(1,1547)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:38:PRO:HD2	22	0.38
(1,1547)	1:A:31:LYS:HA	1:A:36:GLU:HB2	22	0.38
(1,1533)	1:A:9:GLU:HA	1:A:12:GLN:HG2	4	0.38
(1,1408)	1:A:16:THR:HG21	1:A:19:VAL:HB	5	0.38
(1,1408)	1:A:16:THR:HG22	1:A:19:VAL:HB	5	0.38
(1,1408)	1:A:16:THR:HG23	1:A:19:VAL:HB	5	0.38
(1,1408)	1:A:16:THR:HG21	1:A:17:GLU:HG3	5	0.38
(1,1408)	1:A:16:THR:HG22	1:A:17:GLU:HG3	5	0.38
(1,1408)	1:A:16:THR:HG23	1:A:17:GLU:HG3	5	0.38
(1,1142)	1:A:77:ASP:H	1:A:77:ASP:HB3	3	0.38
(1,1142)	1:A:77:ASP:H	1:A:77:ASP:HB3	4	0.38
(1,1142)	1:A:77:ASP:H	1:A:77:ASP:HB3	6	0.38
(1,1142)	1:A:77:ASP:H	1:A:77:ASP:HB3	9	0.38
(1,1142)	1:A:77:ASP:H	1:A:77:ASP:HB3	13	0.38
(1,1142)	1:A:77:ASP:H	1:A:77:ASP:HB3	21	0.38
(1,1070)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:67:ASN:HA	21	0.38
(1,1070)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:67:ASN:HA	25	0.38
(1,920)	1:A:62:GLY:HA2	1:A:63:PRO:HD2	24	0.37
(1,916)	1:A:38:PRO:HB2	1:A:38:PRO:HA	2	0.37
(1,916)	1:A:38:PRO:HB2	1:A:38:PRO:HA	4	0.37
(1,916)	1:A:38:PRO:HB2	1:A:38:PRO:HA	8	0.37
(1,916)	1:A:38:PRO:HB2	1:A:38:PRO:HA	9	0.37
(1,916)	1:A:38:PRO:HB2	1:A:38:PRO:HA	10	0.37

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,916)	1:A:38:PRO:HB2	1:A:38:PRO:HA	11	0.37
(1,916)	1:A:38:PRO:HB2	1:A:38:PRO:HA	14	0.37
(1,916)	1:A:38:PRO:HB2	1:A:38:PRO:HA	18	0.37
(1,916)	1:A:38:PRO:HB2	1:A:38:PRO:HA	19	0.37
(1,916)	1:A:38:PRO:HB2	1:A:38:PRO:HA	20	0.37
(1,916)	1:A:38:PRO:HB2	1:A:38:PRO:HA	21	0.37
(1,916)	1:A:38:PRO:HB2	1:A:38:PRO:HA	23	0.37
(1,916)	1:A:38:PRO:HB2	1:A:38:PRO:HA	28	0.37
(1,916)	1:A:38:PRO:HB2	1:A:38:PRO:HA	30	0.37
(1,80)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	16	0.37
(1,80)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	16	0.37
(1,80)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	16	0.37
(1,80)	1:A:89:VAL:HG21	1:A:63:PRO:HG3	16	0.37
(1,80)	1:A:89:VAL:HG22	1:A:63:PRO:HG3	16	0.37
(1,80)	1:A:89:VAL:HG23	1:A:63:PRO:HG3	16	0.37
(1,80)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	26	0.37
(1,80)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	26	0.37
(1,80)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	26	0.37
(1,80)	1:A:89:VAL:HG21	1:A:63:PRO:HG3	26	0.37
(1,80)	1:A:89:VAL:HG22	1:A:63:PRO:HG3	26	0.37
(1,80)	1:A:89:VAL:HG23	1:A:63:PRO:HG3	26	0.37
(1,76)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	18	0.37
(1,76)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	18	0.37
(1,76)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	18	0.37
(1,76)	1:A:113:LEU:HD11	1:A:117:LYS:HE2	18	0.37
(1,76)	1:A:113:LEU:HD12	1:A:117:LYS:HE2	18	0.37
(1,76)	1:A:113:LEU:HD13	1:A:117:LYS:HE2	18	0.37
(1,695)	1:A:27:ASP:H	1:A:27:ASP:HB2	10	0.37
(1,695)	1:A:27:ASP:H	1:A:27:ASP:HB2	20	0.37
(1,695)	1:A:27:ASP:H	1:A:27:ASP:HB2	27	0.37
(1,533)	1:A:50:VAL:HG21	1:A:50:VAL:HA	28	0.37
(1,533)	1:A:50:VAL:HG22	1:A:50:VAL:HA	28	0.37
(1,533)	1:A:50:VAL:HG23	1:A:50:VAL:HA	28	0.37
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG21	12	0.37
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG22	12	0.37
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG23	12	0.37
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD1	3	0.37
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD2	3	0.37
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD1	12	0.37
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD2	12	0.37
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD1	24	0.37
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD2	24	0.37

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,351)	1:A:27:ASP:HA	1:A:27:ASP:HB2	3	0.37
(1,246)	1:A:84:GLU:HG3	1:A:84:GLU:HA	19	0.37
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:ILE:HG12	4	0.37
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:ILE:HG12	4	0.37
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:ILE:HG12	4	0.37
(1,1142)	1:A:77:ASP:H	1:A:77:ASP:HB3	10	0.37
(1,1142)	1:A:77:ASP:H	1:A:77:ASP:HB3	16	0.37
(1,1142)	1:A:77:ASP:H	1:A:77:ASP:HB3	27	0.37
(1,1142)	1:A:77:ASP:H	1:A:77:ASP:HB3	28	0.37
(1,1142)	1:A:77:ASP:H	1:A:77:ASP:HB3	30	0.37
(1,969)	1:A:48:LYS:HA	1:A:48:LYS:HG2	23	0.36
(1,969)	1:A:48:LYS:HA	1:A:48:LYS:HG3	23	0.36
(1,920)	1:A:62:GLY:HA2	1:A:63:PRO:HD2	15	0.36
(1,916)	1:A:38:PRO:HB2	1:A:38:PRO:HA	5	0.36
(1,916)	1:A:38:PRO:HB2	1:A:38:PRO:HA	6	0.36
(1,916)	1:A:38:PRO:HB2	1:A:38:PRO:HA	7	0.36
(1,916)	1:A:38:PRO:HB2	1:A:38:PRO:HA	12	0.36
(1,916)	1:A:38:PRO:HB2	1:A:38:PRO:HA	13	0.36
(1,916)	1:A:38:PRO:HB2	1:A:38:PRO:HA	15	0.36
(1,916)	1:A:38:PRO:HB2	1:A:38:PRO:HA	24	0.36
(1,916)	1:A:38:PRO:HB2	1:A:38:PRO:HA	25	0.36
(1,916)	1:A:38:PRO:HB2	1:A:38:PRO:HA	26	0.36
(1,916)	1:A:38:PRO:HB2	1:A:38:PRO:HA	27	0.36
(1,916)	1:A:38:PRO:HB2	1:A:38:PRO:HA	29	0.36
(1,80)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	8	0.36
(1,80)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	8	0.36
(1,80)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	8	0.36
(1,80)	1:A:89:VAL:HG21	1:A:63:PRO:HG3	8	0.36
(1,80)	1:A:89:VAL:HG22	1:A:63:PRO:HG3	8	0.36
(1,80)	1:A:89:VAL:HG23	1:A:63:PRO:HG3	8	0.36
(1,697)	1:A:88:CYS:HB2	1:A:85:VAL:HA	20	0.36
(1,697)	1:A:88:CYS:HB3	1:A:85:VAL:HA	20	0.36
(1,512)	1:A:91:LYS:HB2	1:A:91:LYS:HA	11	0.36
(1,512)	1:A:91:LYS:HB2	1:A:91:LYS:HA	13	0.36
(1,512)	1:A:91:LYS:HB2	1:A:91:LYS:HA	15	0.36
(1,512)	1:A:91:LYS:HB2	1:A:91:LYS:HA	20	0.36
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD1	17	0.36
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD2	17	0.36
(1,351)	1:A:27:ASP:HA	1:A:27:ASP:HB2	7	0.36
(1,351)	1:A:27:ASP:HA	1:A:27:ASP:HB2	8	0.36
(1,351)	1:A:27:ASP:HA	1:A:27:ASP:HB2	11	0.36
(1,351)	1:A:27:ASP:HA	1:A:27:ASP:HB2	14	0.36

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,351)	1:A:27:ASP:HA	1:A:27:ASP:HB2	15	0.36
(1,246)	1:A:84:GLU:HG3	1:A:84:GLU:HA	30	0.36
(1,226)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	1	0.36
(1,226)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	1	0.36
(1,226)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	1	0.36
(1,207)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE22	2	0.36
(1,207)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE22	2	0.36
(1,207)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE22	2	0.36
(1,1618)	1:A:43:THR:H	1:A:40:ASP:OD1	21	0.36
(1,1618)	1:A:43:THR:H	1:A:40:ASP:OD1	30	0.36
(1,1489)	1:A:93:THR:H	1:A:103:ARG:HH11	10	0.36
(1,1489)	1:A:93:THR:H	1:A:103:ARG:HH12	10	0.36
(1,1489)	1:A:93:THR:H	1:A:103:ARG:HH21	10	0.36
(1,1489)	1:A:93:THR:H	1:A:103:ARG:HH22	10	0.36
(1,1376)	1:A:50:VAL:HG11	1:A:54:MET:HG3	28	0.36
(1,1376)	1:A:50:VAL:HG12	1:A:54:MET:HG3	28	0.36
(1,1376)	1:A:50:VAL:HG13	1:A:54:MET:HG3	28	0.36
(1,1376)	1:A:50:VAL:HG11	1:A:14:TYR:HB2	28	0.36
(1,1376)	1:A:50:VAL:HG11	1:A:14:TYR:HB3	28	0.36
(1,1376)	1:A:50:VAL:HG12	1:A:14:TYR:HB2	28	0.36
(1,1376)	1:A:50:VAL:HG12	1:A:14:TYR:HB3	28	0.36
(1,1376)	1:A:50:VAL:HG13	1:A:14:TYR:HB2	28	0.36
(1,1376)	1:A:50:VAL:HG13	1:A:14:TYR:HB3	28	0.36
(1,1142)	1:A:77:ASP:H	1:A:77:ASP:HB3	18	0.36
(1,1142)	1:A:77:ASP:H	1:A:77:ASP:HB3	26	0.36
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE21	13	0.36
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE21	13	0.36
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE21	13	0.36
(1,969)	1:A:48:LYS:HA	1:A:48:LYS:HG2	20	0.35
(1,969)	1:A:48:LYS:HA	1:A:48:LYS:HG3	20	0.35
(1,920)	1:A:62:GLY:HA2	1:A:63:PRO:HD2	4	0.35
(1,916)	1:A:38:PRO:HB2	1:A:38:PRO:HA	17	0.35
(1,916)	1:A:38:PRO:HB2	1:A:38:PRO:HA	22	0.35
(1,844)	1:A:44:MET:HA	1:A:44:MET:HG2	5	0.35
(1,661)	1:A:110:LYS:HB3	1:A:110:LYS:HG2	4	0.35
(1,574)	1:A:61:GLU:HB2	1:A:61:GLU:HA	4	0.35
(1,574)	1:A:61:GLU:HB2	1:A:61:GLU:HA	9	0.35
(1,574)	1:A:61:GLU:HB2	1:A:61:GLU:HA	13	0.35
(1,574)	1:A:61:GLU:HB2	1:A:61:GLU:HA	14	0.35
(1,574)	1:A:61:GLU:HB2	1:A:61:GLU:HA	15	0.35
(1,574)	1:A:61:GLU:HB2	1:A:61:GLU:HA	23	0.35
(1,574)	1:A:61:GLU:HB2	1:A:61:GLU:HA	27	0.35

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,512)	1:A:91:LYS:HB2	1:A:91:LYS:HA	3	0.35
(1,512)	1:A:91:LYS:HB2	1:A:91:LYS:HA	4	0.35
(1,512)	1:A:91:LYS:HB2	1:A:91:LYS:HA	5	0.35
(1,512)	1:A:91:LYS:HB2	1:A:91:LYS:HA	7	0.35
(1,512)	1:A:91:LYS:HB2	1:A:91:LYS:HA	8	0.35
(1,512)	1:A:91:LYS:HB2	1:A:91:LYS:HA	10	0.35
(1,512)	1:A:91:LYS:HB2	1:A:91:LYS:HA	12	0.35
(1,512)	1:A:91:LYS:HB2	1:A:91:LYS:HA	14	0.35
(1,512)	1:A:91:LYS:HB2	1:A:91:LYS:HA	16	0.35
(1,512)	1:A:91:LYS:HB2	1:A:91:LYS:HA	17	0.35
(1,512)	1:A:91:LYS:HB2	1:A:91:LYS:HA	19	0.35
(1,512)	1:A:91:LYS:HB2	1:A:91:LYS:HA	22	0.35
(1,512)	1:A:91:LYS:HB2	1:A:91:LYS:HA	24	0.35
(1,512)	1:A:91:LYS:HB2	1:A:91:LYS:HA	25	0.35
(1,512)	1:A:91:LYS:HB2	1:A:91:LYS:HA	26	0.35
(1,512)	1:A:91:LYS:HB2	1:A:91:LYS:HA	27	0.35
(1,512)	1:A:91:LYS:HB2	1:A:91:LYS:HA	28	0.35
(1,512)	1:A:91:LYS:HB2	1:A:91:LYS:HA	29	0.35
(1,512)	1:A:91:LYS:HB2	1:A:91:LYS:HA	30	0.35
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG21	28	0.35
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG22	28	0.35
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG23	28	0.35
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:ILE:HG12	5	0.35
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:ILE:HG12	5	0.35
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:ILE:HG12	5	0.35
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:ILE:HG12	19	0.35
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:ILE:HG12	19	0.35
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:ILE:HG12	19	0.35
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:ILE:HG12	20	0.35
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:ILE:HG12	20	0.35
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:ILE:HG12	20	0.35
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:ILE:HG12	28	0.35
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:ILE:HG12	28	0.35
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:ILE:HG12	28	0.35
(1,1154)	1:A:31:LYS:HA	1:A:31:LYS:HG2	26	0.35
(1,969)	1:A:48:LYS:HA	1:A:48:LYS:HG2	19	0.34
(1,969)	1:A:48:LYS:HA	1:A:48:LYS:HG3	19	0.34
(1,920)	1:A:62:GLY:HA2	1:A:63:PRO:HD2	6	0.34
(1,920)	1:A:62:GLY:HA2	1:A:63:PRO:HD2	20	0.34
(1,80)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HG3	19	0.34
(1,80)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HG3	19	0.34
(1,80)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HG3	19	0.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,80)	1:A:89:VAL:HG21	1:A:63:PRO:HG3	19	0.34
(1,80)	1:A:89:VAL:HG22	1:A:63:PRO:HG3	19	0.34
(1,80)	1:A:89:VAL:HG23	1:A:63:PRO:HG3	19	0.34
(1,574)	1:A:61:GLU:HB2	1:A:61:GLU:HA	1	0.34
(1,574)	1:A:61:GLU:HB2	1:A:61:GLU:HA	3	0.34
(1,574)	1:A:61:GLU:HB2	1:A:61:GLU:HA	5	0.34
(1,574)	1:A:61:GLU:HB2	1:A:61:GLU:HA	6	0.34
(1,574)	1:A:61:GLU:HB2	1:A:61:GLU:HA	7	0.34
(1,574)	1:A:61:GLU:HB2	1:A:61:GLU:HA	8	0.34
(1,574)	1:A:61:GLU:HB2	1:A:61:GLU:HA	10	0.34
(1,574)	1:A:61:GLU:HB2	1:A:61:GLU:HA	11	0.34
(1,574)	1:A:61:GLU:HB2	1:A:61:GLU:HA	12	0.34
(1,574)	1:A:61:GLU:HB2	1:A:61:GLU:HA	16	0.34
(1,574)	1:A:61:GLU:HB2	1:A:61:GLU:HA	18	0.34
(1,574)	1:A:61:GLU:HB2	1:A:61:GLU:HA	19	0.34
(1,574)	1:A:61:GLU:HB2	1:A:61:GLU:HA	20	0.34
(1,574)	1:A:61:GLU:HB2	1:A:61:GLU:HA	21	0.34
(1,574)	1:A:61:GLU:HB2	1:A:61:GLU:HA	22	0.34
(1,574)	1:A:61:GLU:HB2	1:A:61:GLU:HA	24	0.34
(1,574)	1:A:61:GLU:HB2	1:A:61:GLU:HA	25	0.34
(1,574)	1:A:61:GLU:HB2	1:A:61:GLU:HA	26	0.34
(1,574)	1:A:61:GLU:HB2	1:A:61:GLU:HA	28	0.34
(1,574)	1:A:61:GLU:HB2	1:A:61:GLU:HA	29	0.34
(1,574)	1:A:61:GLU:HB2	1:A:61:GLU:HA	30	0.34
(1,512)	1:A:91:LYS:HB2	1:A:91:LYS:HA	2	0.34
(1,512)	1:A:91:LYS:HB2	1:A:91:LYS:HA	6	0.34
(1,512)	1:A:91:LYS:HB2	1:A:91:LYS:HA	9	0.34
(1,512)	1:A:91:LYS:HB2	1:A:91:LYS:HA	21	0.34
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG21	17	0.34
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG22	17	0.34
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG23	17	0.34
(1,351)	1:A:27:ASP:HA	1:A:27:ASP:HB2	16	0.34
(1,351)	1:A:27:ASP:HA	1:A:27:ASP:HB2	21	0.34
(1,226)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	8	0.34
(1,226)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	8	0.34
(1,226)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	8	0.34
(1,226)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	16	0.34
(1,226)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	16	0.34
(1,226)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	16	0.34
(1,207)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE22	6	0.34
(1,207)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE22	6	0.34
(1,207)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE22	6	0.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1618)	1:A:43:THR:H	1:A:40:ASP:OD1	14	0.34
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:ILE:HG12	2	0.34
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:ILE:HG12	2	0.34
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:ILE:HG12	2	0.34
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:ILE:HG12	7	0.34
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:ILE:HG12	7	0.34
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:ILE:HG12	7	0.34
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:ILE:HG12	26	0.34
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:ILE:HG12	26	0.34
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:ILE:HG12	26	0.34
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:ILE:HG12	29	0.34
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:ILE:HG12	29	0.34
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:ILE:HG12	29	0.34
(1,1496)	1:A:82:ARG:H	1:A:69:VAL:HG21	1	0.34
(1,1496)	1:A:82:ARG:H	1:A:69:VAL:HG22	1	0.34
(1,1496)	1:A:82:ARG:H	1:A:69:VAL:HG23	1	0.34
(1,1382)	1:A:16:THR:HG21	1:A:20:SER:HB2	5	0.34
(1,1382)	1:A:16:THR:HG21	1:A:20:SER:HB3	5	0.34
(1,1382)	1:A:16:THR:HG22	1:A:20:SER:HB2	5	0.34
(1,1382)	1:A:16:THR:HG22	1:A:20:SER:HB3	5	0.34
(1,1382)	1:A:16:THR:HG23	1:A:20:SER:HB2	5	0.34
(1,1382)	1:A:16:THR:HG23	1:A:20:SER:HB3	5	0.34
(1,1366)	1:A:89:VAL:HA	1:A:63:PRO:HG3	29	0.34
(1,1093)	1:A:39:GLU:H	1:A:39:GLU:HB3	7	0.34
(1,920)	1:A:62:GLY:HA2	1:A:63:PRO:HD2	26	0.33
(1,661)	1:A:110:LYS:HB3	1:A:110:LYS:HG2	26	0.33
(1,661)	1:A:110:LYS:HB3	1:A:110:LYS:HG2	27	0.33
(1,574)	1:A:61:GLU:HB2	1:A:61:GLU:HA	2	0.33
(1,574)	1:A:61:GLU:HB2	1:A:61:GLU:HA	17	0.33
(1,521)	1:A:106:LYS:HB2	1:A:103:ARG:HA	13	0.33
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG21	15	0.33
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG22	15	0.33
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG23	15	0.33
(1,246)	1:A:84:GLU:HG3	1:A:84:GLU:HA	2	0.33
(1,1618)	1:A:43:THR:H	1:A:40:ASP:OD1	25	0.33
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:ILE:HG12	6	0.33
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:ILE:HG12	6	0.33
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:ILE:HG12	6	0.33
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:ILE:HG12	9	0.33
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:ILE:HG12	9	0.33
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:ILE:HG12	9	0.33
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:ILE:HG12	15	0.33

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:ILE:HG12	15	0.33
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:ILE:HG12	15	0.33
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:ILE:HG12	23	0.33
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:ILE:HG12	23	0.33
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:ILE:HG12	23	0.33
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:ILE:HG12	27	0.33
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:ILE:HG12	27	0.33
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:ILE:HG12	27	0.33
(1,1587)	1:A:36:GLU:HB3	1:A:38:PRO:HD2	18	0.33
(1,1587)	1:A:31:LYS:HA	1:A:36:GLU:HB3	18	0.33
(1,1533)	1:A:9:GLU:HA	1:A:12:GLN:HG2	9	0.33
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE21	6	0.33
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE21	6	0.33
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE21	6	0.33
(1,927)	1:A:27:ASP:H	1:A:27:ASP:HB3	3	0.32
(1,927)	1:A:27:ASP:H	1:A:27:ASP:HB3	11	0.32
(1,927)	1:A:27:ASP:H	1:A:27:ASP:HB3	15	0.32
(1,920)	1:A:62:GLY:HA2	1:A:63:PRO:HD2	9	0.32
(1,920)	1:A:62:GLY:HA2	1:A:63:PRO:HD2	16	0.32
(1,76)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	27	0.32
(1,76)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	27	0.32
(1,76)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	27	0.32
(1,76)	1:A:113:LEU:HD11	1:A:117:LYS:HE2	27	0.32
(1,76)	1:A:113:LEU:HD12	1:A:117:LYS:HE2	27	0.32
(1,76)	1:A:113:LEU:HD13	1:A:117:LYS:HE2	27	0.32
(1,69)	1:A:30:GLU:HG2	1:A:30:GLU:HA	19	0.32
(1,655)	1:A:31:LYS:H	1:A:30:GLU:HB2	22	0.32
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD1	29	0.32
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD2	29	0.32
(1,169)	1:A:3:PHE:H	1:A:2:GLU:HB2	24	0.32
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:ILE:HG12	11	0.32
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:ILE:HG12	11	0.32
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:ILE:HG12	11	0.32
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:ILE:HG12	12	0.32
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:ILE:HG12	12	0.32
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:ILE:HG12	12	0.32
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:ILE:HG12	16	0.32
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:ILE:HG12	16	0.32
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:ILE:HG12	16	0.32
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:ILE:HG12	18	0.32
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:ILE:HG12	18	0.32
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:ILE:HG12	18	0.32

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:ILE:HG12	21	0.32
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:ILE:HG12	21	0.32
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:ILE:HG12	21	0.32
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:ILE:HG12	24	0.32
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:ILE:HG12	24	0.32
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:ILE:HG12	24	0.32
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:ILE:HG12	30	0.32
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:ILE:HG12	30	0.32
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:ILE:HG12	30	0.32
(1,1463)	1:A:38:PRO:HD2	1:A:31:LYS:HD3	3	0.32
(1,1447)	1:A:16:THR:HG21	1:A:17:GLU:HA	6	0.32
(1,1447)	1:A:16:THR:HG22	1:A:17:GLU:HA	6	0.32
(1,1447)	1:A:16:THR:HG23	1:A:17:GLU:HA	6	0.32
(1,1154)	1:A:31:LYS:HA	1:A:31:LYS:HG2	27	0.32
(1,927)	1:A:27:ASP:H	1:A:27:ASP:HB3	8	0.31
(1,927)	1:A:27:ASP:H	1:A:27:ASP:HB3	14	0.31
(1,655)	1:A:31:LYS:H	1:A:30:GLU:HB2	9	0.31
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG21	25	0.31
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG22	25	0.31
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG23	25	0.31
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:ILE:HG12	1	0.31
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:ILE:HG12	1	0.31
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:ILE:HG12	1	0.31
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:ILE:HG12	3	0.31
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:ILE:HG12	3	0.31
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:ILE:HG12	3	0.31
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:ILE:HG12	14	0.31
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:ILE:HG12	14	0.31
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:ILE:HG12	14	0.31
(1,1366)	1:A:89:VAL:HA	1:A:63:PRO:HG3	20	0.31
(1,1154)	1:A:31:LYS:HA	1:A:31:LYS:HG2	28	0.31
(1,997)	1:A:12:GLN:HA	1:A:12:GLN:HG3	29	0.3
(1,99)	1:A:84:GLU:HB2	1:A:81:VAL:HA	15	0.3
(1,99)	1:A:84:GLU:HB3	1:A:81:VAL:HA	15	0.3
(1,969)	1:A:48:LYS:HA	1:A:48:LYS:HG2	15	0.3
(1,969)	1:A:48:LYS:HA	1:A:48:LYS:HG3	15	0.3
(1,927)	1:A:27:ASP:H	1:A:27:ASP:HB3	7	0.3
(1,927)	1:A:27:ASP:H	1:A:27:ASP:HB3	16	0.3
(1,920)	1:A:62:GLY:HA2	1:A:63:PRO:HD2	1	0.3
(1,660)	1:A:44:MET:HE1	1:A:39:GLU:HG2	7	0.3
(1,660)	1:A:44:MET:HE2	1:A:39:GLU:HG2	7	0.3
(1,660)	1:A:44:MET:HE3	1:A:39:GLU:HG2	7	0.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,660)	1:A:44:MET:HE1	1:A:39:GLU:HG3	7	0.3
(1,660)	1:A:44:MET:HE2	1:A:39:GLU:HG3	7	0.3
(1,660)	1:A:44:MET:HE3	1:A:39:GLU:HG3	7	0.3
(1,226)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	25	0.3
(1,226)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	25	0.3
(1,226)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	25	0.3
(1,207)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE22	1	0.3
(1,207)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE22	1	0.3
(1,207)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE22	1	0.3
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:ILE:HG12	8	0.3
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:ILE:HG12	8	0.3
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:ILE:HG12	8	0.3
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:ILE:HG12	13	0.3
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:ILE:HG12	13	0.3
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:ILE:HG12	13	0.3
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:ILE:HG12	25	0.3
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:ILE:HG12	25	0.3
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:ILE:HG12	25	0.3
(1,1376)	1:A:50:VAL:HG11	1:A:54:MET:HG3	18	0.3
(1,1376)	1:A:50:VAL:HG12	1:A:54:MET:HG3	18	0.3
(1,1376)	1:A:50:VAL:HG13	1:A:54:MET:HG3	18	0.3
(1,1376)	1:A:50:VAL:HG11	1:A:14:TYR:HB2	18	0.3
(1,1376)	1:A:50:VAL:HG11	1:A:14:TYR:HB3	18	0.3
(1,1376)	1:A:50:VAL:HG12	1:A:14:TYR:HB2	18	0.3
(1,1376)	1:A:50:VAL:HG12	1:A:14:TYR:HB3	18	0.3
(1,1376)	1:A:50:VAL:HG13	1:A:14:TYR:HB2	18	0.3
(1,1376)	1:A:50:VAL:HG13	1:A:14:TYR:HB3	18	0.3
(1,1233)	1:A:14:TYR:HD1	1:A:54:MET:HG3	20	0.3
(1,1233)	1:A:14:TYR:HD2	1:A:54:MET:HG3	20	0.3
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG11	5	0.3
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG12	5	0.3
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG13	5	0.3
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG11	20	0.3
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG12	20	0.3
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG13	20	0.3
(1,927)	1:A:27:ASP:H	1:A:27:ASP:HB3	21	0.29
(1,823)	1:A:110:LYS:HG2	1:A:110:LYS:HE2	14	0.29
(1,823)	1:A:110:LYS:HG2	1:A:110:LYS:HE3	14	0.29
(1,729)	1:A:91:LYS:H	1:A:91:LYS:HG3	1	0.29
(1,69)	1:A:30:GLU:HG2	1:A:30:GLU:HA	9	0.29
(1,407)	1:A:76:ARG:HA	1:A:76:ARG:HG3	1	0.29
(1,207)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE22	15	0.29

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,207)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE22	15	0.29
(1,207)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE22	15	0.29
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:ILE:HG12	10	0.29
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:ILE:HG12	10	0.29
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:ILE:HG12	10	0.29
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:ILE:HG12	17	0.29
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:ILE:HG12	17	0.29
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:ILE:HG12	17	0.29
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG21	1:A:24:ILE:HG12	22	0.29
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG22	1:A:24:ILE:HG12	22	0.29
(1,1602)	1:A:19:VAL:HG23	1:A:24:ILE:HG12	22	0.29
(1,1408)	1:A:16:THR:HG21	1:A:19:VAL:HB	26	0.29
(1,1408)	1:A:16:THR:HG22	1:A:19:VAL:HB	26	0.29
(1,1408)	1:A:16:THR:HG23	1:A:19:VAL:HB	26	0.29
(1,1408)	1:A:16:THR:HG21	1:A:17:GLU:HG3	26	0.29
(1,1408)	1:A:16:THR:HG22	1:A:17:GLU:HG3	26	0.29
(1,1408)	1:A:16:THR:HG23	1:A:17:GLU:HG3	26	0.29
(1,1408)	1:A:16:THR:HG21	1:A:19:VAL:HB	27	0.29
(1,1408)	1:A:16:THR:HG22	1:A:19:VAL:HB	27	0.29
(1,1408)	1:A:16:THR:HG23	1:A:19:VAL:HB	27	0.29
(1,1408)	1:A:16:THR:HG21	1:A:17:GLU:HG3	27	0.29
(1,1408)	1:A:16:THR:HG22	1:A:17:GLU:HG3	27	0.29
(1,1408)	1:A:16:THR:HG23	1:A:17:GLU:HG3	27	0.29
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG11	4	0.29
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG12	4	0.29
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG13	4	0.29
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG11	21	0.29
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG12	21	0.29
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG13	21	0.29
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG11	23	0.29
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG12	23	0.29
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG13	23	0.29
(1,1154)	1:A:31:LYS:HA	1:A:31:LYS:HG2	24	0.29
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:5:VAL:H	1	0.29
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:5:VAL:H	1	0.29
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:5:VAL:H	1	0.29
(1,194)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:6:SER:HB2	2	0.28
(1,194)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:6:SER:HB2	2	0.28
(1,1587)	1:A:36:GLU:HB3	1:A:38:PRO:HD2	8	0.28
(1,1587)	1:A:31:LYS:HA	1:A:36:GLU:HB3	8	0.28
(1,1587)	1:A:36:GLU:HB3	1:A:38:PRO:HD2	13	0.28
(1,1587)	1:A:31:LYS:HA	1:A:36:GLU:HB3	13	0.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1553)	1:A:8:THR:HA	1:A:120:ILE:HD11	20	0.28
(1,1553)	1:A:8:THR:HA	1:A:120:ILE:HD12	20	0.28
(1,1553)	1:A:8:THR:HA	1:A:120:ILE:HD13	20	0.28
(1,1447)	1:A:16:THR:HG21	1:A:17:GLU:HA	12	0.28
(1,1447)	1:A:16:THR:HG22	1:A:17:GLU:HA	12	0.28
(1,1447)	1:A:16:THR:HG23	1:A:17:GLU:HA	12	0.28
(1,1366)	1:A:89:VAL:HA	1:A:63:PRO:HG3	11	0.28
(1,937)	1:A:123:ASP:H	1:A:123:ASP:HB3	28	0.27
(1,937)	1:A:123:ASP:H	1:A:123:ASP:HB3	30	0.27
(1,729)	1:A:91:LYS:H	1:A:91:LYS:HG3	23	0.27
(1,70)	1:A:18:CYS:HA	1:A:21:SER:HB2	6	0.27
(1,70)	1:A:18:CYS:HA	1:A:21:SER:HB3	6	0.27
(1,521)	1:A:106:LYS:HB2	1:A:103:ARG:HA	16	0.27
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG21	11	0.27
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG22	11	0.27
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG23	11	0.27
(1,471)	1:A:13:ARG:H	1:A:13:ARG:HB3	1	0.27
(1,449)	1:A:4:THR:HA	1:A:4:THR:HG21	28	0.27
(1,449)	1:A:4:THR:HA	1:A:4:THR:HG22	28	0.27
(1,449)	1:A:4:THR:HA	1:A:4:THR:HG23	28	0.27
(1,412)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HG3	13	0.27
(1,207)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE22	4	0.27
(1,207)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE22	4	0.27
(1,207)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE22	4	0.27
(1,1587)	1:A:36:GLU:HB3	1:A:38:PRO:HD2	23	0.27
(1,1587)	1:A:31:LYS:HA	1:A:36:GLU:HB3	23	0.27
(1,1447)	1:A:16:THR:HG21	1:A:17:GLU:HA	16	0.27
(1,1447)	1:A:16:THR:HG22	1:A:17:GLU:HA	16	0.27
(1,1447)	1:A:16:THR:HG23	1:A:17:GLU:HA	16	0.27
(1,1408)	1:A:16:THR:HG21	1:A:19:VAL:HB	13	0.27
(1,1408)	1:A:16:THR:HG22	1:A:19:VAL:HB	13	0.27
(1,1408)	1:A:16:THR:HG23	1:A:19:VAL:HB	13	0.27
(1,1408)	1:A:16:THR:HG21	1:A:17:GLU:HG3	13	0.27
(1,1408)	1:A:16:THR:HG22	1:A:17:GLU:HG3	13	0.27
(1,1408)	1:A:16:THR:HG23	1:A:17:GLU:HG3	13	0.27
(1,1393)	1:A:38:PRO:HD2	1:A:31:LYS:HD2	26	0.27
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG11	29	0.27
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG12	29	0.27
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG13	29	0.27
(1,521)	1:A:106:LYS:HB2	1:A:103:ARG:HA	24	0.26
(1,412)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HG3	1	0.26
(1,412)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HG3	2	0.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,412)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HG3	3	0.26
(1,412)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HG3	4	0.26
(1,412)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HG3	5	0.26
(1,412)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HG3	6	0.26
(1,412)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HG3	7	0.26
(1,412)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HG3	8	0.26
(1,412)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HG3	9	0.26
(1,412)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HG3	10	0.26
(1,412)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HG3	11	0.26
(1,412)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HG3	12	0.26
(1,412)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HG3	14	0.26
(1,412)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HG3	16	0.26
(1,412)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HG3	17	0.26
(1,412)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HG3	18	0.26
(1,412)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HG3	20	0.26
(1,412)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HG3	21	0.26
(1,412)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HG3	22	0.26
(1,412)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HG3	23	0.26
(1,412)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HG3	24	0.26
(1,412)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HG3	25	0.26
(1,412)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HG3	29	0.26
(1,412)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HG3	30	0.26
(1,407)	1:A:76:ARG:HA	1:A:76:ARG:HG3	4	0.26
(1,1618)	1:A:43:THR:H	1:A:40:ASP:OD1	9	0.26
(1,1618)	1:A:43:THR:H	1:A:40:ASP:OD1	22	0.26
(1,997)	1:A:12:GLN:HA	1:A:12:GLN:HG3	18	0.25
(1,920)	1:A:62:GLY:HA2	1:A:63:PRO:HD2	30	0.25
(1,82)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:64:LEU:HD21	14	0.25
(1,82)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:64:LEU:HD22	14	0.25
(1,82)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:64:LEU:HD23	14	0.25
(1,69)	1:A:30:GLU:HG2	1:A:30:GLU:HA	22	0.25
(1,655)	1:A:31:LYS:H	1:A:30:GLU:HB2	19	0.25
(1,471)	1:A:13:ARG:H	1:A:13:ARG:HB3	8	0.25
(1,471)	1:A:13:ARG:H	1:A:13:ARG:HB3	25	0.25
(1,412)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HG3	26	0.25
(1,412)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HG3	27	0.25
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD1	10	0.25
(1,393)	1:A:63:PRO:HD2	1:A:57:PHE:HD2	10	0.25
(1,226)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	27	0.25
(1,226)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	27	0.25
(1,226)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	27	0.25
(1,1482)	1:A:48:LYS:H	1:A:48:LYS:HG2	20	0.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1482)	1:A:48:LYS:H	1:A:48:LYS:HG3	20	0.25
(1,1463)	1:A:38:PRO:HD2	1:A:31:LYS:HD3	11	0.25
(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH11	17	0.25
(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH12	17	0.25
(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH21	17	0.25
(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH22	17	0.25
(1,1366)	1:A:89:VAL:HA	1:A:63:PRO:HG3	10	0.25
(1,1366)	1:A:89:VAL:HA	1:A:63:PRO:HG3	16	0.25
(1,1201)	1:A:50:VAL:H	1:A:50:VAL:HG21	28	0.25
(1,1201)	1:A:50:VAL:H	1:A:50:VAL:HG22	28	0.25
(1,1201)	1:A:50:VAL:H	1:A:50:VAL:HG23	28	0.25
(1,1126)	1:A:5:VAL:H	1:A:4:THR:HG21	16	0.25
(1,1126)	1:A:5:VAL:H	1:A:4:THR:HG22	16	0.25
(1,1126)	1:A:5:VAL:H	1:A:4:THR:HG23	16	0.25
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE21	28	0.25
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE21	28	0.25
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE21	28	0.25
(1,997)	1:A:12:GLN:HA	1:A:12:GLN:HG3	21	0.24
(1,541)	1:A:33:LYS:HA	1:A:33:LYS:HG2	20	0.24
(1,449)	1:A:4:THR:HA	1:A:4:THR:HG21	23	0.24
(1,449)	1:A:4:THR:HA	1:A:4:THR:HG22	23	0.24
(1,449)	1:A:4:THR:HA	1:A:4:THR:HG23	23	0.24
(1,412)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HG3	28	0.24
(1,166)	1:A:2:GLU:HA	1:A:2:GLU:HG2	15	0.24
(1,166)	1:A:2:GLU:HA	1:A:2:GLU:HG3	15	0.24
(1,1618)	1:A:43:THR:H	1:A:40:ASP:OD1	4	0.24
(1,1564)	1:A:103:ARG:HD2	1:A:103:ARG:HH11	21	0.24
(1,1564)	1:A:103:ARG:HD2	1:A:103:ARG:HH12	21	0.24
(1,1564)	1:A:103:ARG:HD2	1:A:103:ARG:HH21	21	0.24
(1,1564)	1:A:103:ARG:HD2	1:A:103:ARG:HH22	21	0.24
(1,1547)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:38:PRO:HD2	9	0.24
(1,1547)	1:A:31:LYS:HA	1:A:36:GLU:HB2	9	0.24
(1,1533)	1:A:9:GLU:HA	1:A:12:GLN:HG2	25	0.24
(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH11	11	0.24
(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH12	11	0.24
(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH21	11	0.24
(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH22	11	0.24
(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH11	15	0.24
(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH12	15	0.24
(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH21	15	0.24
(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH22	15	0.24
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HD3	27	0.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HD3	27	0.24
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HD3	27	0.24
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HD3	28	0.24
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HD3	28	0.24
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HD3	28	0.24
(1,1126)	1:A:5:VAL:H	1:A:4:THR:HG21	30	0.24
(1,1126)	1:A:5:VAL:H	1:A:4:THR:HG22	30	0.24
(1,1126)	1:A:5:VAL:H	1:A:4:THR:HG23	30	0.24
(1,997)	1:A:12:GLN:HA	1:A:12:GLN:HG3	28	0.23
(1,692)	1:A:95:ASN:HA	1:A:95:ASN:HB3	2	0.23
(1,233)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:36:GLU:HG2	1	0.23
(1,233)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:36:GLU:HG2	2	0.23
(1,233)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:36:GLU:HG2	3	0.23
(1,233)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:36:GLU:HG2	4	0.23
(1,233)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:36:GLU:HG2	6	0.23
(1,233)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:36:GLU:HG2	8	0.23
(1,233)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:36:GLU:HG2	12	0.23
(1,233)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:36:GLU:HG2	14	0.23
(1,233)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:36:GLU:HG2	15	0.23
(1,233)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:36:GLU:HG2	16	0.23
(1,233)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:36:GLU:HG2	17	0.23
(1,233)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:36:GLU:HG2	19	0.23
(1,233)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:36:GLU:HG2	20	0.23
(1,233)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:36:GLU:HG2	22	0.23
(1,233)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:36:GLU:HG2	23	0.23
(1,233)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:36:GLU:HG2	24	0.23
(1,233)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:36:GLU:HG2	26	0.23
(1,233)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:36:GLU:HG2	27	0.23
(1,233)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:36:GLU:HG2	28	0.23
(1,233)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:36:GLU:HG2	29	0.23
(1,233)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:36:GLU:HG2	30	0.23
(1,207)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE22	13	0.23
(1,207)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE22	13	0.23
(1,207)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE22	13	0.23
(1,1564)	1:A:103:ARG:HD2	1:A:103:ARG:HH11	25	0.23
(1,1564)	1:A:103:ARG:HD2	1:A:103:ARG:HH12	25	0.23
(1,1564)	1:A:103:ARG:HD2	1:A:103:ARG:HH21	25	0.23
(1,1564)	1:A:103:ARG:HD2	1:A:103:ARG:HH22	25	0.23
(1,1560)	1:A:66:ASP:HA	1:A:65:VAL:HG11	6	0.23
(1,1560)	1:A:66:ASP:HA	1:A:65:VAL:HG12	6	0.23
(1,1560)	1:A:66:ASP:HA	1:A:65:VAL:HG13	6	0.23
(1,1481)	1:A:87:LYS:HB2	1:A:84:GLU:HA	10	0.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1481)	1:A:87:LYS:HB3	1:A:84:GLU:HA	10	0.23
(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH11	14	0.23
(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH12	14	0.23
(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH21	14	0.23
(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH22	14	0.23
(1,1366)	1:A:89:VAL:HA	1:A:63:PRO:HG3	4	0.23
(1,1366)	1:A:89:VAL:HA	1:A:63:PRO:HG3	26	0.23
(1,121)	1:A:23:ASN:HB3	1:A:23:ASN:HA	1	0.23
(1,121)	1:A:23:ASN:HB3	1:A:23:ASN:HA	3	0.23
(1,121)	1:A:23:ASN:HB3	1:A:23:ASN:HA	12	0.23
(1,121)	1:A:23:ASN:HB3	1:A:23:ASN:HA	14	0.23
(1,121)	1:A:23:ASN:HB3	1:A:23:ASN:HA	18	0.23
(1,121)	1:A:23:ASN:HB3	1:A:23:ASN:HA	19	0.23
(1,121)	1:A:23:ASN:HB3	1:A:23:ASN:HA	20	0.23
(1,1182)	1:A:117:LYS:HG2	1:A:117:LYS:HE3	20	0.23
(1,997)	1:A:12:GLN:HA	1:A:12:GLN:HG3	7	0.22
(1,997)	1:A:12:GLN:HA	1:A:12:GLN:HG3	16	0.22
(1,937)	1:A:123:ASP:H	1:A:123:ASP:HB3	9	0.22
(1,937)	1:A:123:ASP:H	1:A:123:ASP:HB3	10	0.22
(1,82)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:64:LEU:HD21	28	0.22
(1,82)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:64:LEU:HD22	28	0.22
(1,82)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:64:LEU:HD23	28	0.22
(1,692)	1:A:95:ASN:HA	1:A:95:ASN:HB3	4	0.22
(1,692)	1:A:95:ASN:HA	1:A:95:ASN:HB3	9	0.22
(1,692)	1:A:95:ASN:HA	1:A:95:ASN:HB3	14	0.22
(1,541)	1:A:33:LYS:HA	1:A:33:LYS:HG2	3	0.22
(1,521)	1:A:106:LYS:HB2	1:A:103:ARG:HA	23	0.22
(1,407)	1:A:76:ARG:HA	1:A:76:ARG:HG3	9	0.22
(1,1618)	1:A:43:THR:H	1:A:40:ASP:OD1	27	0.22
(1,1417)	1:A:44:MET:HE1	1:A:39:GLU:HG3	7	0.22
(1,1417)	1:A:44:MET:HE2	1:A:39:GLU:HG3	7	0.22
(1,1417)	1:A:44:MET:HE3	1:A:39:GLU:HG3	7	0.22
(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH11	22	0.22
(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH12	22	0.22
(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH21	22	0.22
(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH22	22	0.22
(1,121)	1:A:23:ASN:HB3	1:A:23:ASN:HA	5	0.22
(1,121)	1:A:23:ASN:HB3	1:A:23:ASN:HA	15	0.22
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:5:VAL:H	7	0.22
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:5:VAL:H	7	0.22
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:5:VAL:H	7	0.22
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:5:VAL:H	8	0.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:5:VAL:H	8	0.22
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:5:VAL:H	8	0.22
(1,997)	1:A:12:GLN:HA	1:A:12:GLN:HG3	30	0.21
(1,937)	1:A:123:ASP:H	1:A:123:ASP:HB3	26	0.21
(1,82)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:64:LEU:HD21	27	0.21
(1,82)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:64:LEU:HD22	27	0.21
(1,82)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:64:LEU:HD23	27	0.21
(1,692)	1:A:95:ASN:HA	1:A:95:ASN:HB3	10	0.21
(1,692)	1:A:95:ASN:HA	1:A:95:ASN:HB3	15	0.21
(1,692)	1:A:95:ASN:HA	1:A:95:ASN:HB3	24	0.21
(1,692)	1:A:95:ASN:HA	1:A:95:ASN:HB3	25	0.21
(1,6)	1:A:12:GLN:HA	1:A:15:ARG:HD2	4	0.21
(1,6)	1:A:12:GLN:HA	1:A:15:ARG:HD3	4	0.21
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG21	27	0.21
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG22	27	0.21
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG23	27	0.21
(1,407)	1:A:76:ARG:HA	1:A:76:ARG:HG3	6	0.21
(1,407)	1:A:76:ARG:HA	1:A:76:ARG:HG3	24	0.21
(1,1618)	1:A:43:THR:H	1:A:40:ASP:OD1	28	0.21
(1,1587)	1:A:36:GLU:HB3	1:A:38:PRO:HD2	7	0.21
(1,1587)	1:A:31:LYS:HA	1:A:36:GLU:HB3	7	0.21
(1,1560)	1:A:66:ASP:HA	1:A:65:VAL:HG11	13	0.21
(1,1560)	1:A:66:ASP:HA	1:A:65:VAL:HG12	13	0.21
(1,1560)	1:A:66:ASP:HA	1:A:65:VAL:HG13	13	0.21
(1,1547)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:38:PRO:HD2	4	0.21
(1,1547)	1:A:31:LYS:HA	1:A:36:GLU:HB2	4	0.21
(1,1463)	1:A:38:PRO:HD2	1:A:31:LYS:HD3	16	0.21
(1,1463)	1:A:38:PRO:HD2	1:A:31:LYS:HD3	25	0.21
(1,1382)	1:A:16:THR:HG21	1:A:20:SER:HB2	14	0.21
(1,1382)	1:A:16:THR:HG21	1:A:20:SER:HB3	14	0.21
(1,1382)	1:A:16:THR:HG22	1:A:20:SER:HB2	14	0.21
(1,1382)	1:A:16:THR:HG22	1:A:20:SER:HB3	14	0.21
(1,1382)	1:A:16:THR:HG23	1:A:20:SER:HB2	14	0.21
(1,1382)	1:A:16:THR:HG23	1:A:20:SER:HB3	14	0.21
(1,1367)	1:A:54:MET:HE1	1:A:11:LEU:HD11	14	0.21
(1,1367)	1:A:54:MET:HE1	1:A:11:LEU:HD12	14	0.21
(1,1367)	1:A:54:MET:HE1	1:A:11:LEU:HD13	14	0.21
(1,1367)	1:A:54:MET:HE2	1:A:11:LEU:HD11	14	0.21
(1,1367)	1:A:54:MET:HE2	1:A:11:LEU:HD12	14	0.21
(1,1367)	1:A:54:MET:HE2	1:A:11:LEU:HD13	14	0.21
(1,1367)	1:A:54:MET:HE3	1:A:11:LEU:HD11	14	0.21
(1,1367)	1:A:54:MET:HE3	1:A:11:LEU:HD12	14	0.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1367)	1:A:54:MET:HE3	1:A:11:LEU:HD13	14	0.21
(1,1366)	1:A:89:VAL:HA	1:A:63:PRO:HG3	2	0.21
(1,1366)	1:A:89:VAL:HA	1:A:63:PRO:HG3	3	0.21
(1,1366)	1:A:89:VAL:HA	1:A:63:PRO:HG3	15	0.21
(1,1366)	1:A:89:VAL:HA	1:A:63:PRO:HG3	24	0.21
(1,1366)	1:A:89:VAL:HA	1:A:63:PRO:HG3	27	0.21
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:5:VAL:H	6	0.21
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:5:VAL:H	6	0.21
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:5:VAL:H	6	0.21
(1,76)	1:A:113:LEU:HD21	1:A:117:LYS:HE2	3	0.2
(1,76)	1:A:113:LEU:HD22	1:A:117:LYS:HE2	3	0.2
(1,76)	1:A:113:LEU:HD23	1:A:117:LYS:HE2	3	0.2
(1,76)	1:A:113:LEU:HD11	1:A:117:LYS:HE2	3	0.2
(1,76)	1:A:113:LEU:HD12	1:A:117:LYS:HE2	3	0.2
(1,76)	1:A:113:LEU:HD13	1:A:117:LYS:HE2	3	0.2
(1,692)	1:A:95:ASN:HA	1:A:95:ASN:HB3	18	0.2
(1,407)	1:A:76:ARG:HA	1:A:76:ARG:HG3	5	0.2
(1,407)	1:A:76:ARG:HA	1:A:76:ARG:HG3	19	0.2
(1,18)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HA	24	0.2
(1,1618)	1:A:43:THR:H	1:A:40:ASP:OD1	26	0.2
(1,1563)	1:A:89:VAL:H	1:A:85:VAL:HG11	10	0.2
(1,1563)	1:A:89:VAL:H	1:A:85:VAL:HG12	10	0.2
(1,1563)	1:A:89:VAL:H	1:A:85:VAL:HG13	10	0.2
(1,145)	1:A:95:ASN:HA	1:A:92:ASN:HD22	7	0.2
(1,1391)	1:A:81:VAL:HG21	1:A:78:ALA:HA	23	0.2
(1,1391)	1:A:81:VAL:HG22	1:A:78:ALA:HA	23	0.2
(1,1391)	1:A:81:VAL:HG23	1:A:78:ALA:HA	23	0.2
(1,1366)	1:A:89:VAL:HA	1:A:63:PRO:HG3	28	0.2
(1,1182)	1:A:117:LYS:HG2	1:A:117:LYS:HE3	2	0.2
(1,1182)	1:A:117:LYS:HG2	1:A:117:LYS:HE3	10	0.2
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG11	12	0.2
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG12	12	0.2
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG13	12	0.2
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG11	13	0.2
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG12	13	0.2
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG13	13	0.2
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG11	15	0.2
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG12	15	0.2
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG13	15	0.2
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:5:VAL:H	10	0.2
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:5:VAL:H	10	0.2
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:5:VAL:H	10	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:5:VAL:H	11	0.2
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:5:VAL:H	11	0.2
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:5:VAL:H	11	0.2
(1,105)	1:A:81:VAL:HA	1:A:84:GLU:HG2	30	0.2
(1,997)	1:A:12:GLN:HA	1:A:12:GLN:HG3	17	0.19
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG21	21	0.19
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG22	21	0.19
(1,509)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:93:THR:HG23	21	0.19
(1,407)	1:A:76:ARG:HA	1:A:76:ARG:HG3	28	0.19
(1,352)	1:A:123:ASP:H	1:A:123:ASP:HB2	17	0.19
(1,18)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HA	1	0.19
(1,18)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HA	7	0.19
(1,18)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HA	8	0.19
(1,18)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HA	10	0.19
(1,18)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HA	13	0.19
(1,18)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HA	16	0.19
(1,18)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HA	17	0.19
(1,18)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HA	18	0.19
(1,18)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HA	19	0.19
(1,18)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HA	20	0.19
(1,18)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HA	21	0.19
(1,18)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HA	23	0.19
(1,18)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HA	25	0.19
(1,18)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HA	27	0.19
(1,18)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HA	28	0.19
(1,18)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HA	29	0.19
(1,18)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HA	30	0.19
(1,1618)	1:A:43:THR:H	1:A:40:ASP:OD1	18	0.19
(1,1587)	1:A:36:GLU:HB3	1:A:38:PRO:HD2	6	0.19
(1,1587)	1:A:31:LYS:HA	1:A:36:GLU:HB3	6	0.19
(1,1564)	1:A:103:ARG:HD2	1:A:103:ARG:HH11	27	0.19
(1,1564)	1:A:103:ARG:HD2	1:A:103:ARG:HH12	27	0.19
(1,1564)	1:A:103:ARG:HD2	1:A:103:ARG:HH21	27	0.19
(1,1564)	1:A:103:ARG:HD2	1:A:103:ARG:HH22	27	0.19
(1,1463)	1:A:38:PRO:HD2	1:A:31:LYS:HD3	1	0.19
(1,1463)	1:A:38:PRO:HD2	1:A:31:LYS:HD3	19	0.19
(1,1366)	1:A:89:VAL:HA	1:A:63:PRO:HG3	25	0.19
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HD3	5	0.19
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HD3	5	0.19
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HD3	5	0.19
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD21	16	0.19
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD22	16	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD23	16	0.19
(1,1182)	1:A:117:LYS:HG2	1:A:117:LYS:HE3	4	0.19
(1,1182)	1:A:117:LYS:HG2	1:A:117:LYS:HE3	29	0.19
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG11	3	0.19
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG12	3	0.19
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG13	3	0.19
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:5:VAL:H	12	0.19
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:5:VAL:H	12	0.19
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:5:VAL:H	12	0.19
(1,997)	1:A:12:GLN:HA	1:A:12:GLN:HG3	10	0.18
(1,920)	1:A:62:GLY:HA2	1:A:63:PRO:HD2	22	0.18
(1,407)	1:A:76:ARG:HA	1:A:76:ARG:HG3	22	0.18
(1,315)	1:A:36:GLU:HG3	1:A:36:GLU:HA	13	0.18
(1,194)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:6:SER:HB2	30	0.18
(1,194)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:6:SER:HB2	30	0.18
(1,1607)	1:A:11:LEU:HD21	1:A:8:THR:HA	20	0.18
(1,1607)	1:A:11:LEU:HD22	1:A:8:THR:HA	20	0.18
(1,1607)	1:A:11:LEU:HD23	1:A:8:THR:HA	20	0.18
(1,1607)	1:A:8:THR:HA	1:A:120:ILE:HD11	20	0.18
(1,1607)	1:A:8:THR:HA	1:A:120:ILE:HD12	20	0.18
(1,1607)	1:A:8:THR:HA	1:A:120:ILE:HD13	20	0.18
(1,1587)	1:A:36:GLU:HB3	1:A:38:PRO:HD2	15	0.18
(1,1587)	1:A:31:LYS:HA	1:A:36:GLU:HB3	15	0.18
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB2	1:A:51:PHE:HB2	18	0.18
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB2	1:A:51:PHE:HB3	18	0.18
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB3	1:A:51:PHE:HB2	18	0.18
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB3	1:A:51:PHE:HB3	18	0.18
(1,1533)	1:A:9:GLU:HA	1:A:12:GLN:HG2	26	0.18
(1,1483)	1:A:111:ASN:HD22	1:A:110:LYS:HE2	9	0.18
(1,1483)	1:A:111:ASN:HD22	1:A:110:LYS:HE3	9	0.18
(1,1463)	1:A:38:PRO:HD2	1:A:31:LYS:HD3	10	0.18
(1,1367)	1:A:54:MET:HE1	1:A:11:LEU:HD11	25	0.18
(1,1367)	1:A:54:MET:HE1	1:A:11:LEU:HD12	25	0.18
(1,1367)	1:A:54:MET:HE1	1:A:11:LEU:HD13	25	0.18
(1,1367)	1:A:54:MET:HE2	1:A:11:LEU:HD11	25	0.18
(1,1367)	1:A:54:MET:HE2	1:A:11:LEU:HD12	25	0.18
(1,1367)	1:A:54:MET:HE2	1:A:11:LEU:HD13	25	0.18
(1,1367)	1:A:54:MET:HE3	1:A:11:LEU:HD11	25	0.18
(1,1367)	1:A:54:MET:HE3	1:A:11:LEU:HD12	25	0.18
(1,1367)	1:A:54:MET:HE3	1:A:11:LEU:HD13	25	0.18
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HD3	11	0.18
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HD3	11	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HD3	11	0.18
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HD3	14	0.18
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HD3	14	0.18
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HD3	14	0.18
(1,1182)	1:A:117:LYS:HG2	1:A:117:LYS:HE3	24	0.18
(1,1126)	1:A:5:VAL:H	1:A:4:THR:HG21	2	0.18
(1,1126)	1:A:5:VAL:H	1:A:4:THR:HG22	2	0.18
(1,1126)	1:A:5:VAL:H	1:A:4:THR:HG23	2	0.18
(1,1076)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:71:GLN:HE22	17	0.18
(1,1076)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:71:GLN:HE22	17	0.18
(1,1076)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:71:GLN:HE22	17	0.18
(1,991)	1:A:3:PHE:H	1:A:2:GLU:HA	14	0.17
(1,920)	1:A:62:GLY:HA2	1:A:63:PRO:HD2	17	0.17
(1,897)	1:A:84:GLU:H	1:A:83:THR:HG21	25	0.17
(1,897)	1:A:84:GLU:H	1:A:83:THR:HG22	25	0.17
(1,897)	1:A:84:GLU:H	1:A:83:THR:HG23	25	0.17
(1,548)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:61:GLU:HG3	1	0.17
(1,548)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:61:GLU:HG3	2	0.17
(1,548)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:61:GLU:HG3	3	0.17
(1,548)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:61:GLU:HG3	4	0.17
(1,548)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:61:GLU:HG3	5	0.17
(1,548)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:61:GLU:HG3	7	0.17
(1,548)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:61:GLU:HG3	8	0.17
(1,548)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:61:GLU:HG3	9	0.17
(1,548)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:61:GLU:HG3	10	0.17
(1,548)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:61:GLU:HG3	11	0.17
(1,548)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:61:GLU:HG3	12	0.17
(1,548)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:61:GLU:HG3	13	0.17
(1,548)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:61:GLU:HG3	14	0.17
(1,548)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:61:GLU:HG3	15	0.17
(1,548)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:61:GLU:HG3	16	0.17
(1,548)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:61:GLU:HG3	17	0.17
(1,548)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:61:GLU:HG3	18	0.17
(1,548)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:61:GLU:HG3	19	0.17
(1,548)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:61:GLU:HG3	20	0.17
(1,548)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:61:GLU:HG3	21	0.17
(1,548)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:61:GLU:HG3	24	0.17
(1,548)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:61:GLU:HG3	26	0.17
(1,548)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:61:GLU:HG3	27	0.17
(1,548)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:61:GLU:HG3	28	0.17
(1,548)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:61:GLU:HG3	29	0.17
(1,548)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:61:GLU:HG3	30	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,433)	1:A:62:GLY:HA2	1:A:63:PRO:HD3	9	0.17
(1,352)	1:A:123:ASP:H	1:A:123:ASP:HB2	16	0.17
(1,295)	1:A:80:GLU:HA	1:A:80:GLU:HG3	2	0.17
(1,295)	1:A:80:GLU:HA	1:A:80:GLU:HG3	28	0.17
(1,287)	1:A:84:GLU:H	1:A:84:GLU:HG3	2	0.17
(1,287)	1:A:84:GLU:H	1:A:84:GLU:HG3	30	0.17
(1,18)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HA	2	0.17
(1,18)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HA	3	0.17
(1,18)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HA	4	0.17
(1,18)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HA	5	0.17
(1,18)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HA	6	0.17
(1,18)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HA	9	0.17
(1,18)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HA	11	0.17
(1,18)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HA	12	0.17
(1,18)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HA	14	0.17
(1,18)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HA	15	0.17
(1,18)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HA	22	0.17
(1,169)	1:A:3:PHE:H	1:A:2:GLU:HB2	8	0.17
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB2	1:A:51:PHE:HB2	20	0.17
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB2	1:A:51:PHE:HB3	20	0.17
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB3	1:A:51:PHE:HB2	20	0.17
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB3	1:A:51:PHE:HB3	20	0.17
(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH11	29	0.17
(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH12	29	0.17
(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH21	29	0.17
(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH22	29	0.17
(1,1366)	1:A:89:VAL:HA	1:A:63:PRO:HG3	12	0.17
(1,1366)	1:A:89:VAL:HA	1:A:63:PRO:HG3	13	0.17
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HD3	19	0.17
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HD3	19	0.17
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HD3	19	0.17
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD21	26	0.17
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD22	26	0.17
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD23	26	0.17
(1,1182)	1:A:117:LYS:HG2	1:A:117:LYS:HE3	21	0.17
(1,1182)	1:A:117:LYS:HG2	1:A:117:LYS:HE3	30	0.17
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG11	18	0.17
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG12	18	0.17
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG13	18	0.17
(1,1126)	1:A:5:VAL:H	1:A:4:THR:HG21	1	0.17
(1,1126)	1:A:5:VAL:H	1:A:4:THR:HG22	1	0.17
(1,1126)	1:A:5:VAL:H	1:A:4:THR:HG23	1	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:5:VAL:H	22	0.17
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:5:VAL:H	22	0.17
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:5:VAL:H	22	0.17
(1,105)	1:A:81:VAL:HA	1:A:84:GLU:HG2	11	0.17
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG11	1:A:71:GLN:HE21	4	0.17
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG12	1:A:71:GLN:HE21	4	0.17
(1,1039)	1:A:5:VAL:HG13	1:A:71:GLN:HE21	4	0.17
(1,885)	1:A:28:TYR:H	1:A:28:TYR:HD1	21	0.16
(1,885)	1:A:28:TYR:H	1:A:28:TYR:HD2	21	0.16
(1,87)	1:A:69:VAL:HA	1:A:69:VAL:HG11	1	0.16
(1,87)	1:A:69:VAL:HA	1:A:69:VAL:HG12	1	0.16
(1,87)	1:A:69:VAL:HA	1:A:69:VAL:HG13	1	0.16
(1,87)	1:A:69:VAL:HA	1:A:69:VAL:HG21	1	0.16
(1,87)	1:A:69:VAL:HA	1:A:69:VAL:HG22	1	0.16
(1,87)	1:A:69:VAL:HA	1:A:69:VAL:HG23	1	0.16
(1,59)	1:A:101:ALA:HB1	1:A:48:LYS:HG2	20	0.16
(1,59)	1:A:101:ALA:HB1	1:A:48:LYS:HG3	20	0.16
(1,59)	1:A:101:ALA:HB2	1:A:48:LYS:HG2	20	0.16
(1,59)	1:A:101:ALA:HB2	1:A:48:LYS:HG3	20	0.16
(1,59)	1:A:101:ALA:HB3	1:A:48:LYS:HG2	20	0.16
(1,59)	1:A:101:ALA:HB3	1:A:48:LYS:HG3	20	0.16
(1,565)	1:A:43:THR:HG21	1:A:38:PRO:HD3	19	0.16
(1,565)	1:A:43:THR:HG22	1:A:38:PRO:HD3	19	0.16
(1,565)	1:A:43:THR:HG23	1:A:38:PRO:HD3	19	0.16
(1,548)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:61:GLU:HG3	6	0.16
(1,548)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:61:GLU:HG3	22	0.16
(1,548)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:61:GLU:HG3	23	0.16
(1,548)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:61:GLU:HG3	25	0.16
(1,407)	1:A:76:ARG:HA	1:A:76:ARG:HG3	8	0.16
(1,407)	1:A:76:ARG:HA	1:A:76:ARG:HG3	12	0.16
(1,407)	1:A:76:ARG:HA	1:A:76:ARG:HG3	13	0.16
(1,407)	1:A:76:ARG:HA	1:A:76:ARG:HG3	30	0.16
(1,174)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:91:LYS:HG2	5	0.16
(1,174)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:91:LYS:HG2	12	0.16
(1,174)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:91:LYS:HG2	24	0.16
(1,174)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:91:LYS:HG2	25	0.16
(1,174)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:91:LYS:HG2	26	0.16
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB2	1:A:51:PHE:HB2	28	0.16
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB2	1:A:51:PHE:HB3	28	0.16
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB3	1:A:51:PHE:HB2	28	0.16
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB3	1:A:51:PHE:HB3	28	0.16
(1,1564)	1:A:103:ARG:HD2	1:A:103:ARG:HH11	6	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1564)	1:A:103:ARG:HD2	1:A:103:ARG:HH12	6	0.16
(1,1564)	1:A:103:ARG:HD2	1:A:103:ARG:HH21	6	0.16
(1,1564)	1:A:103:ARG:HD2	1:A:103:ARG:HH22	6	0.16
(1,1533)	1:A:9:GLU:HA	1:A:12:GLN:HG2	5	0.16
(1,1366)	1:A:89:VAL:HA	1:A:63:PRO:HG3	21	0.16
(1,1366)	1:A:89:VAL:HA	1:A:63:PRO:HG3	23	0.16
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HD3	6	0.16
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HD3	6	0.16
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HD3	6	0.16
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HD3	15	0.16
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HD3	15	0.16
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HD3	15	0.16
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG11	17	0.16
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG12	17	0.16
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG13	17	0.16
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:5:VAL:H	13	0.16
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:5:VAL:H	13	0.16
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:5:VAL:H	13	0.16
(1,991)	1:A:3:PHE:H	1:A:2:GLU:HA	24	0.15
(1,521)	1:A:106:LYS:HB2	1:A:103:ARG:HA	20	0.15
(1,512)	1:A:91:LYS:HB2	1:A:91:LYS:HA	1	0.15
(1,407)	1:A:76:ARG:HA	1:A:76:ARG:HG3	16	0.15
(1,407)	1:A:76:ARG:HA	1:A:76:ARG:HG3	26	0.15
(1,352)	1:A:123:ASP:H	1:A:123:ASP:HB2	2	0.15
(1,352)	1:A:123:ASP:H	1:A:123:ASP:HB2	20	0.15
(1,287)	1:A:84:GLU:H	1:A:84:GLU:HG3	9	0.15
(1,18)	1:A:106:LYS:HB3	1:A:106:LYS:HA	26	0.15
(1,174)	1:A:91:LYS:HB3	1:A:91:LYS:HG2	10	0.15
(1,1587)	1:A:36:GLU:HB3	1:A:38:PRO:HD2	19	0.15
(1,1587)	1:A:31:LYS:HA	1:A:36:GLU:HB3	19	0.15
(1,1587)	1:A:36:GLU:HB3	1:A:38:PRO:HD2	21	0.15
(1,1587)	1:A:31:LYS:HA	1:A:36:GLU:HB3	21	0.15
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB2	1:A:51:PHE:HB2	23	0.15
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB2	1:A:51:PHE:HB3	23	0.15
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB3	1:A:51:PHE:HB2	23	0.15
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB3	1:A:51:PHE:HB3	23	0.15
(1,1547)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:38:PRO:HD2	14	0.15
(1,1547)	1:A:31:LYS:HA	1:A:36:GLU:HB2	14	0.15
(1,1463)	1:A:38:PRO:HD2	1:A:31:LYS:HD3	14	0.15
(1,1393)	1:A:38:PRO:HD2	1:A:31:LYS:HD2	29	0.15
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HD3	3	0.15
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HD3	3	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HD3	3	0.15
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HD3	13	0.15
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HD3	13	0.15
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HD3	13	0.15
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HD3	18	0.15
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HD3	18	0.15
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HD3	18	0.15
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG11	7	0.15
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG12	7	0.15
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG13	7	0.15
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:5:VAL:H	14	0.15
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:5:VAL:H	14	0.15
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:5:VAL:H	14	0.15
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:5:VAL:H	18	0.15
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:5:VAL:H	18	0.15
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:5:VAL:H	18	0.15
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:5:VAL:H	21	0.15
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:5:VAL:H	21	0.15
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:5:VAL:H	21	0.15
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:5:VAL:H	29	0.15
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:5:VAL:H	29	0.15
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:5:VAL:H	29	0.15
(1,988)	1:A:12:GLN:H	1:A:12:GLN:HG2	5	0.14
(1,988)	1:A:12:GLN:H	1:A:12:GLN:HG2	24	0.14
(1,920)	1:A:62:GLY:HA2	1:A:63:PRO:HD2	7	0.14
(1,699)	1:A:77:ASP:HB3	1:A:80:GLU:HB2	22	0.14
(1,699)	1:A:77:ASP:HB3	1:A:80:GLU:HB3	22	0.14
(1,565)	1:A:43:THR:HG21	1:A:38:PRO:HD3	16	0.14
(1,565)	1:A:43:THR:HG22	1:A:38:PRO:HD3	16	0.14
(1,565)	1:A:43:THR:HG23	1:A:38:PRO:HD3	16	0.14
(1,407)	1:A:76:ARG:HA	1:A:76:ARG:HG3	18	0.14
(1,194)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:6:SER:HB2	15	0.14
(1,194)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:6:SER:HB2	15	0.14
(1,1561)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:20:SER:HB2	6	0.14
(1,1561)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:20:SER:HB3	6	0.14
(1,1561)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:20:SER:HB2	6	0.14
(1,1561)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:20:SER:HB3	6	0.14
(1,1561)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:20:SER:HB2	6	0.14
(1,1561)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:20:SER:HB3	6	0.14
(1,1547)	1:A:36:GLU:HB2	1:A:38:PRO:HD2	11	0.14
(1,1547)	1:A:31:LYS:HA	1:A:36:GLU:HB2	11	0.14
(1,1533)	1:A:9:GLU:HA	1:A:12:GLN:HG2	14	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1482)	1:A:48:LYS:H	1:A:48:LYS:HG2	4	0.14
(1,1482)	1:A:48:LYS:H	1:A:48:LYS:HG3	4	0.14
(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH11	1	0.14
(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH12	1	0.14
(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH21	1	0.14
(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH22	1	0.14
(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH11	3	0.14
(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH12	3	0.14
(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH21	3	0.14
(1,1413)	1:A:103:ARG:HD3	1:A:103:ARG:HH22	3	0.14
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG11	6	0.14
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG12	6	0.14
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG13	6	0.14
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG11	22	0.14
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG12	22	0.14
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG13	22	0.14
(1,988)	1:A:12:GLN:H	1:A:12:GLN:HG2	3	0.13
(1,433)	1:A:62:GLY:HA2	1:A:63:PRO:HD3	1	0.13
(1,407)	1:A:76:ARG:HA	1:A:76:ARG:HG3	27	0.13
(1,352)	1:A:123:ASP:H	1:A:123:ASP:HB2	25	0.13
(1,1618)	1:A:43:THR:H	1:A:40:ASP:OD1	17	0.13
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB2	1:A:51:PHE:HB2	5	0.13
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB2	1:A:51:PHE:HB3	5	0.13
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB3	1:A:51:PHE:HB2	5	0.13
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB3	1:A:51:PHE:HB3	5	0.13
(1,1482)	1:A:48:LYS:H	1:A:48:LYS:HG2	15	0.13
(1,1482)	1:A:48:LYS:H	1:A:48:LYS:HG3	15	0.13
(1,1447)	1:A:16:THR:HG21	1:A:17:GLU:HA	19	0.13
(1,1447)	1:A:16:THR:HG22	1:A:17:GLU:HA	19	0.13
(1,1447)	1:A:16:THR:HG23	1:A:17:GLU:HA	19	0.13
(1,1382)	1:A:16:THR:HG21	1:A:20:SER:HB2	2	0.13
(1,1382)	1:A:16:THR:HG21	1:A:20:SER:HB3	2	0.13
(1,1382)	1:A:16:THR:HG22	1:A:20:SER:HB2	2	0.13
(1,1382)	1:A:16:THR:HG22	1:A:20:SER:HB3	2	0.13
(1,1382)	1:A:16:THR:HG23	1:A:20:SER:HB2	2	0.13
(1,1382)	1:A:16:THR:HG23	1:A:20:SER:HB3	2	0.13
(1,1367)	1:A:54:MET:HE1	1:A:11:LEU:HD11	10	0.13
(1,1367)	1:A:54:MET:HE1	1:A:11:LEU:HD12	10	0.13
(1,1367)	1:A:54:MET:HE1	1:A:11:LEU:HD13	10	0.13
(1,1367)	1:A:54:MET:HE2	1:A:11:LEU:HD11	10	0.13
(1,1367)	1:A:54:MET:HE2	1:A:11:LEU:HD12	10	0.13
(1,1367)	1:A:54:MET:HE2	1:A:11:LEU:HD13	10	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1367)	1:A:54:MET:HE3	1:A:11:LEU:HD11	10	0.13
(1,1367)	1:A:54:MET:HE3	1:A:11:LEU:HD12	10	0.13
(1,1367)	1:A:54:MET:HE3	1:A:11:LEU:HD13	10	0.13
(1,1366)	1:A:89:VAL:HA	1:A:63:PRO:HG3	14	0.13
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HD3	24	0.13
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HD3	24	0.13
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HD3	24	0.13
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD21	17	0.13
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD22	17	0.13
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD23	17	0.13
(1,1233)	1:A:14:TYR:HD1	1:A:54:MET:HG3	2	0.13
(1,1233)	1:A:14:TYR:HD2	1:A:54:MET:HG3	2	0.13
(1,12)	1:A:22:LEU:H	1:A:21:SER:HB2	6	0.13
(1,12)	1:A:22:LEU:H	1:A:21:SER:HB3	6	0.13
(1,12)	1:A:22:LEU:H	1:A:21:SER:HB2	9	0.13
(1,12)	1:A:22:LEU:H	1:A:21:SER:HB3	9	0.13
(1,1126)	1:A:5:VAL:H	1:A:4:THR:HG21	7	0.13
(1,1126)	1:A:5:VAL:H	1:A:4:THR:HG22	7	0.13
(1,1126)	1:A:5:VAL:H	1:A:4:THR:HG23	7	0.13
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:5:VAL:H	5	0.13
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:5:VAL:H	5	0.13
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:5:VAL:H	5	0.13
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:5:VAL:H	15	0.13
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:5:VAL:H	15	0.13
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:5:VAL:H	15	0.13
(1,1025)	1:A:64:LEU:H	1:A:64:LEU:HD21	12	0.13
(1,1025)	1:A:64:LEU:H	1:A:64:LEU:HD22	12	0.13
(1,1025)	1:A:64:LEU:H	1:A:64:LEU:HD23	12	0.13
(1,988)	1:A:12:GLN:H	1:A:12:GLN:HG2	25	0.12
(1,867)	1:A:103:ARG:HB3	1:A:103:ARG:H	16	0.12
(1,407)	1:A:76:ARG:HA	1:A:76:ARG:HG3	25	0.12
(1,384)	1:A:70:HIS:HB3	1:A:71:GLN:H	19	0.12
(1,289)	1:A:106:LYS:HB2	1:A:107:CYS:H	23	0.12
(1,287)	1:A:84:GLU:H	1:A:84:GLU:HG3	28	0.12
(1,224)	1:A:16:THR:HG21	1:A:17:GLU:H	25	0.12
(1,224)	1:A:16:THR:HG22	1:A:17:GLU:H	25	0.12
(1,224)	1:A:16:THR:HG23	1:A:17:GLU:H	25	0.12
(1,194)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:6:SER:HB2	14	0.12
(1,194)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:6:SER:HB2	14	0.12
(1,169)	1:A:3:PHE:H	1:A:2:GLU:HB2	28	0.12
(1,1618)	1:A:43:THR:H	1:A:40:ASP:OD1	7	0.12
(1,1561)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:20:SER:HB2	29	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1561)	1:A:19:VAL:HG11	1:A:20:SER:HB3	29	0.12
(1,1561)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:20:SER:HB2	29	0.12
(1,1561)	1:A:19:VAL:HG12	1:A:20:SER:HB3	29	0.12
(1,1561)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:20:SER:HB2	29	0.12
(1,1561)	1:A:19:VAL:HG13	1:A:20:SER:HB3	29	0.12
(1,1533)	1:A:9:GLU:HA	1:A:12:GLN:HG2	3	0.12
(1,1515)	1:A:35:TRP:H	1:A:35:TRP:HD1	27	0.12
(1,1447)	1:A:16:THR:HG21	1:A:17:GLU:HA	11	0.12
(1,1447)	1:A:16:THR:HG22	1:A:17:GLU:HA	11	0.12
(1,1447)	1:A:16:THR:HG23	1:A:17:GLU:HA	11	0.12
(1,1366)	1:A:89:VAL:HA	1:A:63:PRO:HG3	8	0.12
(1,1364)	1:A:20:SER:H	1:A:16:THR:HA	24	0.12
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HD3	23	0.12
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HD3	23	0.12
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HD3	23	0.12
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HD3	29	0.12
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HD3	29	0.12
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HD3	29	0.12
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD21	21	0.12
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD22	21	0.12
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD23	21	0.12
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD21	30	0.12
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD22	30	0.12
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD23	30	0.12
(1,1126)	1:A:5:VAL:H	1:A:4:THR:HG21	13	0.12
(1,1126)	1:A:5:VAL:H	1:A:4:THR:HG22	13	0.12
(1,1126)	1:A:5:VAL:H	1:A:4:THR:HG23	13	0.12
(1,1126)	1:A:5:VAL:H	1:A:4:THR:HG21	20	0.12
(1,1126)	1:A:5:VAL:H	1:A:4:THR:HG22	20	0.12
(1,1126)	1:A:5:VAL:H	1:A:4:THR:HG23	20	0.12
(1,1122)	1:A:14:TYR:HD1	1:A:11:LEU:HD11	29	0.12
(1,1122)	1:A:14:TYR:HD1	1:A:11:LEU:HD12	29	0.12
(1,1122)	1:A:14:TYR:HD1	1:A:11:LEU:HD13	29	0.12
(1,1122)	1:A:14:TYR:HD2	1:A:11:LEU:HD11	29	0.12
(1,1122)	1:A:14:TYR:HD2	1:A:11:LEU:HD12	29	0.12
(1,1122)	1:A:14:TYR:HD2	1:A:11:LEU:HD13	29	0.12
(1,1048)	1:A:119:SER:HB2	1:A:119:SER:H	18	0.12
(1,929)	1:A:69:VAL:HA	1:A:69:VAL:HG11	1	0.11
(1,929)	1:A:69:VAL:HA	1:A:69:VAL:HG12	1	0.11
(1,929)	1:A:69:VAL:HA	1:A:69:VAL:HG13	1	0.11
(1,916)	1:A:38:PRO:HB2	1:A:38:PRO:HA	1	0.11
(1,82)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:64:LEU:HD21	23	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,82)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:64:LEU:HD22	23	0.11
(1,82)	1:A:61:GLU:HB3	1:A:64:LEU:HD23	23	0.11
(1,815)	1:A:122:LYS:HB2	1:A:122:LYS:HA	26	0.11
(1,407)	1:A:76:ARG:HA	1:A:76:ARG:HG3	3	0.11
(1,315)	1:A:36:GLU:HG3	1:A:36:GLU:HA	7	0.11
(1,315)	1:A:36:GLU:HG3	1:A:36:GLU:HA	18	0.11
(1,295)	1:A:80:GLU:HA	1:A:80:GLU:HG3	10	0.11
(1,246)	1:A:84:GLU:HG3	1:A:84:GLU:HA	4	0.11
(1,246)	1:A:84:GLU:HG3	1:A:84:GLU:HA	17	0.11
(1,194)	1:A:10:ASP:HB2	1:A:6:SER:HB2	7	0.11
(1,194)	1:A:10:ASP:HB3	1:A:6:SER:HB2	7	0.11
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB2	1:A:51:PHE:HB2	2	0.11
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB2	1:A:51:PHE:HB3	2	0.11
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB3	1:A:51:PHE:HB2	2	0.11
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB3	1:A:51:PHE:HB3	2	0.11
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB2	1:A:51:PHE:HB2	15	0.11
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB2	1:A:51:PHE:HB3	15	0.11
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB3	1:A:51:PHE:HB2	15	0.11
(1,1571)	1:A:57:PHE:HB3	1:A:51:PHE:HB3	15	0.11
(1,1533)	1:A:9:GLU:HA	1:A:12:GLN:HG2	8	0.11
(1,1463)	1:A:38:PRO:HD2	1:A:31:LYS:HD3	9	0.11
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HD3	2	0.11
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HD3	2	0.11
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HD3	2	0.11
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HD3	10	0.11
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HD3	10	0.11
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HD3	10	0.11
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG11	1:A:63:PRO:HD3	25	0.11
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG12	1:A:63:PRO:HD3	25	0.11
(1,1351)	1:A:89:VAL:HG13	1:A:63:PRO:HD3	25	0.11
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD21	12	0.11
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD22	12	0.11
(1,1314)	1:A:45:CYS:HB2	1:A:22:LEU:HD23	12	0.11
(1,1199)	1:A:85:VAL:H	1:A:85:VAL:HG21	10	0.11
(1,1199)	1:A:85:VAL:H	1:A:85:VAL:HG22	10	0.11
(1,1199)	1:A:85:VAL:H	1:A:85:VAL:HG23	10	0.11
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG11	14	0.11
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG12	14	0.11
(1,1178)	1:A:90:ASP:H	1:A:89:VAL:HG13	14	0.11
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:5:VAL:H	19	0.11
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:5:VAL:H	19	0.11
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:5:VAL:H	19	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG21	1:A:5:VAL:H	27	0.11
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG22	1:A:5:VAL:H	27	0.11
(1,1069)	1:A:5:VAL:HG23	1:A:5:VAL:H	27	0.11
(1,1048)	1:A:119:SER:HB2	1:A:119:SER:H	17	0.11
(1,1025)	1:A:64:LEU:H	1:A:64:LEU:HD21	7	0.11
(1,1025)	1:A:64:LEU:H	1:A:64:LEU:HD22	7	0.11
(1,1025)	1:A:64:LEU:H	1:A:64:LEU:HD23	7	0.11

10 Dihedral-angle violation analysis

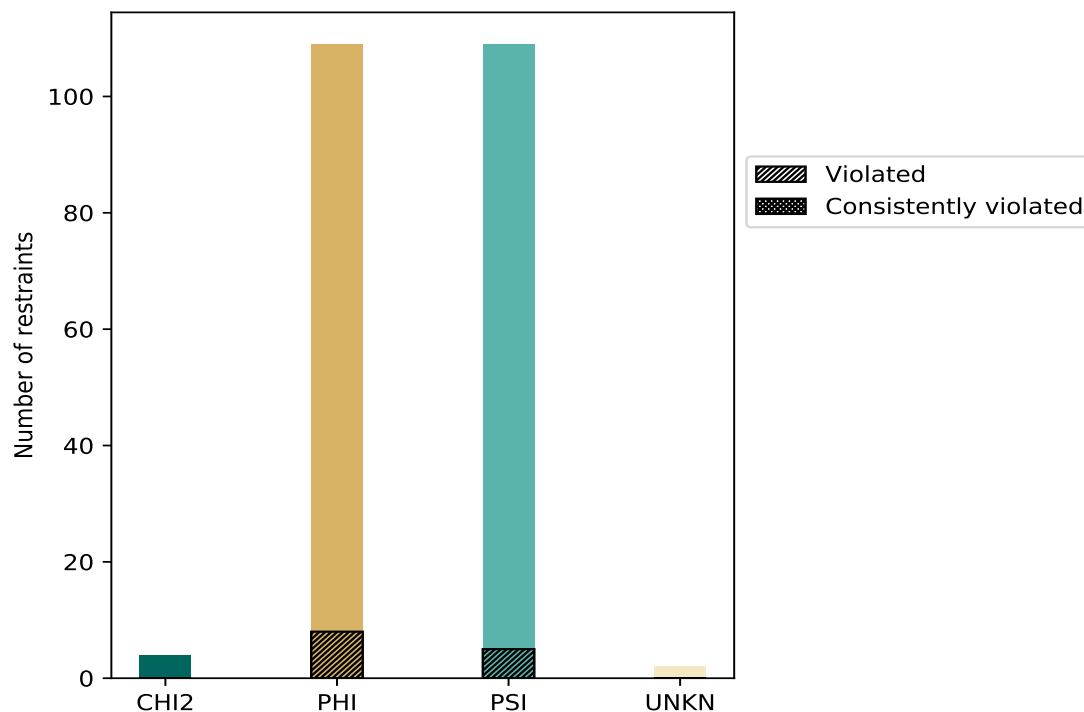
10.1 Summary of dihedral-angle violations

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

Angle type	Count	% ¹	Violated ³			Consistently Violated ⁴		
			Count	% ²	% ¹	Count	% ²	% ¹
CHI2	4	1.8	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
PHI	109	48.7	8	7.3	3.6	0	0.0	0.0
PSI	109	48.7	5	4.6	2.2	0	0.0	0.0
UNKN	2	0.9	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Total	224	100.0	13	5.8	5.8	0	0.0	0.0

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

10.1.1 Bar chart : Distribution of dihedral-angles and violations



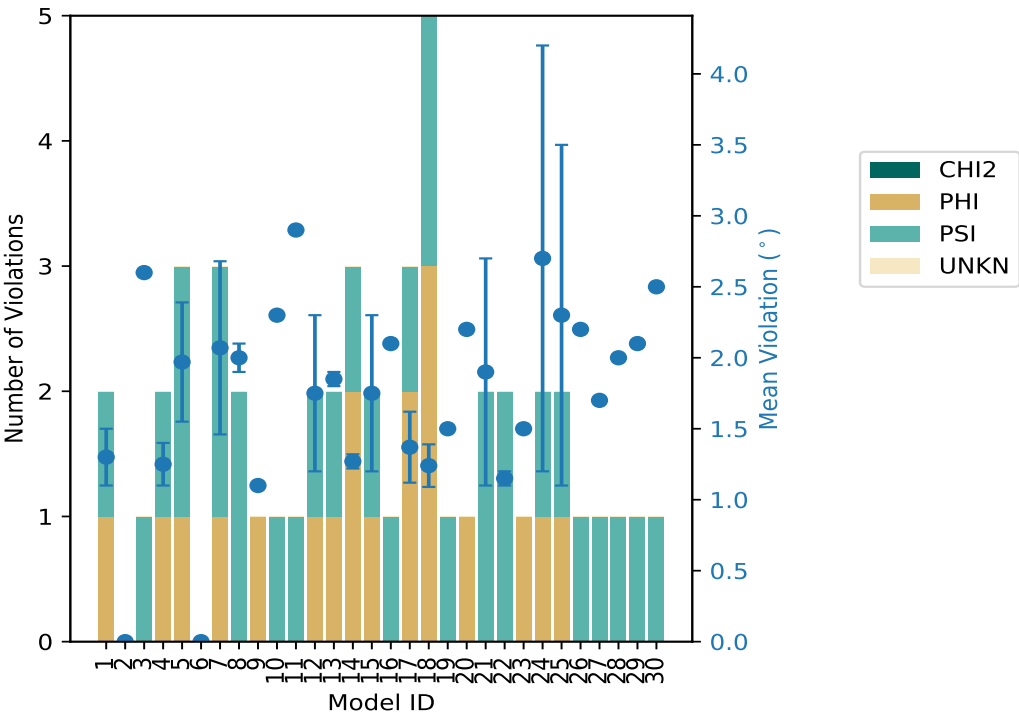
Violated and consistently violated restraints are shown using different hatch patterns in their respective categories

10.2 Dihedral-angle violation statistics in each model

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

Model ID	Number of violations					Mean (°)	Max (°)	Std. deviation (°)
	CHI2	PHI	PSI	UNKN	Total			
1	0	1	1	0	2	1.3	1.5	0.2
2	0	0	0	0	0	0.0	0.0	0.0
3	0	0	1	0	1	2.6	2.6	0.0
4	0	1	1	0	2	1.25	1.4	0.15
5	0	1	2	0	3	1.97	2.4	0.42
6	0	0	0	0	0	0.0	0.0	0.0
7	0	1	2	0	3	2.07	2.8	0.61
8	0	0	2	0	2	2.0	2.1	0.1
9	0	1	0	0	1	1.1	1.1	0.0
10	0	0	1	0	1	2.3	2.3	0.0
11	0	0	1	0	1	2.9	2.9	0.0
12	0	1	1	0	2	1.75	2.3	0.55
13	0	1	1	0	2	1.85	1.9	0.05
14	0	2	1	0	3	1.27	1.3	0.05
15	0	1	1	0	2	1.75	2.3	0.55
16	0	0	1	0	1	2.1	2.1	0.0
17	0	2	1	0	3	1.37	1.7	0.25
18	0	3	2	0	5	1.24	1.5	0.15
19	0	0	1	0	1	1.5	1.5	0.0
20	0	1	0	0	1	2.2	2.2	0.0
21	0	0	2	0	2	1.9	2.7	0.8
22	0	0	2	0	2	1.15	1.2	0.05
23	0	1	0	0	1	1.5	1.5	0.0
24	0	1	1	0	2	2.7	4.2	1.5
25	0	1	1	0	2	2.3	3.5	1.2
26	0	0	1	0	1	2.2	2.2	0.0
27	0	0	1	0	1	1.7	1.7	0.0
28	0	0	1	0	1	2.0	2.0	0.0
29	0	0	1	0	1	2.1	2.1	0.0
30	0	0	1	0	1	2.5	2.5	0.0

10.2.1 Bar graph : Dihedral violation statistics for each model



The mean and the standard deviation are shown in blue with respect to the y axis on the right

10.3 Violation statistics in the ensemble

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

Number of violated restraints					Fraction of the ensemble	
CHI2	PHI	PSI	UNKN	Total	Count ¹	%
0	4	3	0	7	1	3.3
0	2	0	0	2	2	6.7
0	0	0	0	0	3	10.0
0	0	1	0	1	4	13.3
0	1	0	0	1	5	16.7
0	1	0	0	1	6	20.0
0	0	0	0	0	7	23.3
0	0	0	0	0	8	26.7
0	0	0	0	0	9	30.0
0	0	0	0	0	10	33.3
0	0	0	0	0	11	36.7
0	0	0	0	0	12	40.0

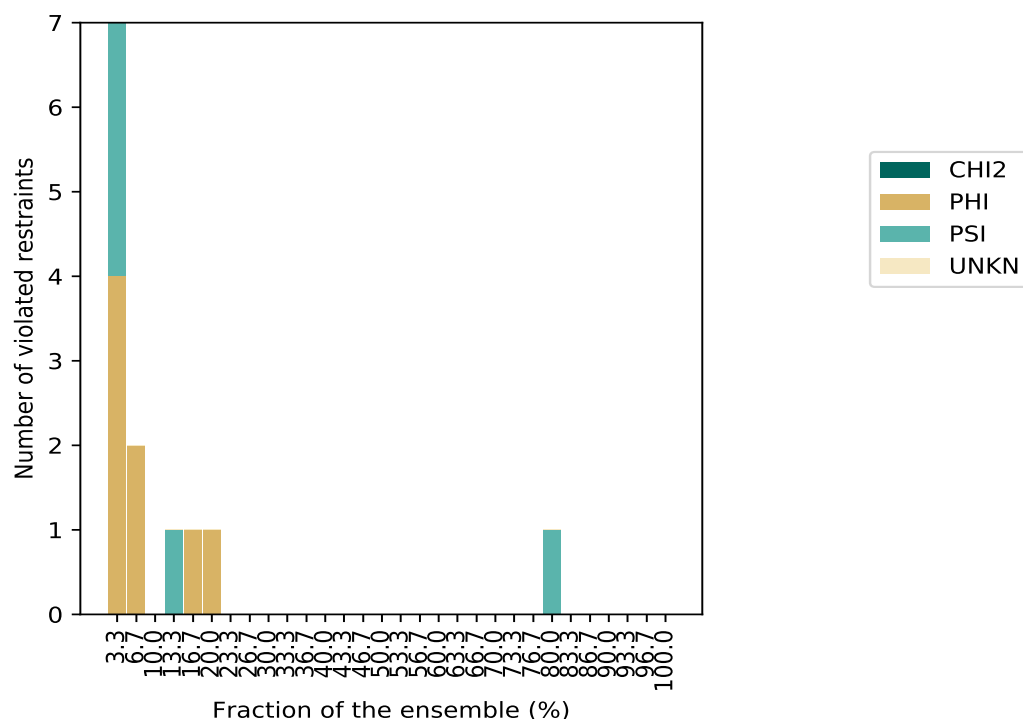
Continued on next page...

Continued from previous page...

Number of violated restraints					Fraction of the ensemble	
CHI2	PHI	PSI	UNKN	Total	Count ¹	%
0	0	0	0	0	13	43.3
0	0	0	0	0	14	46.7
0	0	0	0	0	15	50.0
0	0	0	0	0	16	53.3
0	0	0	0	0	17	56.7
0	0	0	0	0	18	60.0
0	0	0	0	0	19	63.3
0	0	0	0	0	20	66.7
0	0	0	0	0	21	70.0
0	0	0	0	0	22	73.3
0	0	0	0	0	23	76.7
0	0	1	0	1	24	80.0
0	0	0	0	0	25	83.3
0	0	0	0	0	26	86.7
0	0	0	0	0	27	90.0
0	0	0	0	0	28	93.3
0	0	0	0	0	29	96.7
0	0	0	0	0	30	100.0

¹ Number of models with violations

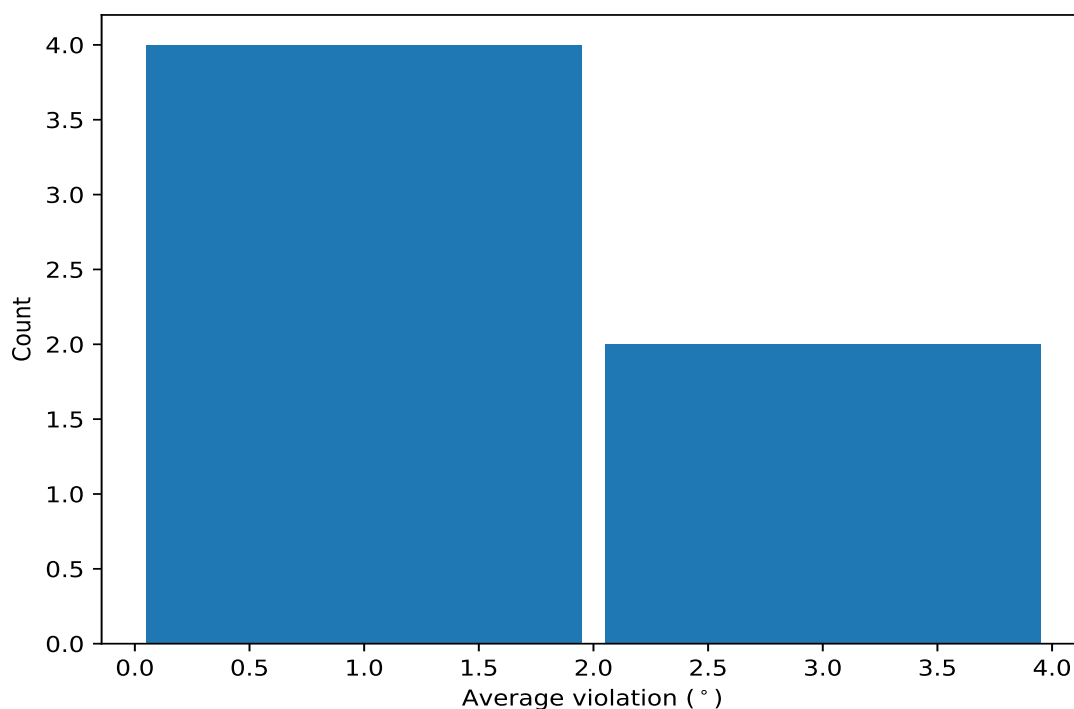
10.3.1 Bar graph : Dihedral-angle Violation statistics for the ensemble



10.4 Most violated dihedral-angle restraints

10.4.1 Histogram : Distribution of mean dihedral-angle violations

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



10.4.2 Table: Most violated dihedral-angle restraints

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

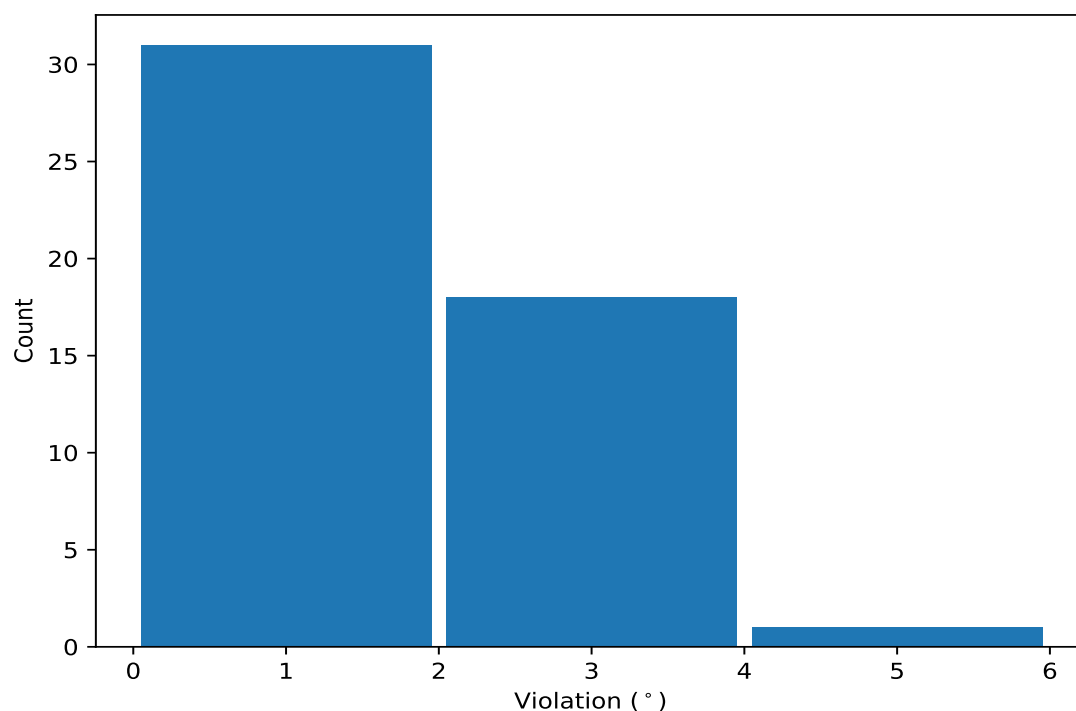
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models ¹	Mean (°)	SD ² (°)
(1,134)	1:A:73:ALA:N	1:A:73:ALA:CA	1:A:73:ALA:C	1:A:74:HIS:N	24	2.09	0.74
(1,218)	1:A:121:LYS:N	1:A:121:LYS:CA	1:A:121:LYS:C	1:A:122:LYS:N	4	2.08	0.53
(1,169)	1:A:94:ASP:C	1:A:95:ASN:N	1:A:95:ASN:CA	1:A:95:ASN:C	5	1.48	0.4
(1,217)	1:A:120:ILE:C	1:A:121:LYS:N	1:A:121:LYS:CA	1:A:121:LYS:C	6	1.22	0.15
(1,163)	1:A:90:ASP:C	1:A:91:LYS:N	1:A:91:LYS:CA	1:A:91:LYS:C	2	1.35	0.05
(1,161)	1:A:89:VAL:C	1:A:90:ASP:N	1:A:90:ASP:CA	1:A:90:ASP:C	2	1.15	0.05

¹ Number of violated models, ²Standard deviation

10.5 All violated dihedral-angle restraints

10.5.1 Histogram : Distribution of violations

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



10.5.2 Table: All violated dihedral-angle restraints

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

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,134)	1:A:73:ALA:N	1:A:73:ALA:CA	1:A:73:ALA:C	1:A:74:HIS:N	24	4.2
(1,134)	1:A:73:ALA:N	1:A:73:ALA:CA	1:A:73:ALA:C	1:A:74:HIS:N	25	3.5
(1,134)	1:A:73:ALA:N	1:A:73:ALA:CA	1:A:73:ALA:C	1:A:74:HIS:N	11	2.9
(1,134)	1:A:73:ALA:N	1:A:73:ALA:CA	1:A:73:ALA:C	1:A:74:HIS:N	7	2.8
(1,218)	1:A:121:LYS:N	1:A:121:LYS:CA	1:A:121:LYS:C	1:A:122:LYS:N	21	2.7
(1,134)	1:A:73:ALA:N	1:A:73:ALA:CA	1:A:73:ALA:C	1:A:74:HIS:N	3	2.6
(1,134)	1:A:73:ALA:N	1:A:73:ALA:CA	1:A:73:ALA:C	1:A:74:HIS:N	30	2.5
(1,218)	1:A:121:LYS:N	1:A:121:LYS:CA	1:A:121:LYS:C	1:A:122:LYS:N	5	2.4
(1,134)	1:A:73:ALA:N	1:A:73:ALA:CA	1:A:73:ALA:C	1:A:74:HIS:N	10	2.3
(1,134)	1:A:73:ALA:N	1:A:73:ALA:CA	1:A:73:ALA:C	1:A:74:HIS:N	12	2.3
(1,134)	1:A:73:ALA:N	1:A:73:ALA:CA	1:A:73:ALA:C	1:A:74:HIS:N	15	2.3
(1,157)	1:A:87:LYS:C	1:A:88:CYS:N	1:A:88:CYS:CA	1:A:88:CYS:C	20	2.2
(1,134)	1:A:73:ALA:N	1:A:73:ALA:CA	1:A:73:ALA:C	1:A:74:HIS:N	26	2.2
(1,2)	1:A:3:PHE:N	1:A:3:PHE:CA	1:A:3:PHE:C	1:A:4:THR:N	16	2.1
(1,169)	1:A:94:ASP:C	1:A:95:ASN:N	1:A:95:ASN:CA	1:A:95:ASN:C	7	2.1
(1,134)	1:A:73:ALA:N	1:A:73:ALA:CA	1:A:73:ALA:C	1:A:74:HIS:N	5	2.1
(1,134)	1:A:73:ALA:N	1:A:73:ALA:CA	1:A:73:ALA:C	1:A:74:HIS:N	8	2.1
(1,134)	1:A:73:ALA:N	1:A:73:ALA:CA	1:A:73:ALA:C	1:A:74:HIS:N	29	2.1
(1,134)	1:A:73:ALA:N	1:A:73:ALA:CA	1:A:73:ALA:C	1:A:74:HIS:N	28	2.0
(1,218)	1:A:121:LYS:N	1:A:121:LYS:CA	1:A:121:LYS:C	1:A:122:LYS:N	8	1.9
(1,134)	1:A:73:ALA:N	1:A:73:ALA:CA	1:A:73:ALA:C	1:A:74:HIS:N	13	1.9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,169)	1:A:94:ASP:C	1:A:95:ASN:N	1:A:95:ASN:CA	1:A:95:ASN:C	13	1.8
(1,134)	1:A:73:ALA:N	1:A:73:ALA:CA	1:A:73:ALA:C	1:A:74:HIS:N	17	1.7
(1,134)	1:A:73:ALA:N	1:A:73:ALA:CA	1:A:73:ALA:C	1:A:74:HIS:N	27	1.7
(1,94)	1:A:50:VAL:N	1:A:50:VAL:CA	1:A:50:VAL:C	1:A:51:PHE:N	18	1.5
(1,217)	1:A:120:ILE:C	1:A:121:LYS:N	1:A:121:LYS:CA	1:A:121:LYS:C	23	1.5
(1,134)	1:A:73:ALA:N	1:A:73:ALA:CA	1:A:73:ALA:C	1:A:74:HIS:N	1	1.5
(1,134)	1:A:73:ALA:N	1:A:73:ALA:CA	1:A:73:ALA:C	1:A:74:HIS:N	19	1.5
(1,163)	1:A:90:ASP:C	1:A:91:LYS:N	1:A:91:LYS:CA	1:A:91:LYS:C	5	1.4
(1,134)	1:A:73:ALA:N	1:A:73:ALA:CA	1:A:73:ALA:C	1:A:74:HIS:N	4	1.4
(1,218)	1:A:121:LYS:N	1:A:121:LYS:CA	1:A:121:LYS:C	1:A:122:LYS:N	7	1.3
(1,217)	1:A:120:ILE:C	1:A:121:LYS:N	1:A:121:LYS:CA	1:A:121:LYS:C	14	1.3
(1,169)	1:A:94:ASP:C	1:A:95:ASN:N	1:A:95:ASN:CA	1:A:95:ASN:C	14	1.3
(1,163)	1:A:90:ASP:C	1:A:91:LYS:N	1:A:91:LYS:CA	1:A:91:LYS:C	18	1.3
(1,135)	1:A:74:HIS:C	1:A:75:GLY:N	1:A:75:GLY:CA	1:A:75:GLY:C	17	1.3
(1,3)	1:A:3:PHE:C	1:A:4:THR:N	1:A:4:THR:CA	1:A:4:THR:C	18	1.2
(1,217)	1:A:120:ILE:C	1:A:121:LYS:N	1:A:121:LYS:CA	1:A:121:LYS:C	24	1.2
(1,161)	1:A:89:VAL:C	1:A:90:ASP:N	1:A:90:ASP:CA	1:A:90:ASP:C	15	1.2
(1,134)	1:A:73:ALA:N	1:A:73:ALA:CA	1:A:73:ALA:C	1:A:74:HIS:N	14	1.2
(1,134)	1:A:73:ALA:N	1:A:73:ALA:CA	1:A:73:ALA:C	1:A:74:HIS:N	22	1.2
(1,129)	1:A:70:HIS:C	1:A:71:GLN:N	1:A:71:GLN:CA	1:A:71:GLN:C	12	1.2
(1,217)	1:A:120:ILE:C	1:A:121:LYS:N	1:A:121:LYS:CA	1:A:121:LYS:C	9	1.1
(1,217)	1:A:120:ILE:C	1:A:121:LYS:N	1:A:121:LYS:CA	1:A:121:LYS:C	17	1.1
(1,217)	1:A:120:ILE:C	1:A:121:LYS:N	1:A:121:LYS:CA	1:A:121:LYS:C	18	1.1
(1,169)	1:A:94:ASP:C	1:A:95:ASN:N	1:A:95:ASN:CA	1:A:95:ASN:C	1	1.1
(1,169)	1:A:94:ASP:C	1:A:95:ASN:N	1:A:95:ASN:CA	1:A:95:ASN:C	25	1.1
(1,168)	1:A:94:ASP:N	1:A:94:ASP:CA	1:A:94:ASP:C	1:A:95:ASN:N	22	1.1
(1,161)	1:A:89:VAL:C	1:A:90:ASP:N	1:A:90:ASP:CA	1:A:90:ASP:C	4	1.1
(1,134)	1:A:73:ALA:N	1:A:73:ALA:CA	1:A:73:ALA:C	1:A:74:HIS:N	18	1.1
(1,134)	1:A:73:ALA:N	1:A:73:ALA:CA	1:A:73:ALA:C	1:A:74:HIS:N	21	1.1