



# wwPDB NMR Structure Validation Summary Report ⓘ

Jul 2, 2020 – 12:55 AM CDT

PDB ID : 2KW5  
Title : Solution NMR Structure of the Slr1183 protein from *Synechocystis* sp. PCC 6803, Northeast Structural Genomics Consortium Target SgR145  
Authors : Rossi, P.; Forouhar, F.; Lee, H.; Lange, O.; Mao, B.; Lemak, A.; Maglaqui, M.; Belote, R.; Ciccocanti, C.; Foote, E.; Sahdev, S.; Acton, T.; Xiao, R.; Everett, J.; Baker, D.; Montelione, G.T.; Northeast Structural Genomics Consortium (NESG)  
Deposited on : 2010-03-31

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

We welcome your comments at [validation@mail.wwpdb.org](mailto: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
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

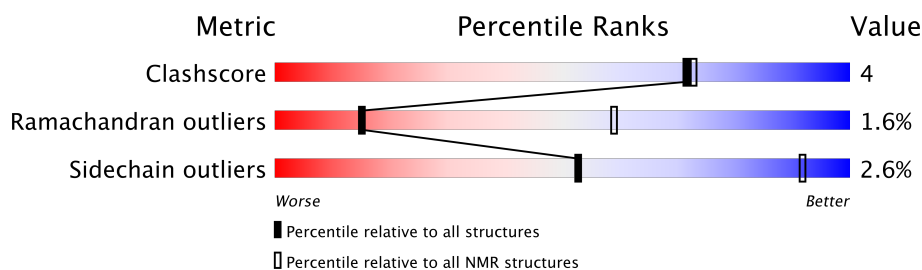
# 1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

*SOLUTION NMR*

The overall completeness of chemical shifts assignment is 43%.

Percentile scores (ranging between 0-100) for global validation metrics of the entry are shown in the following graphic. The table shows the number of entries on which the scores are based.



Metric	Whole archive (#Entries)	NMR archive (#Entries)
Clashscore	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  $\geq 3$ , 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	202	

## 2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 20 models. Model 16 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *lowest energy*.

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	Residue range (total)	Backbone RMSD (Å)	Medoid model
1	A:20-A:37, A:41-A:133, A:149-A:172, A:186-A:195 (145)	0.55	16

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

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

The models can be grouped into 5 clusters and 3 single-model clusters were found.

Cluster number	Models
1	2, 5, 7, 8, 12, 13, 16
2	1, 9, 10, 20
3	3, 4
4	17, 19
5	11, 15
Single-model clusters	6; 14; 18

### 3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 3141 atoms, of which 1560 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Slr1183 protein.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	202	Total	C	H	N	O	S	0
			3141	1007	1560	269	301	4	

There are 8 discrepancies between the modelled and reference sequences:

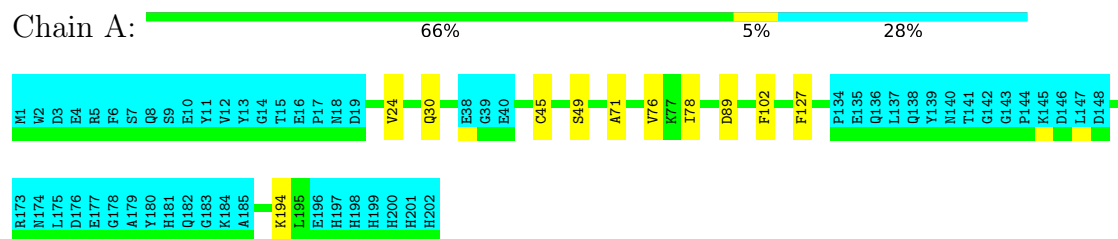
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	195	LEU	-	EXPRESSION TAG	UNP P74712
A	196	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP P74712
A	197	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP P74712
A	198	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP P74712
A	199	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP P74712
A	200	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP P74712
A	201	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP P74712
A	202	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP P74712

## 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.

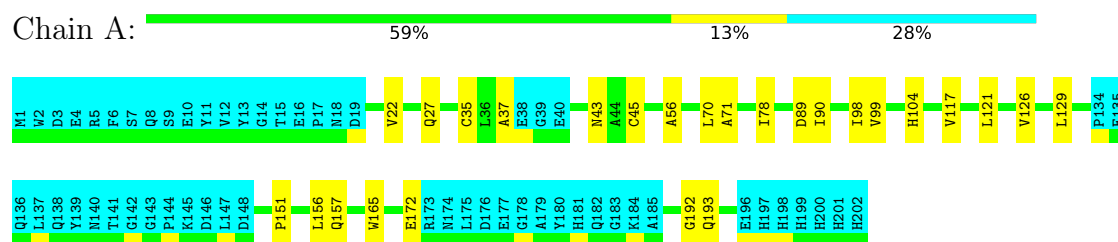
- Molecule 1: Slr1183 protein



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

The representative model is number 16. Colouring as in section 4.1 above.

- Molecule 1: Slr1183 protein



## 5 Refinement protocol and experimental data overview

Of the 100 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *structures with the lowest energy*.

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

Software name	Classification	Version
CNS	refinement	
CNS	structure solution	
CNS	geometry optimization	
CYANA	refinement	3.0
CYANA	geometry optimization	3.0
CYANA	structure solution	3.0

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)	2kw5_nmr.cif
Number of chemical shift lists	1
Total number of shifts	1149
Number of shifts mapped to atoms	885
Number of unparsed shifts	176
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	88
Assignment completeness (well-defined parts)	43%

## 6 Model quality [i](#)

### 6.1 Standard geometry [i](#)

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 [i](#)

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

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	1105	1153	1152	9±2
All	All	22100	23060	23040	173

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 4.

5 of 78 unique clashes are listed below, sorted by their clash magnitude.

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:45:CYS:HB3	1:A:67:ALA:HA	0.68	1.65	18	2
1:A:151:PRO:HB2	1:A:156:LEU:HD11	0.66	1.66	10	3
1:A:45:CYS:SG	1:A:67:ALA:HA	0.64	2.32	14	7
1:A:37:ALA:HB2	1:A:58:ASP:HA	0.64	1.69	2	2
1:A:35:CYS:SG	1:A:54:VAL:HG13	0.64	2.33	4	1

### 6.3 Torsion angles [i](#)

#### 6.3.1 Protein backbone [i](#)

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	145/202 (72%)	133±2 (92±2%)	10±2 (7±2%)	2±1 (2±0%)	15	59
All	All	2900/4040 (72%)	2658 (92%)	197 (7%)	45 (2%)	15	59

5 of 9 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	102	PHE	19
1	A	30	GLN	11
1	A	37	ALA	5
1	A	20	PHE	3
1	A	83	SER	3

### 6.3.2 Protein sidechains ⓘ

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles	
1	A	120/169 (71%)	117±1 (97±1%)	3±1 (3±1%)	53	92
All	All	2400/3380 (71%)	2337 (97%)	63 (3%)	53	92

5 of 18 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	89	ASP	15
1	A	127	PHE	13
1	A	172	GLU	6
1	A	122	LYS	5
1	A	194	LYS	3

### 6.3.3 RNA ⓘ

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](#)

There are no ligands in this entry.

## 6.7 Other polymers [i](#)

There are no such molecules in this entry.

## 6.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

## 7 Chemical shift validation

The completeness of assignment taking into account all chemical shift lists is 43% for the well-defined parts and 36% for the entire structure.

### 7.1 Chemical shift list 1

File name: 2kw5\_nmr.cif

Chemical shift list name: *nef\_chemical\_shift\_list\_tbl*

#### 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	1149
Number of shifts mapped to atoms	885
Number of unparsed shifts	176
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	88
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 176) occurrences are reported below.

Shift ID	Chain	Res	Type	Atom	Shift Data		
					Value	Uncertainty	Ambiguity
6	A	12	VAL	HG1%	0.716	0.030	1
7	A	12	VAL	HG1%	0.716	0.030	1
9	A	12	VAL	HG2%	0.752	0.030	1
10	A	12	VAL	HG2%	0.752	0.030	1
15	A	21	LEU	HD1%	0.774	0.030	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 88) occurrences are reported below.

Chain	Res	Type	Atom	Shift Data		
				Value	Uncertainty	Ambiguity
A	150	LEU	HD2%	0.447	0.03	1
A	126	VAL	HG2%	0.928	0.03	1

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Chain	Res	Type	Atom	Shift Data		
				Value	Uncertainty	Ambiguity
A	54	VAL	HG1%	0.955	0.03	1
A	64	LEU	HD2%	0.656	0.03	1
A	187	LEU	HD1%	0.701	0.03	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
$^{13}\text{C}_\alpha$	165	$-0.33 \pm 0.10$	None needed ( $< 0.5$ ppm)
$^{13}\text{C}_\beta$	151	$0.17 \pm 0.12$	None needed ( $< 0.5$ ppm)
$^{13}\text{C}'$	163	$-0.22 \pm 0.10$	None needed ( $< 0.5$ ppm)
$^{15}\text{N}$	156	$0.01 \pm 0.32$	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 43%, i.e. 760 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1748. 35 out of 36 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	$^1\text{H}$	$^{13}\text{C}$	$^{15}\text{N}$
Backbone	546/713 (77%)	133/284 (47%)	280/290 (97%)	133/139 (96%)
Sidechain	210/925 (23%)	0/537 (0%)	210/355 (59%)	0/33 (0%)
Aromatic	4/110 (4%)	2/58 (3%)	0/48 (0%)	2/4 (50%)
Overall	760/1748 (43%)	135/879 (15%)	490/693 (71%)	135/176 (77%)

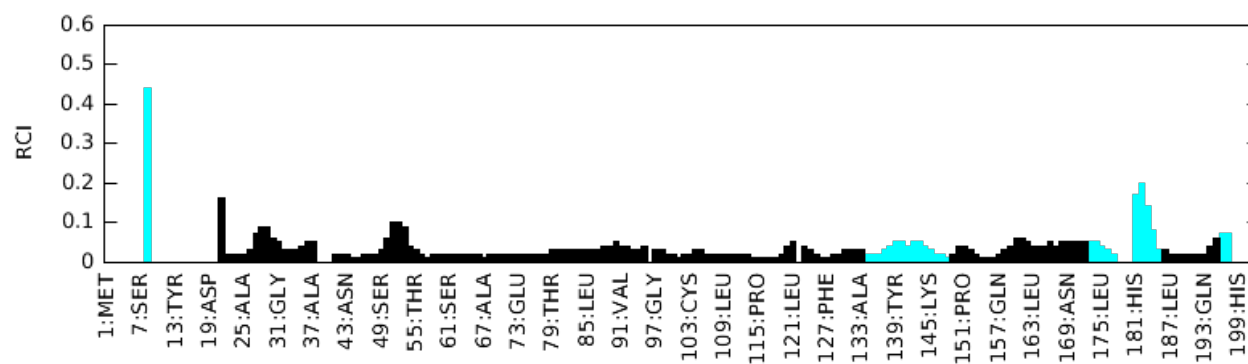
### 7.1.4 Statistically unusual chemical shifts [i](#)

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	1121
Intra-residue ( $ i-j =0$ )	82
Sequential ( $ i-j =1$ )	220
Medium range ( $ i-j >1$ and $ i-j <5$ )	298
Long range ( $ i-j \geq 5$ )	521
Inter-chain	0
Total dihedral-angle restraints	288
Total hydrogen bond restraints	184
Total disulfide bond restraints	0
Number of unmapped restraints	0
Number of restraints per residue	5.8
Number of long range restraints per residue	2.7

### 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)	28.1	0.2
0.2-0.5 (Medium)	13.9	0.49
>0.5 (Large)	1.2	2.2

#### 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)	29.6	9.9
10.0-20.0 (Medium)	1.7	19.8
>20.0 (Large)	0.1	21.9

## 9 Distance violation analysis

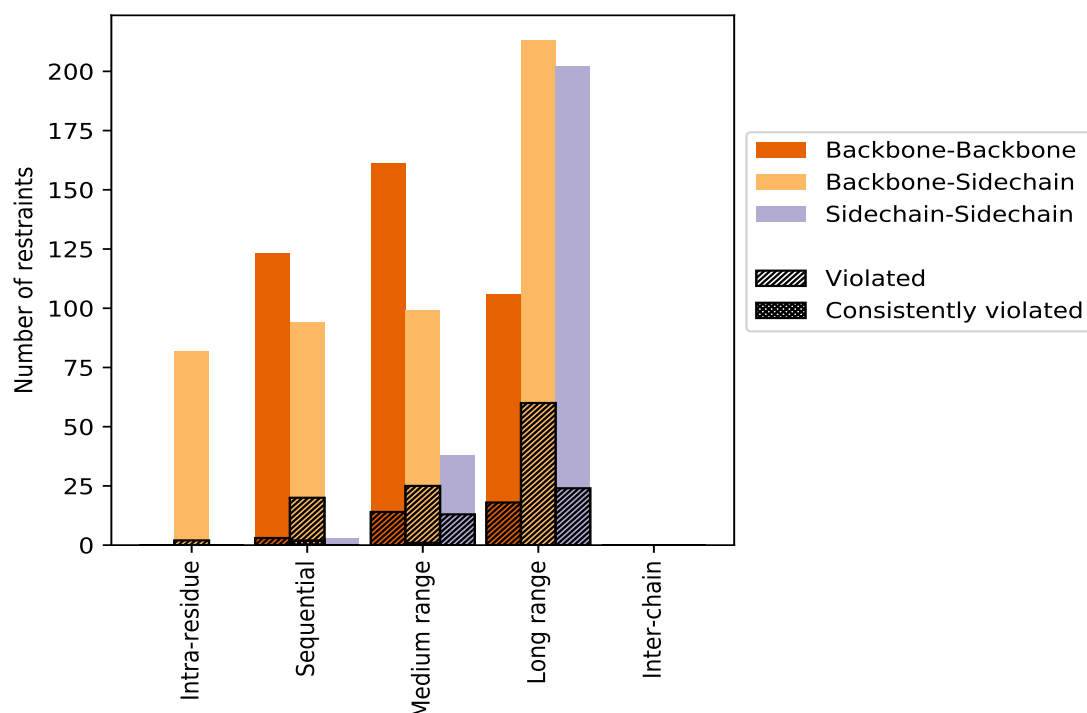
### 9.1 Summary of distance violations

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	% <sup>1</sup>	Violated <sup>3</sup>			Consistently Violated <sup>4</sup>		
			Count	% <sup>2</sup>	% <sup>1</sup>	Count	% <sup>2</sup>	% <sup>1</sup>
Intra-residue ( $ i-j =0$ )	82	7.3	2	2.4	0.2	0	0.0	0.0
Backbone-Backbone	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	82	7.3	2	2.4	0.2	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Sequential ( $ i-j =1$ )	220	19.6	23	10.5	2.1	2	0.9	0.2
Backbone-Backbone	123	11.0	3	2.4	0.3	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	94	8.4	20	21.3	1.8	2	2.1	0.2
Sidechain-Sidechain	3	0.3	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Medium range ( $ i-j >1$ & $ i-j <5$ )	298	26.6	52	17.4	4.6	1	0.3	0.1
Backbone-Backbone	161	14.4	14	8.7	1.2	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	99	8.8	25	25.3	2.2	1	1.0	0.1
Sidechain-Sidechain	38	3.4	13	34.2	1.2	0	0.0	0.0
Long range ( $ i-j \geq 5$ )	521	46.5	102	19.6	9.1	0	0.0	0.0
Backbone-Backbone	106	9.5	18	17.0	1.6	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	213	19.0	60	28.2	5.4	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	202	18.0	24	11.9	2.1	0	0.0	0.0
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	1121	100.0	179	16.0	16.0	3	0.3	0.3
Backbone-Backbone	390	34.8	35	9.0	3.1	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	488	43.5	107	21.9	9.5	3	0.6	0.3
Sidechain-Sidechain	243	21.7	37	15.2	3.3	0	0.0	0.0

<sup>1</sup> percentage calculated with respect to the total number of distance restraints, <sup>2</sup> percentage calculated with respect to the number of restraints in a particular restraint category, <sup>3</sup> violated in at least one model, <sup>4</sup> 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 <sup>6</sup> (Å)
	IR <sup>1</sup>	SQ <sup>2</sup>	MR <sup>3</sup>	LR <sup>4</sup>	IC <sup>5</sup>	Total			
1	1	5	16	25	0	47	0.22	1.64	0.22
2	0	4	13	23	0	40	0.22	1.65	0.24
3	0	4	9	24	0	37	0.23	1.52	0.23
4	0	5	16	26	0	47	0.2	1.48	0.2
5	0	5	12	26	0	43	0.21	1.28	0.18
6	1	6	18	21	0	46	0.25	1.36	0.23
7	0	7	11	22	0	40	0.19	0.4	0.08
8	2	7	15	24	0	48	0.24	2.2	0.31
9	1	7	13	29	0	50	0.22	1.78	0.24
10	0	7	13	22	0	42	0.22	1.35	0.19
11	1	5	11	23	0	40	0.22	1.59	0.23
12	0	3	10	21	0	34	0.22	1.27	0.2

*Continued on next page...*

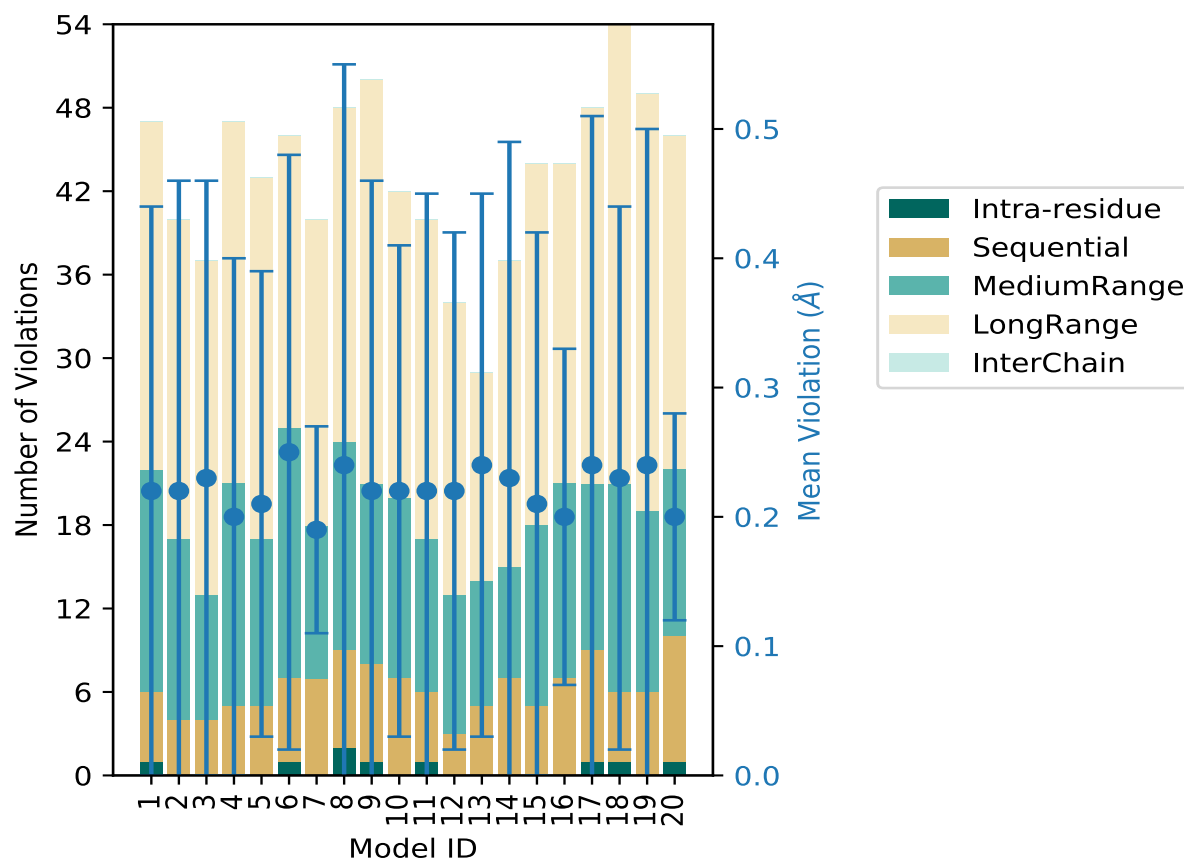


Continued from previous page...

Model ID	Number of violations						Mean (Å)	Max (Å)	SD <sup>6</sup> (Å)
	IR <sup>1</sup>	SQ <sup>2</sup>	MR <sup>3</sup>	LR <sup>4</sup>	IC <sup>5</sup>	Total			
13	0	5	9	15	0	29	0.24	1.26	0.21
14	0	7	8	22	0	37	0.23	1.69	0.26
15	0	5	13	26	0	44	0.21	1.51	0.21
16	0	7	14	23	0	44	0.2	0.82	0.13
17	1	8	12	27	0	48	0.24	1.75	0.27
18	1	5	15	33	0	54	0.23	1.41	0.21
19	0	6	13	30	0	49	0.24	1.54	0.26
20	1	9	12	24	0	46	0.2	0.43	0.08

<sup>1</sup>Intra-residue restraints, <sup>2</sup>Sequential restraints, <sup>3</sup>Medium range restraints, <sup>4</sup>Long range restraints, <sup>5</sup>Inter-chain restraints, <sup>6</sup>Standard 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

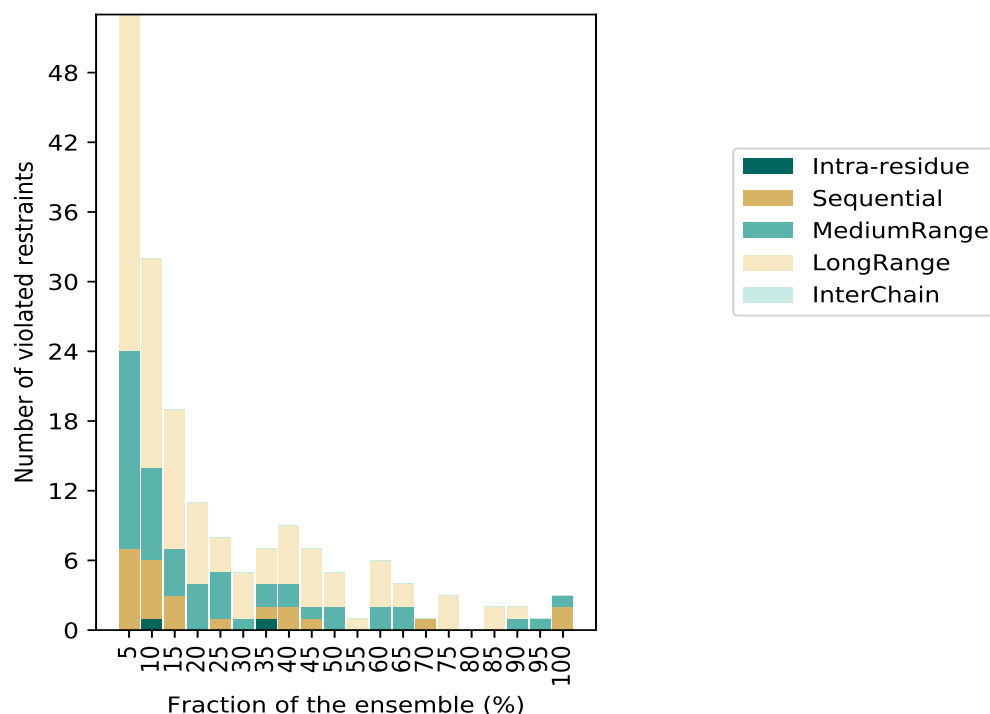
Violation analysis may find that some restraints are violated in few models and some are violated in most of models. The following table provides this information as number of violated restraints for a given fraction of the ensemble. In total, 942(IR:80, SQ:197, MR:246, LR:419, IC:0) restraints are not violated in the ensemble.

Number of violated restraints						Fraction of the ensemble	
IR <sup>1</sup>	SQ <sup>2</sup>	MR <sup>3</sup>	LR <sup>4</sup>	IC <sup>5</sup>	Total	Count <sup>6</sup>	%
0	7	17	29	0	53	1	5.0
1	5	8	18	0	32	2	10.0
0	3	4	12	0	19	3	15.0
0	0	4	7	0	11	4	20.0
0	1	4	3	0	8	5	25.0
0	0	1	4	0	5	6	30.0
1	1	2	3	0	7	7	35.0
0	2	2	5	0	9	8	40.0
0	1	1	5	0	7	9	45.0
0	0	2	3	0	5	10	50.0
0	0	0	1	0	1	11	55.0
0	0	2	4	0	6	12	60.0
0	0	2	2	0	4	13	65.0
0	1	0	0	0	1	14	70.0
0	0	0	3	0	3	15	75.0
0	0	0	0	0	0	16	80.0
0	0	0	2	0	2	17	85.0
0	0	1	1	0	2	18	90.0
0	0	1	0	0	1	19	95.0
0	2	1	0	0	3	20	100.0

<sup>1</sup>Intra-residue restraints, <sup>2</sup>Sequential restraints, <sup>3</sup>Medium range restraints, <sup>4</sup>Long range restraints,

<sup>5</sup>Inter-chain restraints, <sup>6</sup> Number of models with violations

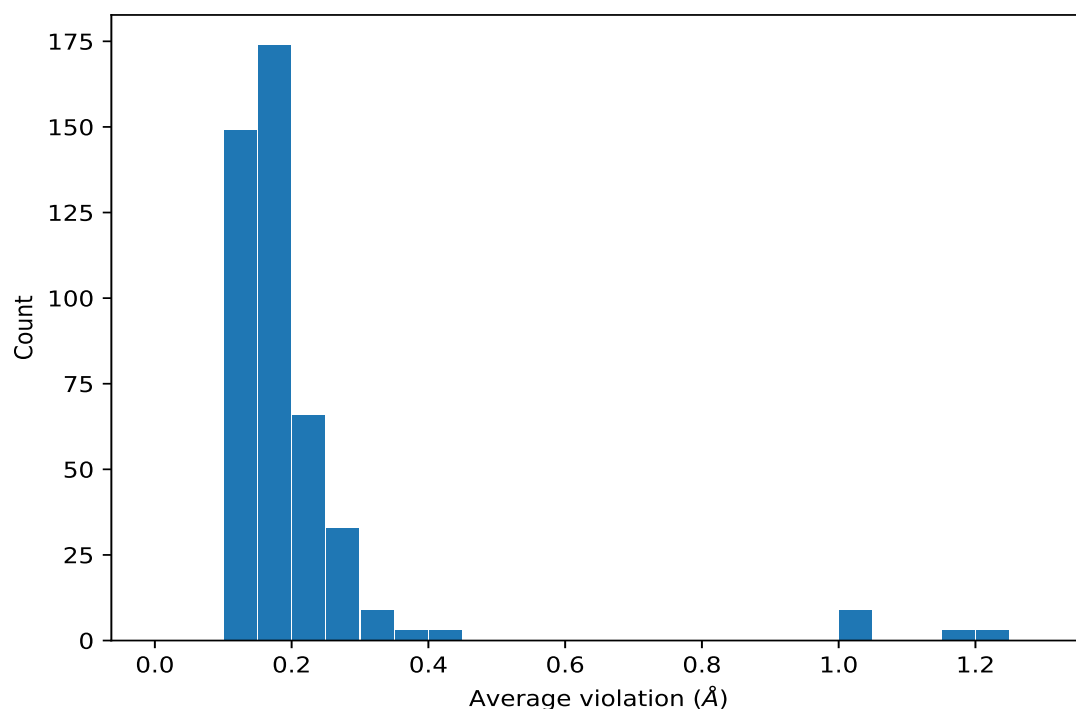
### 9.3.1 Bar graph : Distance violation statistics for the ensemble



## 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 <sup>1</sup>	Mean (Å)	SD <sup>1</sup> (Å)
(1,914)	1:A:147:LEU:HD11	1:A:148:ASP:H	20	0.35	0.07
(1,914)	1:A:147:LEU:HD12	1:A:148:ASP:H	20	0.35	0.07
(1,914)	1:A:147:LEU:HD13	1:A:148:ASP:H	20	0.35	0.07
(1,266)	1:A:117:VAL:HG21	1:A:118:TYR:H	20	0.22	0.06
(1,266)	1:A:117:VAL:HG22	1:A:118:TYR:H	20	0.22	0.06
(1,266)	1:A:117:VAL:HG23	1:A:118:TYR:H	20	0.22	0.06
(1,225)	1:A:163:LEU:HD11	1:A:165:TRP:H	20	0.38	0.04
(1,225)	1:A:163:LEU:HD12	1:A:165:TRP:H	20	0.38	0.04
(1,225)	1:A:163:LEU:HD13	1:A:165:TRP:H	20	0.38	0.04
(1,1084)	1:A:154:GLU:O	1:A:158:SER:H	19	0.18	0.05
(1,936)	1:A:153:LEU:HD21	1:A:157:GLN:H	18	0.18	0.04
(1,936)	1:A:153:LEU:HD22	1:A:157:GLN:H	18	0.18	0.04
(1,936)	1:A:153:LEU:HD23	1:A:157:GLN:H	18	0.18	0.04
(1,664)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:117:VAL:HG11	18	0.26	0.06
(1,664)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:117:VAL:HG12	18	0.26	0.06
(1,664)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:117:VAL:HG13	18	0.26	0.06

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Models <sup>1</sup>	Mean (Å)	SD <sup>1</sup> (Å)
(1,664)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:117:VAL:HG11	18	0.26	0.06
(1,664)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:117:VAL:HG12	18	0.26	0.06
(1,664)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:117:VAL:HG13	18	0.26	0.06
(1,664)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:117:VAL:HG11	18	0.26	0.06
(1,664)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:117:VAL:HG12	18	0.26	0.06
(1,664)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:117:VAL:HG13	18	0.26	0.06
(1,296)	1:A:137:LEU:HD11	1:A:149:LEU:H	17	0.22	0.08
(1,296)	1:A:137:LEU:HD12	1:A:149:LEU:H	17	0.22	0.08
(1,296)	1:A:137:LEU:HD13	1:A:149:LEU:H	17	0.22	0.08
(1,232)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:H	17	1.21	0.55
(1,232)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:H	17	1.21	0.55
(1,232)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:H	17	1.21	0.55
(1,913)	1:A:137:LEU:HD11	1:A:148:ASP:H	15	0.42	0.12
(1,913)	1:A:137:LEU:HD12	1:A:148:ASP:H	15	0.42	0.12
(1,913)	1:A:137:LEU:HD13	1:A:148:ASP:H	15	0.42	0.12
(1,569)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD21	15	0.2	0.04
(1,569)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD22	15	0.2	0.04
(1,569)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD23	15	0.2	0.04
(1,569)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD21	15	0.2	0.04
(1,569)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD22	15	0.2	0.04
(1,569)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD23	15	0.2	0.04
(1,569)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD21	15	0.2	0.04
(1,569)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD22	15	0.2	0.04
(1,569)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD23	15	0.2	0.04
(1,1003)	1:A:59:GLN:H	1:A:37:ALA:H	15	0.18	0.09
(1,964)	1:A:116:LYS:H	1:A:117:VAL:HG21	14	0.14	0.02
(1,964)	1:A:116:LYS:H	1:A:117:VAL:HG22	14	0.14	0.02
(1,964)	1:A:116:LYS:H	1:A:117:VAL:HG23	14	0.14	0.02
(1,827)	1:A:34:LEU:HD11	1:A:36:LEU:H	13	0.17	0.04
(1,827)	1:A:34:LEU:HD12	1:A:36:LEU:H	13	0.17	0.04
(1,827)	1:A:34:LEU:HD13	1:A:36:LEU:H	13	0.17	0.04
(1,295)	1:A:153:LEU:H	1:A:190:LEU:HD21	13	0.15	0.03
(1,295)	1:A:153:LEU:H	1:A:190:LEU:HD22	13	0.15	0.03
(1,295)	1:A:153:LEU:H	1:A:190:LEU:HD23	13	0.15	0.03
(1,1099)	1:A:124:GLY:O	1:A:98:ILE:H	13	0.18	0.07
(1,1034)	1:A:23:SER:O	1:A:27:GLN:H	13	0.16	0.05
(1,841)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:146:ASP:H	12	0.2	0.06
(1,841)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:146:ASP:H	12	0.2	0.06
(1,841)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:146:ASP:H	12	0.2	0.06
(1,732)	1:A:147:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD21	12	0.16	0.04
(1,732)	1:A:147:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD22	12	0.16	0.04
(1,732)	1:A:147:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD23	12	0.16	0.04

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Models <sup>1</sup>	Mean (Å)	SD <sup>1</sup> (Å)
(1,732)	1:A:147:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD21	12	0.16	0.04
(1,732)	1:A:147:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD22	12	0.16	0.04
(1,732)	1:A:147:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD23	12	0.16	0.04
(1,732)	1:A:147:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD21	12	0.16	0.04
(1,732)	1:A:147:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD22	12	0.16	0.04
(1,732)	1:A:147:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD23	12	0.16	0.04
(1,701)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD11	12	0.18	0.05
(1,701)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD12	12	0.18	0.05
(1,701)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD13	12	0.18	0.05
(1,701)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD11	12	0.18	0.05
(1,701)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD12	12	0.18	0.05
(1,701)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD13	12	0.18	0.05
(1,701)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD11	12	0.18	0.05
(1,701)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD12	12	0.18	0.05
(1,701)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD13	12	0.18	0.05
(1,596)	1:A:164:ASN:H	1:A:195:LEU:H	12	0.19	0.06
(1,217)	1:A:163:LEU:HD11	1:A:195:LEU:H	12	0.15	0.03
(1,217)	1:A:163:LEU:HD12	1:A:195:LEU:H	12	0.15	0.03
(1,217)	1:A:163:LEU:HD13	1:A:195:LEU:H	12	0.15	0.03
(1,1070)	1:A:108:SER:O	1:A:112:GLN:H	12	0.18	0.04
(1,507)	1:A:37:ALA:H	1:A:57:VAL:HG21	11	0.25	0.06
(1,507)	1:A:37:ALA:H	1:A:57:VAL:HG22	11	0.25	0.06
(1,507)	1:A:37:ALA:H	1:A:57:VAL:HG23	11	0.25	0.06
(1,994)	1:A:79:THR:H	1:A:54:VAL:H	10	0.18	0.06
(1,897)	1:A:163:LEU:HD21	1:A:193:GLN:H	10	0.15	0.04
(1,897)	1:A:163:LEU:HD22	1:A:193:GLN:H	10	0.15	0.04
(1,897)	1:A:163:LEU:HD23	1:A:193:GLN:H	10	0.15	0.04
(1,570)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:145:LYS:H	10	0.17	0.05
(1,570)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:145:LYS:H	10	0.17	0.05
(1,570)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:145:LYS:H	10	0.17	0.05
(1,563)	1:A:50:LEU:HD11	1:A:54:VAL:HG21	10	0.17	0.03
(1,563)	1:A:50:LEU:HD11	1:A:54:VAL:HG22	10	0.17	0.03
(1,563)	1:A:50:LEU:HD11	1:A:54:VAL:HG23	10	0.17	0.03
(1,563)	1:A:50:LEU:HD12	1:A:54:VAL:HG21	10	0.17	0.03
(1,563)	1:A:50:LEU:HD12	1:A:54:VAL:HG22	10	0.17	0.03
(1,563)	1:A:50:LEU:HD12	1:A:54:VAL:HG23	10	0.17	0.03
(1,563)	1:A:50:LEU:HD13	1:A:54:VAL:HG21	10	0.17	0.03
(1,563)	1:A:50:LEU:HD13	1:A:54:VAL:HG22	10	0.17	0.03
(1,563)	1:A:50:LEU:HD13	1:A:54:VAL:HG23	10	0.17	0.03
(1,379)	1:A:188:ILE:HD11	1:A:190:LEU:HD11	10	0.16	0.03
(1,379)	1:A:188:ILE:HD11	1:A:190:LEU:HD12	10	0.16	0.03
(1,379)	1:A:188:ILE:HD11	1:A:190:LEU:HD13	10	0.16	0.03

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Models <sup>1</sup>	Mean (Å)	SD <sup>1</sup> (Å)
(1,379)	1:A:188:ILE:HD12	1:A:190:LEU:HD11	10	0.16	0.03
(1,379)	1:A:188:ILE:HD12	1:A:190:LEU:HD12	10	0.16	0.03
(1,379)	1:A:188:ILE:HD12	1:A:190:LEU:HD13	10	0.16	0.03
(1,379)	1:A:188:ILE:HD13	1:A:190:LEU:HD11	10	0.16	0.03
(1,379)	1:A:188:ILE:HD13	1:A:190:LEU:HD12	10	0.16	0.03
(1,379)	1:A:188:ILE:HD13	1:A:190:LEU:HD13	10	0.16	0.03
(1,885)	1:A:50:LEU:H	1:A:54:VAL:HG21	9	0.13	0.02
(1,885)	1:A:50:LEU:H	1:A:54:VAL:HG22	9	0.13	0.02
(1,885)	1:A:50:LEU:H	1:A:54:VAL:HG23	9	0.13	0.02
(1,854)	1:A:131:GLY:H	1:A:153:LEU:HD21	9	0.28	0.39
(1,854)	1:A:131:GLY:H	1:A:153:LEU:HD22	9	0.28	0.39
(1,854)	1:A:131:GLY:H	1:A:153:LEU:HD23	9	0.28	0.39
(1,809)	1:A:91:VAL:HG11	1:A:92:ALA:H	9	0.15	0.03
(1,809)	1:A:91:VAL:HG12	1:A:92:ALA:H	9	0.15	0.03
(1,809)	1:A:91:VAL:HG13	1:A:92:ALA:H	9	0.15	0.03
(1,755)	1:A:70:LEU:HD11	1:A:78:ILE:HD11	9	0.18	0.04
(1,755)	1:A:70:LEU:HD11	1:A:78:ILE:HD12	9	0.18	0.04
(1,755)	1:A:70:LEU:HD11	1:A:78:ILE:HD13	9	0.18	0.04
(1,755)	1:A:70:LEU:HD12	1:A:78:ILE:HD11	9	0.18	0.04
(1,755)	1:A:70:LEU:HD12	1:A:78:ILE:HD12	9	0.18	0.04
(1,755)	1:A:70:LEU:HD12	1:A:78:ILE:HD13	9	0.18	0.04
(1,755)	1:A:70:LEU:HD13	1:A:78:ILE:HD11	9	0.18	0.04
(1,755)	1:A:70:LEU:HD13	1:A:78:ILE:HD12	9	0.18	0.04
(1,755)	1:A:70:LEU:HD13	1:A:78:ILE:HD13	9	0.18	0.04
(1,572)	1:A:21:LEU:HD21	1:A:28:ILE:HD11	9	0.19	0.05
(1,572)	1:A:21:LEU:HD21	1:A:28:ILE:HD12	9	0.19	0.05
(1,572)	1:A:21:LEU:HD21	1:A:28:ILE:HD13	9	0.19	0.05
(1,572)	1:A:21:LEU:HD22	1:A:28:ILE:HD11	9	0.19	0.05
(1,572)	1:A:21:LEU:HD22	1:A:28:ILE:HD12	9	0.19	0.05
(1,572)	1:A:21:LEU:HD22	1:A:28:ILE:HD13	9	0.19	0.05
(1,572)	1:A:21:LEU:HD23	1:A:28:ILE:HD11	9	0.19	0.05
(1,572)	1:A:21:LEU:HD23	1:A:28:ILE:HD12	9	0.19	0.05
(1,572)	1:A:21:LEU:HD23	1:A:28:ILE:HD13	9	0.19	0.05
(1,259)	1:A:71:ALA:H	1:A:78:ILE:HD11	9	0.14	0.03
(1,259)	1:A:71:ALA:H	1:A:78:ILE:HD12	9	0.14	0.03
(1,259)	1:A:71:ALA:H	1:A:78:ILE:HD13	9	0.14	0.03
(1,1105)	1:A:102:PHE:H	1:A:128:ILE:O	9	0.19	0.06
(1,988)	1:A:117:VAL:HG21	1:A:121:LEU:H	8	0.18	0.05
(1,988)	1:A:117:VAL:HG22	1:A:121:LEU:H	8	0.18	0.05
(1,988)	1:A:117:VAL:HG23	1:A:121:LEU:H	8	0.18	0.05
(1,848)	1:A:91:VAL:HG21	1:A:95:TRP:HE1	8	0.16	0.04
(1,848)	1:A:91:VAL:HG22	1:A:95:TRP:HE1	8	0.16	0.04

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Models <sup>1</sup>	Mean (Å)	SD <sup>1</sup> (Å)
(1,848)	1:A:91:VAL:HG23	1:A:95:TRP:HE1	8	0.16	0.04
(1,510)	1:A:137:LEU:HD11	1:A:150:LEU:H	8	0.27	0.1
(1,510)	1:A:137:LEU:HD12	1:A:150:LEU:H	8	0.27	0.1
(1,510)	1:A:137:LEU:HD13	1:A:150:LEU:H	8	0.27	0.1
(1,346)	1:A:175:LEU:HD21	1:A:184:LYS:H	8	0.21	0.07
(1,346)	1:A:175:LEU:HD22	1:A:184:LYS:H	8	0.21	0.07
(1,346)	1:A:175:LEU:HD23	1:A:184:LYS:H	8	0.21	0.07
(1,334)	1:A:90:ILE:H	1:A:91:VAL:HG21	8	0.19	0.05
(1,334)	1:A:90:ILE:H	1:A:91:VAL:HG22	8	0.19	0.05
(1,334)	1:A:90:ILE:H	1:A:91:VAL:HG23	8	0.19	0.05
(1,250)	1:A:57:VAL:HG21	1:A:84:ASN:H	8	0.23	0.03
(1,250)	1:A:57:VAL:HG22	1:A:84:ASN:H	8	0.23	0.03
(1,250)	1:A:57:VAL:HG23	1:A:84:ASN:H	8	0.23	0.03
(1,226)	1:A:57:VAL:HG11	1:A:82:GLN:H	8	0.18	0.06
(1,226)	1:A:57:VAL:HG12	1:A:82:GLN:H	8	0.18	0.06
(1,226)	1:A:57:VAL:HG13	1:A:82:GLN:H	8	0.18	0.06
(1,174)	1:A:61:SER:H	1:A:62:VAL:HG11	8	0.13	0.02
(1,174)	1:A:61:SER:H	1:A:62:VAL:HG12	8	0.13	0.02
(1,174)	1:A:61:SER:H	1:A:62:VAL:HG13	8	0.13	0.02
(1,1113)	1:A:127:PHE:H	1:A:192:GLY:O	8	0.16	0.02
(1,811)	1:A:146:ASP:H	1:A:147:LEU:HD11	7	0.21	0.05
(1,811)	1:A:146:ASP:H	1:A:147:LEU:HD12	7	0.21	0.05
(1,811)	1:A:146:ASP:H	1:A:147:LEU:HD13	7	0.21	0.05
(1,453)	1:A:118:TYR:H	1:A:121:LEU:HD21	7	0.2	0.08
(1,453)	1:A:118:TYR:H	1:A:121:LEU:HD22	7	0.2	0.08
(1,453)	1:A:118:TYR:H	1:A:121:LEU:HD23	7	0.2	0.08
(1,408)	1:A:163:LEU:HD21	1:A:195:LEU:HD21	7	0.16	0.04
(1,408)	1:A:163:LEU:HD21	1:A:195:LEU:HD22	7	0.16	0.04
(1,408)	1:A:163:LEU:HD21	1:A:195:LEU:HD23	7	0.16	0.04
(1,408)	1:A:163:LEU:HD22	1:A:195:LEU:HD21	7	0.16	0.04
(1,408)	1:A:163:LEU:HD22	1:A:195:LEU:HD22	7	0.16	0.04
(1,408)	1:A:163:LEU:HD22	1:A:195:LEU:HD23	7	0.16	0.04
(1,408)	1:A:163:LEU:HD23	1:A:195:LEU:HD21	7	0.16	0.04
(1,408)	1:A:163:LEU:HD23	1:A:195:LEU:HD22	7	0.16	0.04
(1,408)	1:A:163:LEU:HD23	1:A:195:LEU:HD23	7	0.16	0.04
(1,399)	1:A:34:LEU:H	1:A:99:VAL:HG21	7	0.13	0.03
(1,399)	1:A:34:LEU:H	1:A:99:VAL:HG22	7	0.13	0.03
(1,399)	1:A:34:LEU:H	1:A:99:VAL:HG23	7	0.13	0.03
(1,382)	1:A:24:VAL:H	1:A:167:ILE:HD11	7	0.19	0.07
(1,382)	1:A:24:VAL:H	1:A:167:ILE:HD12	7	0.19	0.07
(1,382)	1:A:24:VAL:H	1:A:167:ILE:HD13	7	0.19	0.07
(1,229)	1:A:147:LEU:H	1:A:147:LEU:HD21	7	0.32	0.18

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Models <sup>1</sup>	Mean (Å)	SD <sup>1</sup> (Å)
(1,229)	1:A:147:LEU:H	1:A:147:LEU:HD22	7	0.32	0.18
(1,229)	1:A:147:LEU:H	1:A:147:LEU:HD23	7	0.32	0.18
(1,1032)	1:A:22:VAL:O	1:A:26:ASN:H	7	0.14	0.03
(1,896)	1:A:166:LEU:HD11	1:A:193:GLN:H	6	0.17	0.03
(1,896)	1:A:166:LEU:HD12	1:A:193:GLN:H	6	0.17	0.03
(1,896)	1:A:166:LEU:HD13	1:A:193:GLN:H	6	0.17	0.03
(1,546)	1:A:121:LEU:HD11	1:A:163:LEU:HD21	6	0.14	0.03
(1,546)	1:A:121:LEU:HD11	1:A:163:LEU:HD22	6	0.14	0.03
(1,546)	1:A:121:LEU:HD11	1:A:163:LEU:HD23	6	0.14	0.03
(1,546)	1:A:121:LEU:HD12	1:A:163:LEU:HD21	6	0.14	0.03
(1,546)	1:A:121:LEU:HD12	1:A:163:LEU:HD22	6	0.14	0.03
(1,546)	1:A:121:LEU:HD12	1:A:163:LEU:HD23	6	0.14	0.03
(1,546)	1:A:121:LEU:HD13	1:A:163:LEU:HD21	6	0.14	0.03
(1,546)	1:A:121:LEU:HD13	1:A:163:LEU:HD22	6	0.14	0.03
(1,546)	1:A:121:LEU:HD13	1:A:163:LEU:HD23	6	0.14	0.03
(1,518)	1:A:117:VAL:HG11	1:A:121:LEU:HD11	6	0.21	0.08
(1,518)	1:A:117:VAL:HG11	1:A:121:LEU:HD12	6	0.21	0.08
(1,518)	1:A:117:VAL:HG11	1:A:121:LEU:HD13	6	0.21	0.08
(1,518)	1:A:117:VAL:HG12	1:A:121:LEU:HD11	6	0.21	0.08
(1,518)	1:A:117:VAL:HG12	1:A:121:LEU:HD12	6	0.21	0.08
(1,518)	1:A:117:VAL:HG12	1:A:121:LEU:HD13	6	0.21	0.08
(1,518)	1:A:117:VAL:HG13	1:A:121:LEU:HD11	6	0.21	0.08
(1,518)	1:A:117:VAL:HG13	1:A:121:LEU:HD12	6	0.21	0.08
(1,518)	1:A:117:VAL:HG13	1:A:121:LEU:HD13	6	0.21	0.08
(1,202)	1:A:138:GLN:H	1:A:147:LEU:HD21	6	1.17	0.78
(1,202)	1:A:138:GLN:H	1:A:147:LEU:HD22	6	1.17	0.78
(1,202)	1:A:138:GLN:H	1:A:147:LEU:HD23	6	1.17	0.78
(1,1023)	1:A:105:LEU:HD11	1:A:85:LEU:HD21	6	0.14	0.02
(1,1023)	1:A:105:LEU:HD11	1:A:85:LEU:HD22	6	0.14	0.02
(1,1023)	1:A:105:LEU:HD11	1:A:85:LEU:HD23	6	0.14	0.02
(1,1023)	1:A:105:LEU:HD12	1:A:85:LEU:HD21	6	0.14	0.02
(1,1023)	1:A:105:LEU:HD12	1:A:85:LEU:HD22	6	0.14	0.02
(1,1023)	1:A:105:LEU:HD12	1:A:85:LEU:HD23	6	0.14	0.02
(1,1023)	1:A:105:LEU:HD13	1:A:85:LEU:HD21	6	0.14	0.02
(1,1023)	1:A:105:LEU:HD13	1:A:85:LEU:HD22	6	0.14	0.02
(1,1023)	1:A:105:LEU:HD13	1:A:85:LEU:HD23	6	0.14	0.02
(1,910)	1:A:81:VAL:HG11	1:A:82:GLN:H	5	0.23	0.01
(1,910)	1:A:81:VAL:HG12	1:A:82:GLN:H	5	0.23	0.01
(1,910)	1:A:81:VAL:HG13	1:A:82:GLN:H	5	0.23	0.01
(1,891)	1:A:125:GLY:H	1:A:163:LEU:HD21	5	0.15	0.02
(1,891)	1:A:125:GLY:H	1:A:163:LEU:HD22	5	0.15	0.02
(1,891)	1:A:125:GLY:H	1:A:163:LEU:HD23	5	0.15	0.02

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Models <sup>1</sup>	Mean (Å)	SD <sup>1</sup> (Å)
(1,801)	1:A:113:LEU:HD11	1:A:116:LYS:H	5	0.14	0.03
(1,801)	1:A:113:LEU:HD12	1:A:116:LYS:H	5	0.14	0.03
(1,801)	1:A:113:LEU:HD13	1:A:116:LYS:H	5	0.14	0.03
(1,535)	1:A:74:LYS:H	1:A:76:VAL:HG11	5	0.17	0.06
(1,535)	1:A:74:LYS:H	1:A:76:VAL:HG12	5	0.17	0.06
(1,535)	1:A:74:LYS:H	1:A:76:VAL:HG13	5	0.17	0.06
(1,498)	1:A:156:LEU:HD21	1:A:160:LEU:HD11	5	0.16	0.08
(1,498)	1:A:156:LEU:HD21	1:A:160:LEU:HD12	5	0.16	0.08
(1,498)	1:A:156:LEU:HD21	1:A:160:LEU:HD13	5	0.16	0.08
(1,498)	1:A:156:LEU:HD22	1:A:160:LEU:HD11	5	0.16	0.08
(1,498)	1:A:156:LEU:HD22	1:A:160:LEU:HD12	5	0.16	0.08
(1,498)	1:A:156:LEU:HD22	1:A:160:LEU:HD13	5	0.16	0.08
(1,498)	1:A:156:LEU:HD23	1:A:160:LEU:HD11	5	0.16	0.08
(1,498)	1:A:156:LEU:HD23	1:A:160:LEU:HD12	5	0.16	0.08
(1,498)	1:A:156:LEU:HD23	1:A:160:LEU:HD13	5	0.16	0.08
(1,311)	1:A:51:GLY:H	1:A:76:VAL:HG11	5	0.16	0.04
(1,311)	1:A:51:GLY:H	1:A:76:VAL:HG12	5	0.16	0.04
(1,311)	1:A:51:GLY:H	1:A:76:VAL:HG13	5	0.16	0.04
(1,249)	1:A:81:VAL:HG11	1:A:84:ASN:H	5	0.34	0.06
(1,249)	1:A:81:VAL:HG12	1:A:84:ASN:H	5	0.34	0.06
(1,249)	1:A:81:VAL:HG13	1:A:84:ASN:H	5	0.34	0.06
(1,205)	1:A:24:VAL:HG11	1:A:192:GLY:H	5	0.14	0.01
(1,205)	1:A:24:VAL:HG12	1:A:192:GLY:H	5	0.14	0.01
(1,205)	1:A:24:VAL:HG13	1:A:192:GLY:H	5	0.14	0.01
(1,986)	1:A:138:GLN:H	1:A:147:LEU:HD11	4	0.19	0.05
(1,986)	1:A:138:GLN:H	1:A:147:LEU:HD12	4	0.19	0.05
(1,986)	1:A:138:GLN:H	1:A:147:LEU:HD13	4	0.19	0.05
(1,915)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:148:ASP:H	4	0.21	0.07
(1,915)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:148:ASP:H	4	0.21	0.07
(1,915)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:148:ASP:H	4	0.21	0.07
(1,814)	1:A:147:LEU:H	1:A:150:LEU:HD11	4	0.21	0.05
(1,814)	1:A:147:LEU:H	1:A:150:LEU:HD12	4	0.21	0.05
(1,814)	1:A:147:LEU:H	1:A:150:LEU:HD13	4	0.21	0.05
(1,810)	1:A:136:GLN:H	1:A:147:LEU:HD11	4	0.2	0.03
(1,810)	1:A:136:GLN:H	1:A:147:LEU:HD12	4	0.2	0.03
(1,810)	1:A:136:GLN:H	1:A:147:LEU:HD13	4	0.2	0.03
(1,758)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD11	4	0.28	0.07
(1,758)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD12	4	0.28	0.07
(1,758)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD13	4	0.28	0.07
(1,758)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD11	4	0.28	0.07
(1,758)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD12	4	0.28	0.07
(1,758)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD13	4	0.28	0.07

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Models <sup>1</sup>	Mean (Å)	SD <sup>1</sup> (Å)
(1,758)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD11	4	0.28	0.07
(1,758)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD12	4	0.28	0.07
(1,758)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD13	4	0.28	0.07
(1,750)	1:A:81:VAL:HG21	1:A:85:LEU:HD21	4	0.16	0.04
(1,750)	1:A:81:VAL:HG21	1:A:85:LEU:HD22	4	0.16	0.04
(1,750)	1:A:81:VAL:HG21	1:A:85:LEU:HD23	4	0.16	0.04
(1,750)	1:A:81:VAL:HG22	1:A:85:LEU:HD21	4	0.16	0.04
(1,750)	1:A:81:VAL:HG22	1:A:85:LEU:HD22	4	0.16	0.04
(1,750)	1:A:81:VAL:HG22	1:A:85:LEU:HD23	4	0.16	0.04
(1,750)	1:A:81:VAL:HG23	1:A:85:LEU:HD21	4	0.16	0.04
(1,750)	1:A:81:VAL:HG23	1:A:85:LEU:HD22	4	0.16	0.04
(1,750)	1:A:81:VAL:HG23	1:A:85:LEU:HD23	4	0.16	0.04
(1,511)	1:A:145:LYS:H	1:A:149:LEU:HD21	4	0.12	0.01
(1,511)	1:A:145:LYS:H	1:A:149:LEU:HD22	4	0.12	0.01
(1,511)	1:A:145:LYS:H	1:A:149:LEU:HD23	4	0.12	0.01
(1,410)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD21	4	1.04	0.09
(1,410)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD22	4	1.04	0.09
(1,410)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD23	4	1.04	0.09
(1,410)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD21	4	1.04	0.09
(1,410)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD22	4	1.04	0.09
(1,410)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD23	4	1.04	0.09
(1,410)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD21	4	1.04	0.09
(1,410)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD22	4	1.04	0.09
(1,410)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD23	4	1.04	0.09
(1,289)	1:A:101:ILE:HD11	1:A:128:ILE:H	4	0.11	0.0
(1,289)	1:A:101:ILE:HD12	1:A:128:ILE:H	4	0.11	0.0
(1,289)	1:A:101:ILE:HD13	1:A:128:ILE:H	4	0.11	0.0
(1,269)	1:A:145:LYS:H	1:A:149:LEU:HD11	4	0.2	0.09
(1,269)	1:A:145:LYS:H	1:A:149:LEU:HD12	4	0.2	0.09
(1,269)	1:A:145:LYS:H	1:A:149:LEU:HD13	4	0.2	0.09
(1,1017)	1:A:101:ILE:HA	1:A:128:ILE:H	4	0.14	0.04
(1,972)	1:A:85:LEU:HD21	1:A:89:ASP:H	3	0.13	0.02
(1,972)	1:A:85:LEU:HD22	1:A:89:ASP:H	3	0.13	0.02
(1,972)	1:A:85:LEU:HD23	1:A:89:ASP:H	3	0.13	0.02
(1,954)	1:A:70:LEU:H	1:A:78:ILE:HD11	3	0.15	0.02
(1,954)	1:A:70:LEU:H	1:A:78:ILE:HD12	3	0.15	0.02
(1,954)	1:A:70:LEU:H	1:A:78:ILE:HD13	3	0.15	0.02
(1,912)	1:A:56:ALA:H	1:A:81:VAL:HG21	3	0.12	0.01
(1,912)	1:A:56:ALA:H	1:A:81:VAL:HG22	3	0.12	0.01
(1,912)	1:A:56:ALA:H	1:A:81:VAL:HG23	3	0.12	0.01
(1,831)	1:A:117:VAL:HG11	1:A:118:TYR:H	3	0.14	0.02
(1,831)	1:A:117:VAL:HG12	1:A:118:TYR:H	3	0.14	0.02

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Models <sup>1</sup>	Mean (Å)	SD <sup>1</sup> (Å)
(1,831)	1:A:117:VAL:HG13	1:A:118:TYR:H	3	0.14	0.02
(1,812)	1:A:130:GLU:H	1:A:156:LEU:HD11	3	0.13	0.02
(1,812)	1:A:130:GLU:H	1:A:156:LEU:HD12	3	0.13	0.02
(1,812)	1:A:130:GLU:H	1:A:156:LEU:HD13	3	0.13	0.02
(1,806)	1:A:166:LEU:HD21	1:A:193:GLN:H	3	0.15	0.03
(1,806)	1:A:166:LEU:HD22	1:A:193:GLN:H	3	0.15	0.03
(1,806)	1:A:166:LEU:HD23	1:A:193:GLN:H	3	0.15	0.03
(1,79)	1:A:175:LEU:HD21	1:A:185:ALA:H	3	0.12	0.01
(1,79)	1:A:175:LEU:HD22	1:A:185:ALA:H	3	0.12	0.01
(1,79)	1:A:175:LEU:HD23	1:A:185:ALA:H	3	0.12	0.01
(1,781)	1:A:126:VAL:HG11	1:A:194:LYS:H	3	0.19	0.02
(1,781)	1:A:126:VAL:HG12	1:A:194:LYS:H	3	0.19	0.02
(1,781)	1:A:126:VAL:HG13	1:A:194:LYS:H	3	0.19	0.02
(1,654)	1:A:60:SER:H	1:A:83:SER:H	3	0.17	0.08
(1,622)	1:A:133:ALA:H	1:A:137:LEU:H	3	0.25	0.07
(1,37)	1:A:91:VAL:H	1:A:92:ALA:H	3	0.14	0.0
(1,343)	1:A:137:LEU:HD11	1:A:146:ASP:H	3	0.22	0.02
(1,343)	1:A:137:LEU:HD12	1:A:146:ASP:H	3	0.22	0.02
(1,343)	1:A:137:LEU:HD13	1:A:146:ASP:H	3	0.22	0.02
(1,270)	1:A:121:LEU:HD11	1:A:124:GLY:H	3	0.13	0.0
(1,270)	1:A:121:LEU:HD12	1:A:124:GLY:H	3	0.13	0.0
(1,270)	1:A:121:LEU:HD13	1:A:124:GLY:H	3	0.13	0.0
(1,233)	1:A:54:VAL:HG11	1:A:55:THR:H	3	0.12	0.01
(1,233)	1:A:54:VAL:HG12	1:A:55:THR:H	3	0.12	0.01
(1,233)	1:A:54:VAL:HG13	1:A:55:THR:H	3	0.12	0.01
(1,230)	1:A:147:LEU:H	1:A:150:LEU:HD21	3	0.15	0.05
(1,230)	1:A:147:LEU:H	1:A:150:LEU:HD22	3	0.15	0.05
(1,230)	1:A:147:LEU:H	1:A:150:LEU:HD23	3	0.15	0.05
(1,201)	1:A:157:GLN:H	1:A:190:LEU:HD21	3	0.17	0.02
(1,201)	1:A:157:GLN:H	1:A:190:LEU:HD22	3	0.17	0.02
(1,201)	1:A:157:GLN:H	1:A:190:LEU:HD23	3	0.17	0.02
(1,168)	1:A:137:LEU:H	1:A:150:LEU:HD21	3	0.2	0.06
(1,168)	1:A:137:LEU:H	1:A:150:LEU:HD22	3	0.2	0.06
(1,168)	1:A:137:LEU:H	1:A:150:LEU:HD23	3	0.2	0.06
(1,158)	1:A:163:LEU:H	1:A:195:LEU:HD21	3	0.16	0.04
(1,158)	1:A:163:LEU:H	1:A:195:LEU:HD22	3	0.16	0.04
(1,158)	1:A:163:LEU:H	1:A:195:LEU:HD23	3	0.16	0.04
(1,123)	1:A:24:VAL:H	1:A:128:ILE:HD11	3	0.12	0.01
(1,123)	1:A:24:VAL:H	1:A:128:ILE:HD12	3	0.12	0.01
(1,123)	1:A:24:VAL:H	1:A:128:ILE:HD13	3	0.12	0.01
(1,967)	1:A:146:ASP:H	1:A:149:LEU:HD11	2	0.17	0.06
(1,967)	1:A:146:ASP:H	1:A:149:LEU:HD12	2	0.17	0.06

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Models <sup>1</sup>	Mean (Å)	SD <sup>1</sup> (Å)
(1,967)	1:A:146:ASP:H	1:A:149:LEU:HD13	2	0.17	0.06
(1,934)	1:A:137:LEU:HD11	1:A:145:LYS:H	2	0.18	0.07
(1,934)	1:A:137:LEU:HD12	1:A:145:LYS:H	2	0.18	0.07
(1,934)	1:A:137:LEU:HD13	1:A:145:LYS:H	2	0.18	0.07
(1,932)	1:A:172:GLU:H	1:A:187:LEU:HD11	2	0.11	0.0
(1,932)	1:A:172:GLU:H	1:A:187:LEU:HD12	2	0.11	0.0
(1,932)	1:A:172:GLU:H	1:A:187:LEU:HD13	2	0.11	0.0
(1,924)	1:A:27:GLN:H	1:A:126:VAL:HG21	2	0.18	0.05
(1,924)	1:A:27:GLN:H	1:A:126:VAL:HG22	2	0.18	0.05
(1,924)	1:A:27:GLN:H	1:A:126:VAL:HG23	2	0.18	0.05
(1,902)	1:A:153:LEU:HD11	1:A:169:ASN:H	2	0.17	0.04
(1,902)	1:A:153:LEU:HD12	1:A:169:ASN:H	2	0.17	0.04
(1,902)	1:A:153:LEU:HD13	1:A:169:ASN:H	2	0.17	0.04
(1,822)	1:A:90:ILE:HD11	1:A:116:LYS:H	2	0.21	0.04
(1,822)	1:A:90:ILE:HD12	1:A:116:LYS:H	2	0.21	0.04
(1,822)	1:A:90:ILE:HD13	1:A:116:LYS:H	2	0.21	0.04
(1,790)	1:A:84:ASN:H	1:A:85:LEU:HD21	2	0.14	0.01
(1,790)	1:A:84:ASN:H	1:A:85:LEU:HD22	2	0.14	0.01
(1,790)	1:A:84:ASN:H	1:A:85:LEU:HD23	2	0.14	0.01
(1,693)	1:A:91:VAL:HG21	1:A:98:ILE:HD11	2	0.18	0.04
(1,693)	1:A:91:VAL:HG21	1:A:98:ILE:HD12	2	0.18	0.04
(1,693)	1:A:91:VAL:HG21	1:A:98:ILE:HD13	2	0.18	0.04
(1,693)	1:A:91:VAL:HG22	1:A:98:ILE:HD11	2	0.18	0.04
(1,693)	1:A:91:VAL:HG22	1:A:98:ILE:HD12	2	0.18	0.04
(1,693)	1:A:91:VAL:HG22	1:A:98:ILE:HD13	2	0.18	0.04
(1,693)	1:A:91:VAL:HG23	1:A:98:ILE:HD11	2	0.18	0.04
(1,693)	1:A:91:VAL:HG23	1:A:98:ILE:HD12	2	0.18	0.04
(1,693)	1:A:91:VAL:HG23	1:A:98:ILE:HD13	2	0.18	0.04
(1,632)	1:A:146:ASP:H	1:A:150:LEU:H	2	0.11	0.0
(1,566)	1:A:57:VAL:HG21	1:A:85:LEU:HD11	2	0.15	0.0
(1,566)	1:A:57:VAL:HG21	1:A:85:LEU:HD12	2	0.15	0.0
(1,566)	1:A:57:VAL:HG21	1:A:85:LEU:HD13	2	0.15	0.0
(1,566)	1:A:57:VAL:HG22	1:A:85:LEU:HD11	2	0.15	0.0
(1,566)	1:A:57:VAL:HG22	1:A:85:LEU:HD12	2	0.15	0.0
(1,566)	1:A:57:VAL:HG22	1:A:85:LEU:HD13	2	0.15	0.0
(1,566)	1:A:57:VAL:HG23	1:A:85:LEU:HD11	2	0.15	0.0
(1,566)	1:A:57:VAL:HG23	1:A:85:LEU:HD12	2	0.15	0.0
(1,566)	1:A:57:VAL:HG23	1:A:85:LEU:HD13	2	0.15	0.0
(1,508)	1:A:57:VAL:HG21	1:A:85:LEU:HD21	2	0.13	0.0
(1,508)	1:A:57:VAL:HG21	1:A:85:LEU:HD22	2	0.13	0.0
(1,508)	1:A:57:VAL:HG21	1:A:85:LEU:HD23	2	0.13	0.0
(1,508)	1:A:57:VAL:HG22	1:A:85:LEU:HD21	2	0.13	0.0

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Models <sup>1</sup>	Mean (Å)	SD <sup>1</sup> (Å)
(1,508)	1:A:57:VAL:HG22	1:A:85:LEU:HD22	2	0.13	0.0
(1,508)	1:A:57:VAL:HG22	1:A:85:LEU:HD23	2	0.13	0.0
(1,508)	1:A:57:VAL:HG23	1:A:85:LEU:HD21	2	0.13	0.0
(1,508)	1:A:57:VAL:HG23	1:A:85:LEU:HD22	2	0.13	0.0
(1,508)	1:A:57:VAL:HG23	1:A:85:LEU:HD23	2	0.13	0.0
(1,491)	1:A:37:ALA:H	1:A:85:LEU:HD11	2	0.11	0.0
(1,491)	1:A:37:ALA:H	1:A:85:LEU:HD12	2	0.11	0.0
(1,491)	1:A:37:ALA:H	1:A:85:LEU:HD13	2	0.11	0.0
(1,467)	1:A:62:VAL:HG11	1:A:63:GLY:H	2	0.13	0.02
(1,467)	1:A:62:VAL:HG12	1:A:63:GLY:H	2	0.13	0.02
(1,467)	1:A:62:VAL:HG13	1:A:63:GLY:H	2	0.13	0.02
(1,466)	1:A:113:LEU:HD11	1:A:117:VAL:HG11	2	0.11	0.0
(1,466)	1:A:113:LEU:HD11	1:A:117:VAL:HG12	2	0.11	0.0
(1,466)	1:A:113:LEU:HD11	1:A:117:VAL:HG13	2	0.11	0.0
(1,466)	1:A:113:LEU:HD12	1:A:117:VAL:HG11	2	0.11	0.0
(1,466)	1:A:113:LEU:HD12	1:A:117:VAL:HG12	2	0.11	0.0
(1,466)	1:A:113:LEU:HD12	1:A:117:VAL:HG13	2	0.11	0.0
(1,466)	1:A:113:LEU:HD13	1:A:117:VAL:HG11	2	0.11	0.0
(1,466)	1:A:113:LEU:HD13	1:A:117:VAL:HG12	2	0.11	0.0
(1,466)	1:A:113:LEU:HD13	1:A:117:VAL:HG13	2	0.11	0.0
(1,361)	1:A:72:GLN:H	1:A:78:ILE:HD11	2	0.16	0.01
(1,361)	1:A:72:GLN:H	1:A:78:ILE:HD12	2	0.16	0.01
(1,361)	1:A:72:GLN:H	1:A:78:ILE:HD13	2	0.16	0.01
(1,310)	1:A:173:ARG:H	1:A:187:LEU:HD11	2	0.18	0.02
(1,310)	1:A:173:ARG:H	1:A:187:LEU:HD12	2	0.18	0.02
(1,310)	1:A:173:ARG:H	1:A:187:LEU:HD13	2	0.18	0.02
(1,303)	1:A:91:VAL:H	1:A:93:ASP:H	2	0.29	0.01
(1,301)	1:A:104:HIS:H	1:A:105:LEU:HD21	2	0.27	0.1
(1,301)	1:A:104:HIS:H	1:A:105:LEU:HD22	2	0.27	0.1
(1,301)	1:A:104:HIS:H	1:A:105:LEU:HD23	2	0.27	0.1
(1,272)	1:A:124:GLY:H	1:A:163:LEU:HD21	2	0.16	0.03
(1,272)	1:A:124:GLY:H	1:A:163:LEU:HD22	2	0.16	0.03
(1,272)	1:A:124:GLY:H	1:A:163:LEU:HD23	2	0.16	0.03
(1,263)	1:A:163:LEU:HD11	1:A:164:ASN:H	2	0.11	0.0
(1,263)	1:A:163:LEU:HD12	1:A:164:ASN:H	2	0.11	0.0
(1,263)	1:A:163:LEU:HD13	1:A:164:ASN:H	2	0.11	0.0
(1,254)	1:A:57:VAL:HG11	1:A:83:SER:H	2	0.22	0.06
(1,254)	1:A:57:VAL:HG12	1:A:83:SER:H	2	0.22	0.06
(1,254)	1:A:57:VAL:HG13	1:A:83:SER:H	2	0.22	0.06
(1,242)	1:A:133:ALA:H	1:A:147:LEU:HD21	2	0.17	0.04
(1,242)	1:A:133:ALA:H	1:A:147:LEU:HD22	2	0.17	0.04
(1,242)	1:A:133:ALA:H	1:A:147:LEU:HD23	2	0.17	0.04

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Models <sup>1</sup>	Mean (Å)	SD <sup>1</sup> (Å)
(1,228)	1:A:147:LEU:H	1:A:147:LEU:HD11	2	0.16	0.04
(1,228)	1:A:147:LEU:H	1:A:147:LEU:HD12	2	0.16	0.04
(1,228)	1:A:147:LEU:H	1:A:147:LEU:HD13	2	0.16	0.04
(1,176)	1:A:186:ALA:H	1:A:187:LEU:HD21	2	0.13	0.02
(1,176)	1:A:186:ALA:H	1:A:187:LEU:HD22	2	0.13	0.02
(1,176)	1:A:186:ALA:H	1:A:187:LEU:HD23	2	0.13	0.02
(1,175)	1:A:163:LEU:HD11	1:A:166:LEU:H	2	0.14	0.03
(1,175)	1:A:163:LEU:HD12	1:A:166:LEU:H	2	0.14	0.03
(1,175)	1:A:163:LEU:HD13	1:A:166:LEU:H	2	0.14	0.03
(1,152)	1:A:37:ALA:H	1:A:57:VAL:H	2	0.17	0.01
(1,1098)	1:A:124:GLY:O	1:A:98:ILE:N	2	0.13	0.0
(1,108)	1:A:145:LYS:H	1:A:148:ASP:H	2	0.26	0.02
(1,1026)	1:A:95:TRP:HE1	1:A:91:VAL:H	2	0.17	0.01
(1,1016)	1:A:165:TRP:HZ3	1:A:127:PHE:HZ	2	0.14	0.03
(1,101)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:GLN:H	2	0.13	0.02
(1,1006)	1:A:100:SER:H	1:A:126:VAL:H	2	0.15	0.0

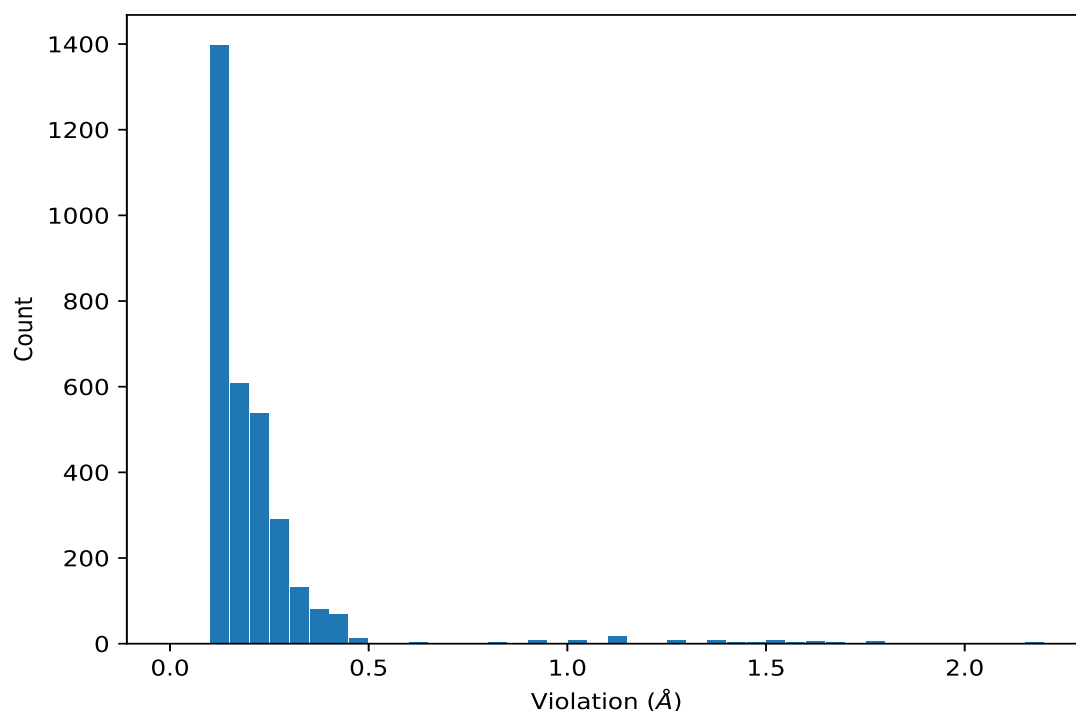
<sup>1</sup>Number of violated models, <sup>2</sup>Standard deviation

## 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)
(1,202)	1:A:138:GLN:H	1:A:147:LEU:HD21	8	2.2
(1,202)	1:A:138:GLN:H	1:A:147:LEU:HD22	8	2.2
(1,202)	1:A:138:GLN:H	1:A:147:LEU:HD23	8	2.2
(1,232)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:H	9	1.78
(1,232)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:H	9	1.78
(1,232)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:H	9	1.78
(1,202)	1:A:138:GLN:H	1:A:147:LEU:HD21	17	1.75
(1,202)	1:A:138:GLN:H	1:A:147:LEU:HD22	17	1.75
(1,202)	1:A:138:GLN:H	1:A:147:LEU:HD23	17	1.75
(1,232)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:H	14	1.69
(1,232)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:H	14	1.69
(1,232)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:H	14	1.69
(1,232)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:H	2	1.65
(1,232)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:H	2	1.65
(1,232)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:H	2	1.65
(1,232)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:H	1	1.64

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,232)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:H	1	1.64
(1,232)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:H	1	1.64
(1,232)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:H	11	1.59
(1,232)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:H	11	1.59
(1,232)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:H	11	1.59
(1,232)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:H	19	1.54
(1,232)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:H	19	1.54
(1,232)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:H	19	1.54
(1,232)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:H	3	1.52
(1,232)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:H	3	1.52
(1,232)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:H	3	1.52
(1,232)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:H	15	1.51
(1,232)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:H	15	1.51
(1,232)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:H	15	1.51
(1,232)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:H	4	1.48
(1,232)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:H	4	1.48
(1,232)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:H	4	1.48
(1,202)	1:A:138:GLN:H	1:A:147:LEU:HD21	18	1.41
(1,202)	1:A:138:GLN:H	1:A:147:LEU:HD22	18	1.41
(1,202)	1:A:138:GLN:H	1:A:147:LEU:HD23	18	1.41
(1,854)	1:A:131:GLY:H	1:A:153:LEU:HD21	19	1.39
(1,854)	1:A:131:GLY:H	1:A:153:LEU:HD22	19	1.39
(1,854)	1:A:131:GLY:H	1:A:153:LEU:HD23	19	1.39
(1,202)	1:A:138:GLN:H	1:A:147:LEU:HD21	6	1.36
(1,202)	1:A:138:GLN:H	1:A:147:LEU:HD22	6	1.36
(1,202)	1:A:138:GLN:H	1:A:147:LEU:HD23	6	1.36
(1,232)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:H	10	1.35
(1,232)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:H	10	1.35
(1,232)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:H	10	1.35
(1,232)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:H	5	1.28
(1,232)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:H	5	1.28
(1,232)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:H	5	1.28
(1,232)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:H	12	1.27
(1,232)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:H	12	1.27
(1,232)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:H	12	1.27
(1,232)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:H	13	1.26
(1,232)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:H	13	1.26
(1,232)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:H	13	1.26
(1,410)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD21	17	1.14
(1,410)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD22	17	1.14
(1,410)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD23	17	1.14
(1,410)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD21	17	1.14

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,410)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD22	17	1.14
(1,410)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD23	17	1.14
(1,410)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD21	17	1.14
(1,410)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD22	17	1.14
(1,410)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD23	17	1.14
(1,410)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD21	6	1.11
(1,410)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD22	6	1.11
(1,410)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD23	6	1.11
(1,410)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD21	6	1.11
(1,410)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD22	6	1.11
(1,410)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD23	6	1.11
(1,410)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD21	6	1.11
(1,410)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD22	6	1.11
(1,410)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD23	6	1.11
(1,410)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD21	18	1.0
(1,410)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD22	18	1.0
(1,410)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD23	18	1.0
(1,410)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD21	18	1.0
(1,410)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD22	18	1.0
(1,410)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD23	18	1.0
(1,410)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD21	18	1.0
(1,410)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD22	18	1.0
(1,410)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD23	18	1.0
(1,410)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD21	8	0.92
(1,410)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD22	8	0.92
(1,410)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD23	8	0.92
(1,410)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD21	8	0.92
(1,410)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD22	8	0.92
(1,410)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD23	8	0.92
(1,410)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD21	8	0.92
(1,410)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD22	8	0.92
(1,410)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD23	8	0.92
(1,913)	1:A:137:LEU:HD11	1:A:148:ASP:H	16	0.82
(1,913)	1:A:137:LEU:HD12	1:A:148:ASP:H	16	0.82
(1,913)	1:A:137:LEU:HD13	1:A:148:ASP:H	16	0.82
(1,229)	1:A:147:LEU:H	1:A:147:LEU:HD21	17	0.61
(1,229)	1:A:147:LEU:H	1:A:147:LEU:HD22	17	0.61
(1,229)	1:A:147:LEU:H	1:A:147:LEU:HD23	17	0.61
(1,914)	1:A:147:LEU:HD11	1:A:148:ASP:H	2	0.49
(1,914)	1:A:147:LEU:HD12	1:A:148:ASP:H	2	0.49
(1,914)	1:A:147:LEU:HD13	1:A:148:ASP:H	2	0.49
(1,229)	1:A:147:LEU:H	1:A:147:LEU:HD21	18	0.46

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,229)	1:A:147:LEU:H	1:A:147:LEU:HD22	18	0.46
(1,229)	1:A:147:LEU:H	1:A:147:LEU:HD23	18	0.46
(1,913)	1:A:137:LEU:HD11	1:A:148:ASP:H	12	0.45
(1,913)	1:A:137:LEU:HD12	1:A:148:ASP:H	12	0.45
(1,913)	1:A:137:LEU:HD13	1:A:148:ASP:H	12	0.45
(1,225)	1:A:163:LEU:HD11	1:A:165:TRP:H	14	0.45
(1,225)	1:A:163:LEU:HD12	1:A:165:TRP:H	14	0.45
(1,225)	1:A:163:LEU:HD13	1:A:165:TRP:H	14	0.45
(1,913)	1:A:137:LEU:HD11	1:A:148:ASP:H	13	0.44
(1,913)	1:A:137:LEU:HD12	1:A:148:ASP:H	13	0.44
(1,913)	1:A:137:LEU:HD13	1:A:148:ASP:H	13	0.44
(1,1003)	1:A:59:GLN:H	1:A:37:ALA:H	9	0.44
(1,914)	1:A:147:LEU:HD11	1:A:148:ASP:H	9	0.43
(1,914)	1:A:147:LEU:HD12	1:A:148:ASP:H	9	0.43
(1,914)	1:A:147:LEU:HD13	1:A:148:ASP:H	9	0.43
(1,913)	1:A:137:LEU:HD11	1:A:148:ASP:H	11	0.43
(1,913)	1:A:137:LEU:HD12	1:A:148:ASP:H	11	0.43
(1,913)	1:A:137:LEU:HD13	1:A:148:ASP:H	11	0.43
(1,913)	1:A:137:LEU:HD11	1:A:148:ASP:H	15	0.43
(1,913)	1:A:137:LEU:HD12	1:A:148:ASP:H	15	0.43
(1,913)	1:A:137:LEU:HD13	1:A:148:ASP:H	15	0.43
(1,249)	1:A:81:VAL:HG11	1:A:84:ASN:H	10	0.43
(1,249)	1:A:81:VAL:HG12	1:A:84:ASN:H	10	0.43
(1,249)	1:A:81:VAL:HG13	1:A:84:ASN:H	10	0.43
(1,232)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:H	20	0.43
(1,232)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:H	20	0.43
(1,232)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:H	20	0.43
(1,225)	1:A:163:LEU:HD11	1:A:165:TRP:H	16	0.43
(1,225)	1:A:163:LEU:HD12	1:A:165:TRP:H	16	0.43
(1,225)	1:A:163:LEU:HD13	1:A:165:TRP:H	16	0.43
(1,914)	1:A:147:LEU:HD11	1:A:148:ASP:H	14	0.42
(1,914)	1:A:147:LEU:HD12	1:A:148:ASP:H	14	0.42
(1,914)	1:A:147:LEU:HD13	1:A:148:ASP:H	14	0.42
(1,914)	1:A:147:LEU:HD11	1:A:148:ASP:H	20	0.42
(1,914)	1:A:147:LEU:HD12	1:A:148:ASP:H	20	0.42
(1,914)	1:A:147:LEU:HD13	1:A:148:ASP:H	20	0.42
(1,913)	1:A:137:LEU:HD11	1:A:148:ASP:H	1	0.42
(1,913)	1:A:137:LEU:HD12	1:A:148:ASP:H	1	0.42
(1,913)	1:A:137:LEU:HD13	1:A:148:ASP:H	1	0.42
(1,913)	1:A:137:LEU:HD11	1:A:148:ASP:H	4	0.42
(1,913)	1:A:137:LEU:HD12	1:A:148:ASP:H	4	0.42
(1,913)	1:A:137:LEU:HD13	1:A:148:ASP:H	4	0.42

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,913)	1:A:137:LEU:HD11	1:A:148:ASP:H	5	0.42
(1,913)	1:A:137:LEU:HD12	1:A:148:ASP:H	5	0.42
(1,913)	1:A:137:LEU:HD13	1:A:148:ASP:H	5	0.42
(1,225)	1:A:163:LEU:HD11	1:A:165:TRP:H	1	0.42
(1,225)	1:A:163:LEU:HD12	1:A:165:TRP:H	1	0.42
(1,225)	1:A:163:LEU:HD13	1:A:165:TRP:H	1	0.42
(1,225)	1:A:163:LEU:HD11	1:A:165:TRP:H	6	0.42
(1,225)	1:A:163:LEU:HD12	1:A:165:TRP:H	6	0.42
(1,225)	1:A:163:LEU:HD13	1:A:165:TRP:H	6	0.42
(1,225)	1:A:163:LEU:HD11	1:A:165:TRP:H	12	0.42
(1,225)	1:A:163:LEU:HD12	1:A:165:TRP:H	12	0.42
(1,225)	1:A:163:LEU:HD13	1:A:165:TRP:H	12	0.42
(1,914)	1:A:147:LEU:HD11	1:A:148:ASP:H	3	0.41
(1,914)	1:A:147:LEU:HD12	1:A:148:ASP:H	3	0.41
(1,914)	1:A:147:LEU:HD13	1:A:148:ASP:H	3	0.41
(1,914)	1:A:147:LEU:HD11	1:A:148:ASP:H	16	0.41
(1,914)	1:A:147:LEU:HD12	1:A:148:ASP:H	16	0.41
(1,914)	1:A:147:LEU:HD13	1:A:148:ASP:H	16	0.41
(1,913)	1:A:137:LEU:HD11	1:A:148:ASP:H	2	0.41
(1,913)	1:A:137:LEU:HD12	1:A:148:ASP:H	2	0.41
(1,913)	1:A:137:LEU:HD13	1:A:148:ASP:H	2	0.41
(1,510)	1:A:137:LEU:HD11	1:A:150:LEU:H	8	0.41
(1,510)	1:A:137:LEU:HD12	1:A:150:LEU:H	8	0.41
(1,510)	1:A:137:LEU:HD13	1:A:150:LEU:H	8	0.41
(1,229)	1:A:147:LEU:H	1:A:147:LEU:HD21	6	0.41
(1,229)	1:A:147:LEU:H	1:A:147:LEU:HD22	6	0.41
(1,229)	1:A:147:LEU:H	1:A:147:LEU:HD23	6	0.41
(1,225)	1:A:163:LEU:HD11	1:A:165:TRP:H	5	0.41
(1,225)	1:A:163:LEU:HD12	1:A:165:TRP:H	5	0.41
(1,225)	1:A:163:LEU:HD13	1:A:165:TRP:H	5	0.41
(1,913)	1:A:137:LEU:HD11	1:A:148:ASP:H	7	0.4
(1,913)	1:A:137:LEU:HD12	1:A:148:ASP:H	7	0.4
(1,913)	1:A:137:LEU:HD13	1:A:148:ASP:H	7	0.4
(1,225)	1:A:163:LEU:HD11	1:A:165:TRP:H	17	0.4
(1,225)	1:A:163:LEU:HD12	1:A:165:TRP:H	17	0.4
(1,225)	1:A:163:LEU:HD13	1:A:165:TRP:H	17	0.4
(1,913)	1:A:137:LEU:HD11	1:A:148:ASP:H	10	0.39
(1,913)	1:A:137:LEU:HD12	1:A:148:ASP:H	10	0.39
(1,913)	1:A:137:LEU:HD13	1:A:148:ASP:H	10	0.39
(1,758)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD11	6	0.39
(1,758)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD12	6	0.39
(1,758)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD13	6	0.39

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,758)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD11	6	0.39
(1,758)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD12	6	0.39
(1,758)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD13	6	0.39
(1,758)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD11	6	0.39
(1,758)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD12	6	0.39
(1,758)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD13	6	0.39
(1,225)	1:A:163:LEU:HD11	1:A:165:TRP:H	18	0.39
(1,225)	1:A:163:LEU:HD12	1:A:165:TRP:H	18	0.39
(1,225)	1:A:163:LEU:HD13	1:A:165:TRP:H	18	0.39
(1,914)	1:A:147:LEU:HD11	1:A:148:ASP:H	8	0.38
(1,914)	1:A:147:LEU:HD12	1:A:148:ASP:H	8	0.38
(1,914)	1:A:147:LEU:HD13	1:A:148:ASP:H	8	0.38
(1,296)	1:A:137:LEU:HD11	1:A:149:LEU:H	7	0.38
(1,296)	1:A:137:LEU:HD12	1:A:149:LEU:H	7	0.38
(1,296)	1:A:137:LEU:HD13	1:A:149:LEU:H	7	0.38
(1,249)	1:A:81:VAL:HG11	1:A:84:ASN:H	1	0.38
(1,249)	1:A:81:VAL:HG12	1:A:84:ASN:H	1	0.38
(1,249)	1:A:81:VAL:HG13	1:A:84:ASN:H	1	0.38
(1,225)	1:A:163:LEU:HD11	1:A:165:TRP:H	9	0.38
(1,225)	1:A:163:LEU:HD12	1:A:165:TRP:H	9	0.38
(1,225)	1:A:163:LEU:HD13	1:A:165:TRP:H	9	0.38
(1,225)	1:A:163:LEU:HD11	1:A:165:TRP:H	10	0.38
(1,225)	1:A:163:LEU:HD12	1:A:165:TRP:H	10	0.38
(1,225)	1:A:163:LEU:HD13	1:A:165:TRP:H	10	0.38
(1,225)	1:A:163:LEU:HD11	1:A:165:TRP:H	11	0.38
(1,225)	1:A:163:LEU:HD12	1:A:165:TRP:H	11	0.38
(1,225)	1:A:163:LEU:HD13	1:A:165:TRP:H	11	0.38
(1,913)	1:A:137:LEU:HD11	1:A:148:ASP:H	3	0.37
(1,913)	1:A:137:LEU:HD12	1:A:148:ASP:H	3	0.37
(1,913)	1:A:137:LEU:HD13	1:A:148:ASP:H	3	0.37
(1,507)	1:A:37:ALA:H	1:A:57:VAL:HG21	19	0.37
(1,507)	1:A:37:ALA:H	1:A:57:VAL:HG22	19	0.37
(1,507)	1:A:37:ALA:H	1:A:57:VAL:HG23	19	0.37
(1,301)	1:A:104:HIS:H	1:A:105:LEU:HD21	16	0.37
(1,301)	1:A:104:HIS:H	1:A:105:LEU:HD22	16	0.37
(1,301)	1:A:104:HIS:H	1:A:105:LEU:HD23	16	0.37
(1,296)	1:A:137:LEU:HD11	1:A:149:LEU:H	13	0.37
(1,296)	1:A:137:LEU:HD12	1:A:149:LEU:H	13	0.37
(1,296)	1:A:137:LEU:HD13	1:A:149:LEU:H	13	0.37
(1,266)	1:A:117:VAL:HG21	1:A:118:TYR:H	15	0.37
(1,266)	1:A:117:VAL:HG22	1:A:118:TYR:H	15	0.37
(1,266)	1:A:117:VAL:HG23	1:A:118:TYR:H	15	0.37

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,225)	1:A:163:LEU:HD11	1:A:165:TRP:H	8	0.37
(1,225)	1:A:163:LEU:HD12	1:A:165:TRP:H	8	0.37
(1,225)	1:A:163:LEU:HD13	1:A:165:TRP:H	8	0.37
(1,914)	1:A:147:LEU:HD11	1:A:148:ASP:H	4	0.36
(1,914)	1:A:147:LEU:HD12	1:A:148:ASP:H	4	0.36
(1,914)	1:A:147:LEU:HD13	1:A:148:ASP:H	4	0.36
(1,913)	1:A:137:LEU:HD11	1:A:148:ASP:H	9	0.36
(1,913)	1:A:137:LEU:HD12	1:A:148:ASP:H	9	0.36
(1,913)	1:A:137:LEU:HD13	1:A:148:ASP:H	9	0.36
(1,913)	1:A:137:LEU:HD11	1:A:148:ASP:H	14	0.36
(1,913)	1:A:137:LEU:HD12	1:A:148:ASP:H	14	0.36
(1,913)	1:A:137:LEU:HD13	1:A:148:ASP:H	14	0.36
(1,664)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:117:VAL:HG11	16	0.36
(1,664)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:117:VAL:HG12	16	0.36
(1,664)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:117:VAL:HG13	16	0.36
(1,664)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:117:VAL:HG11	16	0.36
(1,664)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:117:VAL:HG12	16	0.36
(1,664)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:117:VAL:HG13	16	0.36
(1,664)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:117:VAL:HG11	16	0.36
(1,664)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:117:VAL:HG12	16	0.36
(1,664)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:117:VAL:HG13	16	0.36
(1,510)	1:A:137:LEU:HD11	1:A:150:LEU:H	18	0.36
(1,510)	1:A:137:LEU:HD12	1:A:150:LEU:H	18	0.36
(1,510)	1:A:137:LEU:HD13	1:A:150:LEU:H	18	0.36
(1,229)	1:A:147:LEU:H	1:A:147:LEU:HD21	8	0.36
(1,229)	1:A:147:LEU:H	1:A:147:LEU:HD22	8	0.36
(1,229)	1:A:147:LEU:H	1:A:147:LEU:HD23	8	0.36
(1,225)	1:A:163:LEU:HD11	1:A:165:TRP:H	3	0.36
(1,225)	1:A:163:LEU:HD12	1:A:165:TRP:H	3	0.36
(1,225)	1:A:163:LEU:HD13	1:A:165:TRP:H	3	0.36
(1,225)	1:A:163:LEU:HD11	1:A:165:TRP:H	7	0.36
(1,225)	1:A:163:LEU:HD12	1:A:165:TRP:H	7	0.36
(1,225)	1:A:163:LEU:HD13	1:A:165:TRP:H	7	0.36
(1,914)	1:A:147:LEU:HD11	1:A:148:ASP:H	13	0.35
(1,914)	1:A:147:LEU:HD12	1:A:148:ASP:H	13	0.35
(1,914)	1:A:147:LEU:HD13	1:A:148:ASP:H	13	0.35
(1,518)	1:A:117:VAL:HG11	1:A:121:LEU:HD11	6	0.35
(1,518)	1:A:117:VAL:HG11	1:A:121:LEU:HD12	6	0.35
(1,518)	1:A:117:VAL:HG11	1:A:121:LEU:HD13	6	0.35
(1,518)	1:A:117:VAL:HG12	1:A:121:LEU:HD11	6	0.35
(1,518)	1:A:117:VAL:HG12	1:A:121:LEU:HD12	6	0.35
(1,518)	1:A:117:VAL:HG12	1:A:121:LEU:HD13	6	0.35

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,518)	1:A:117:VAL:HG13	1:A:121:LEU:HD11	6	0.35
(1,518)	1:A:117:VAL:HG13	1:A:121:LEU:HD12	6	0.35
(1,518)	1:A:117:VAL:HG13	1:A:121:LEU:HD13	6	0.35
(1,225)	1:A:163:LEU:HD11	1:A:165:TRP:H	2	0.35
(1,225)	1:A:163:LEU:HD12	1:A:165:TRP:H	2	0.35
(1,225)	1:A:163:LEU:HD13	1:A:165:TRP:H	2	0.35
(1,1099)	1:A:124:GLY:O	1:A:98:ILE:H	6	0.35
(1,914)	1:A:147:LEU:HD11	1:A:148:ASP:H	7	0.34
(1,914)	1:A:147:LEU:HD12	1:A:148:ASP:H	7	0.34
(1,914)	1:A:147:LEU:HD13	1:A:148:ASP:H	7	0.34
(1,453)	1:A:118:TYR:H	1:A:121:LEU:HD21	6	0.34
(1,453)	1:A:118:TYR:H	1:A:121:LEU:HD22	6	0.34
(1,453)	1:A:118:TYR:H	1:A:121:LEU:HD23	6	0.34
(1,225)	1:A:163:LEU:HD11	1:A:165:TRP:H	15	0.34
(1,225)	1:A:163:LEU:HD12	1:A:165:TRP:H	15	0.34
(1,225)	1:A:163:LEU:HD13	1:A:165:TRP:H	15	0.34
(1,1003)	1:A:59:GLN:H	1:A:37:ALA:H	20	0.34
(1,994)	1:A:79:THR:H	1:A:54:VAL:H	1	0.33
(1,914)	1:A:147:LEU:HD11	1:A:148:ASP:H	5	0.33
(1,914)	1:A:147:LEU:HD12	1:A:148:ASP:H	5	0.33
(1,914)	1:A:147:LEU:HD13	1:A:148:ASP:H	5	0.33
(1,914)	1:A:147:LEU:HD11	1:A:148:ASP:H	6	0.33
(1,914)	1:A:147:LEU:HD12	1:A:148:ASP:H	6	0.33
(1,914)	1:A:147:LEU:HD13	1:A:148:ASP:H	6	0.33
(1,664)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:117:VAL:HG11	1	0.33
(1,664)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:117:VAL:HG12	1	0.33
(1,664)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:117:VAL:HG13	1	0.33
(1,664)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:117:VAL:HG11	1	0.33
(1,664)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:117:VAL:HG12	1	0.33
(1,664)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:117:VAL:HG13	1	0.33
(1,664)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:117:VAL:HG11	1	0.33
(1,664)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:117:VAL:HG12	1	0.33
(1,664)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:117:VAL:HG13	1	0.33
(1,664)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:117:VAL:HG11	3	0.33
(1,664)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:117:VAL:HG12	3	0.33
(1,664)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:117:VAL:HG13	3	0.33
(1,664)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:117:VAL:HG11	3	0.33
(1,664)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:117:VAL:HG12	3	0.33
(1,664)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:117:VAL:HG13	3	0.33
(1,664)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:117:VAL:HG11	3	0.33
(1,664)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:117:VAL:HG12	3	0.33
(1,664)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:117:VAL:HG13	3	0.33

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,346)	1:A:175:LEU:HD21	1:A:184:LYS:H	11	0.33
(1,346)	1:A:175:LEU:HD22	1:A:184:LYS:H	11	0.33
(1,346)	1:A:175:LEU:HD23	1:A:184:LYS:H	11	0.33
(1,225)	1:A:163:LEU:HD11	1:A:165:TRP:H	4	0.33
(1,225)	1:A:163:LEU:HD12	1:A:165:TRP:H	4	0.33
(1,225)	1:A:163:LEU:HD13	1:A:165:TRP:H	4	0.33
(1,225)	1:A:163:LEU:HD11	1:A:165:TRP:H	19	0.33
(1,225)	1:A:163:LEU:HD12	1:A:165:TRP:H	19	0.33
(1,225)	1:A:163:LEU:HD13	1:A:165:TRP:H	19	0.33
(1,914)	1:A:147:LEU:HD11	1:A:148:ASP:H	1	0.32
(1,914)	1:A:147:LEU:HD12	1:A:148:ASP:H	1	0.32
(1,914)	1:A:147:LEU:HD13	1:A:148:ASP:H	1	0.32
(1,914)	1:A:147:LEU:HD11	1:A:148:ASP:H	15	0.32
(1,914)	1:A:147:LEU:HD12	1:A:148:ASP:H	15	0.32
(1,914)	1:A:147:LEU:HD13	1:A:148:ASP:H	15	0.32
(1,914)	1:A:147:LEU:HD11	1:A:148:ASP:H	19	0.32
(1,914)	1:A:147:LEU:HD12	1:A:148:ASP:H	19	0.32
(1,914)	1:A:147:LEU:HD13	1:A:148:ASP:H	19	0.32
(1,841)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:146:ASP:H	11	0.32
(1,841)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:146:ASP:H	11	0.32
(1,841)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:146:ASP:H	11	0.32
(1,664)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:117:VAL:HG11	19	0.32
(1,664)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:117:VAL:HG12	19	0.32
(1,664)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:117:VAL:HG13	19	0.32
(1,664)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:117:VAL:HG11	19	0.32
(1,664)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:117:VAL:HG12	19	0.32
(1,664)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:117:VAL:HG13	19	0.32
(1,664)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:117:VAL:HG11	19	0.32
(1,664)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:117:VAL:HG12	19	0.32
(1,664)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:117:VAL:HG13	19	0.32
(1,507)	1:A:37:ALA:H	1:A:57:VAL:HG21	13	0.32
(1,507)	1:A:37:ALA:H	1:A:57:VAL:HG22	13	0.32
(1,507)	1:A:37:ALA:H	1:A:57:VAL:HG23	13	0.32
(1,249)	1:A:81:VAL:HG11	1:A:84:ASN:H	8	0.32
(1,249)	1:A:81:VAL:HG12	1:A:84:ASN:H	8	0.32
(1,249)	1:A:81:VAL:HG13	1:A:84:ASN:H	8	0.32
(1,225)	1:A:163:LEU:HD11	1:A:165:TRP:H	13	0.32
(1,225)	1:A:163:LEU:HD12	1:A:165:TRP:H	13	0.32
(1,225)	1:A:163:LEU:HD13	1:A:165:TRP:H	13	0.32
(1,225)	1:A:163:LEU:HD11	1:A:165:TRP:H	20	0.32
(1,225)	1:A:163:LEU:HD12	1:A:165:TRP:H	20	0.32
(1,225)	1:A:163:LEU:HD13	1:A:165:TRP:H	20	0.32

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,664)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:117:VAL:HG11	7	0.31
(1,664)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:117:VAL:HG12	7	0.31
(1,664)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:117:VAL:HG13	7	0.31
(1,664)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:117:VAL:HG11	7	0.31
(1,664)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:117:VAL:HG12	7	0.31
(1,664)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:117:VAL:HG13	7	0.31
(1,664)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:117:VAL:HG11	7	0.31
(1,664)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:117:VAL:HG12	7	0.31
(1,664)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:117:VAL:HG13	7	0.31
(1,664)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:117:VAL:HG11	8	0.31
(1,664)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:117:VAL:HG12	8	0.31
(1,664)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:117:VAL:HG13	8	0.31
(1,664)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:117:VAL:HG11	8	0.31
(1,664)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:117:VAL:HG12	8	0.31
(1,664)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:117:VAL:HG13	8	0.31
(1,664)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:117:VAL:HG11	8	0.31
(1,664)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:117:VAL:HG12	8	0.31
(1,664)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:117:VAL:HG13	8	0.31
(1,664)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:117:VAL:HG11	12	0.31
(1,664)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:117:VAL:HG12	12	0.31
(1,664)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:117:VAL:HG13	12	0.31
(1,664)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:117:VAL:HG11	12	0.31
(1,664)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:117:VAL:HG12	12	0.31
(1,664)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:117:VAL:HG13	12	0.31
(1,664)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:117:VAL:HG11	12	0.31
(1,664)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:117:VAL:HG12	12	0.31
(1,664)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:117:VAL:HG13	12	0.31
(1,498)	1:A:156:LEU:HD21	1:A:160:LEU:HD11	5	0.31
(1,498)	1:A:156:LEU:HD21	1:A:160:LEU:HD12	5	0.31
(1,498)	1:A:156:LEU:HD21	1:A:160:LEU:HD13	5	0.31
(1,498)	1:A:156:LEU:HD22	1:A:160:LEU:HD11	5	0.31
(1,498)	1:A:156:LEU:HD22	1:A:160:LEU:HD12	5	0.31
(1,498)	1:A:156:LEU:HD22	1:A:160:LEU:HD13	5	0.31
(1,498)	1:A:156:LEU:HD23	1:A:160:LEU:HD11	5	0.31
(1,498)	1:A:156:LEU:HD23	1:A:160:LEU:HD12	5	0.31
(1,498)	1:A:156:LEU:HD23	1:A:160:LEU:HD13	5	0.31
(1,269)	1:A:145:LYS:H	1:A:149:LEU:HD11	17	0.31
(1,269)	1:A:145:LYS:H	1:A:149:LEU:HD12	17	0.31
(1,269)	1:A:145:LYS:H	1:A:149:LEU:HD13	17	0.31
(1,915)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:148:ASP:H	9	0.3
(1,915)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:148:ASP:H	9	0.3
(1,915)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:148:ASP:H	9	0.3

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,701)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD11	2	0.3
(1,701)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD12	2	0.3
(1,701)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD13	2	0.3
(1,701)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD11	2	0.3
(1,701)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD12	2	0.3
(1,701)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD13	2	0.3
(1,701)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD11	2	0.3
(1,701)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD12	2	0.3
(1,701)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD13	2	0.3
(1,622)	1:A:133:ALA:H	1:A:137:LEU:H	6	0.3
(1,596)	1:A:164:ASN:H	1:A:195:LEU:H	7	0.3
(1,510)	1:A:137:LEU:HD11	1:A:150:LEU:H	6	0.3
(1,510)	1:A:137:LEU:HD12	1:A:150:LEU:H	6	0.3
(1,510)	1:A:137:LEU:HD13	1:A:150:LEU:H	6	0.3
(1,507)	1:A:37:ALA:H	1:A:57:VAL:HG21	3	0.3
(1,507)	1:A:37:ALA:H	1:A:57:VAL:HG22	3	0.3
(1,507)	1:A:37:ALA:H	1:A:57:VAL:HG23	3	0.3
(1,303)	1:A:91:VAL:H	1:A:93:ASP:H	20	0.3
(1,296)	1:A:137:LEU:HD11	1:A:149:LEU:H	16	0.3
(1,296)	1:A:137:LEU:HD12	1:A:149:LEU:H	16	0.3
(1,296)	1:A:137:LEU:HD13	1:A:149:LEU:H	16	0.3
(1,266)	1:A:117:VAL:HG21	1:A:118:TYR:H	9	0.3
(1,266)	1:A:117:VAL:HG22	1:A:118:TYR:H	9	0.3
(1,266)	1:A:117:VAL:HG23	1:A:118:TYR:H	9	0.3
(1,1070)	1:A:108:SER:O	1:A:112:GLN:H	19	0.3
(1,914)	1:A:147:LEU:HD11	1:A:148:ASP:H	18	0.29
(1,914)	1:A:147:LEU:HD12	1:A:148:ASP:H	18	0.29
(1,914)	1:A:147:LEU:HD13	1:A:148:ASP:H	18	0.29
(1,622)	1:A:133:ALA:H	1:A:137:LEU:H	18	0.29
(1,570)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:145:LYS:H	18	0.29
(1,570)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:145:LYS:H	18	0.29
(1,570)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:145:LYS:H	18	0.29
(1,510)	1:A:137:LEU:HD11	1:A:150:LEU:H	16	0.29
(1,510)	1:A:137:LEU:HD12	1:A:150:LEU:H	16	0.29
(1,510)	1:A:137:LEU:HD13	1:A:150:LEU:H	16	0.29
(1,382)	1:A:24:VAL:H	1:A:167:ILE:HD11	5	0.29
(1,382)	1:A:24:VAL:H	1:A:167:ILE:HD12	5	0.29
(1,382)	1:A:24:VAL:H	1:A:167:ILE:HD13	5	0.29
(1,249)	1:A:81:VAL:HG11	1:A:84:ASN:H	20	0.29
(1,249)	1:A:81:VAL:HG12	1:A:84:ASN:H	20	0.29
(1,249)	1:A:81:VAL:HG13	1:A:84:ASN:H	20	0.29
(1,203)	1:A:149:LEU:H	1:A:150:LEU:HD21	6	0.29

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,203)	1:A:149:LEU:H	1:A:150:LEU:HD22	6	0.29
(1,203)	1:A:149:LEU:H	1:A:150:LEU:HD23	6	0.29
(1,168)	1:A:137:LEU:H	1:A:150:LEU:HD21	8	0.29
(1,168)	1:A:137:LEU:H	1:A:150:LEU:HD22	8	0.29
(1,168)	1:A:137:LEU:H	1:A:150:LEU:HD23	8	0.29
(1,1034)	1:A:23:SER:O	1:A:27:GLN:H	3	0.29
(1,988)	1:A:117:VAL:HG21	1:A:121:LEU:H	2	0.28
(1,988)	1:A:117:VAL:HG22	1:A:121:LEU:H	2	0.28
(1,988)	1:A:117:VAL:HG23	1:A:121:LEU:H	2	0.28
(1,914)	1:A:147:LEU:HD11	1:A:148:ASP:H	10	0.28
(1,914)	1:A:147:LEU:HD12	1:A:148:ASP:H	10	0.28
(1,914)	1:A:147:LEU:HD13	1:A:148:ASP:H	10	0.28
(1,758)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD11	17	0.28
(1,758)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD12	17	0.28
(1,758)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD13	17	0.28
(1,758)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD11	17	0.28
(1,758)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD12	17	0.28
(1,758)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD13	17	0.28
(1,758)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD11	17	0.28
(1,758)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD12	17	0.28
(1,758)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD13	17	0.28
(1,654)	1:A:60:SER:H	1:A:83:SER:H	17	0.28
(1,596)	1:A:164:ASN:H	1:A:195:LEU:H	1	0.28
(1,510)	1:A:137:LEU:HD11	1:A:150:LEU:H	7	0.28
(1,510)	1:A:137:LEU:HD12	1:A:150:LEU:H	7	0.28
(1,510)	1:A:137:LEU:HD13	1:A:150:LEU:H	7	0.28
(1,507)	1:A:37:ALA:H	1:A:57:VAL:HG21	9	0.28
(1,507)	1:A:37:ALA:H	1:A:57:VAL:HG22	9	0.28
(1,507)	1:A:37:ALA:H	1:A:57:VAL:HG23	9	0.28
(1,334)	1:A:90:ILE:H	1:A:91:VAL:HG21	20	0.28
(1,334)	1:A:90:ILE:H	1:A:91:VAL:HG22	20	0.28
(1,334)	1:A:90:ILE:H	1:A:91:VAL:HG23	20	0.28
(1,303)	1:A:91:VAL:H	1:A:93:ASP:H	19	0.28
(1,296)	1:A:137:LEU:HD11	1:A:149:LEU:H	18	0.28
(1,296)	1:A:137:LEU:HD12	1:A:149:LEU:H	18	0.28
(1,296)	1:A:137:LEU:HD13	1:A:149:LEU:H	18	0.28
(1,266)	1:A:117:VAL:HG21	1:A:118:TYR:H	3	0.28
(1,266)	1:A:117:VAL:HG22	1:A:118:TYR:H	3	0.28
(1,266)	1:A:117:VAL:HG23	1:A:118:TYR:H	3	0.28
(1,266)	1:A:117:VAL:HG21	1:A:118:TYR:H	18	0.28
(1,266)	1:A:117:VAL:HG22	1:A:118:TYR:H	18	0.28
(1,266)	1:A:117:VAL:HG23	1:A:118:TYR:H	18	0.28

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,254)	1:A:57:VAL:HG11	1:A:83:SER:H	14	0.28
(1,254)	1:A:57:VAL:HG12	1:A:83:SER:H	14	0.28
(1,254)	1:A:57:VAL:HG13	1:A:83:SER:H	14	0.28
(1,249)	1:A:81:VAL:HG11	1:A:84:ASN:H	9	0.28
(1,249)	1:A:81:VAL:HG12	1:A:84:ASN:H	9	0.28
(1,249)	1:A:81:VAL:HG13	1:A:84:ASN:H	9	0.28
(1,1099)	1:A:124:GLY:O	1:A:98:ILE:H	7	0.28
(1,915)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:148:ASP:H	14	0.27
(1,915)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:148:ASP:H	14	0.27
(1,915)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:148:ASP:H	14	0.27
(1,814)	1:A:147:LEU:H	1:A:150:LEU:HD11	6	0.27
(1,814)	1:A:147:LEU:H	1:A:150:LEU:HD12	6	0.27
(1,814)	1:A:147:LEU:H	1:A:150:LEU:HD13	6	0.27
(1,811)	1:A:146:ASP:H	1:A:147:LEU:HD11	16	0.27
(1,811)	1:A:146:ASP:H	1:A:147:LEU:HD12	16	0.27
(1,811)	1:A:146:ASP:H	1:A:147:LEU:HD13	16	0.27
(1,732)	1:A:147:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD21	20	0.27
(1,732)	1:A:147:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD22	20	0.27
(1,732)	1:A:147:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD23	20	0.27
(1,732)	1:A:147:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD21	20	0.27
(1,732)	1:A:147:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD22	20	0.27
(1,732)	1:A:147:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD23	20	0.27
(1,732)	1:A:147:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD21	20	0.27
(1,732)	1:A:147:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD22	20	0.27
(1,732)	1:A:147:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD23	20	0.27
(1,624)	1:A:133:ALA:H	1:A:135:GLU:H	19	0.27
(1,569)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD21	20	0.27
(1,569)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD22	20	0.27
(1,569)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD23	20	0.27
(1,569)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD21	20	0.27
(1,569)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD22	20	0.27
(1,569)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD23	20	0.27
(1,569)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD21	20	0.27
(1,569)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD22	20	0.27
(1,569)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD23	20	0.27
(1,382)	1:A:24:VAL:H	1:A:167:ILE:HD11	11	0.27
(1,382)	1:A:24:VAL:H	1:A:167:ILE:HD12	11	0.27
(1,382)	1:A:24:VAL:H	1:A:167:ILE:HD13	11	0.27
(1,269)	1:A:145:LYS:H	1:A:149:LEU:HD11	18	0.27
(1,269)	1:A:145:LYS:H	1:A:149:LEU:HD12	18	0.27
(1,269)	1:A:145:LYS:H	1:A:149:LEU:HD13	18	0.27
(1,266)	1:A:117:VAL:HG21	1:A:118:TYR:H	6	0.27

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,266)	1:A:117:VAL:HG22	1:A:118:TYR:H	6	0.27
(1,266)	1:A:117:VAL:HG23	1:A:118:TYR:H	6	0.27
(1,266)	1:A:117:VAL:HG21	1:A:118:TYR:H	13	0.27
(1,266)	1:A:117:VAL:HG22	1:A:118:TYR:H	13	0.27
(1,266)	1:A:117:VAL:HG23	1:A:118:TYR:H	13	0.27
(1,250)	1:A:57:VAL:HG21	1:A:84:ASN:H	5	0.27
(1,250)	1:A:57:VAL:HG22	1:A:84:ASN:H	5	0.27
(1,250)	1:A:57:VAL:HG23	1:A:84:ASN:H	5	0.27
(1,250)	1:A:57:VAL:HG21	1:A:84:ASN:H	20	0.27
(1,250)	1:A:57:VAL:HG22	1:A:84:ASN:H	20	0.27
(1,250)	1:A:57:VAL:HG23	1:A:84:ASN:H	20	0.27
(1,226)	1:A:57:VAL:HG11	1:A:82:GLN:H	20	0.27
(1,226)	1:A:57:VAL:HG12	1:A:82:GLN:H	20	0.27
(1,226)	1:A:57:VAL:HG13	1:A:82:GLN:H	20	0.27
(1,1105)	1:A:102:PHE:H	1:A:128:ILE:O	18	0.27
(1,1105)	1:A:102:PHE:H	1:A:128:ILE:O	19	0.27
(1,108)	1:A:145:LYS:H	1:A:148:ASP:H	19	0.27
(1,936)	1:A:153:LEU:HD21	1:A:157:GLN:H	17	0.26
(1,936)	1:A:153:LEU:HD22	1:A:157:GLN:H	17	0.26
(1,936)	1:A:153:LEU:HD23	1:A:157:GLN:H	17	0.26
(1,914)	1:A:147:LEU:HD11	1:A:148:ASP:H	11	0.26
(1,914)	1:A:147:LEU:HD12	1:A:148:ASP:H	11	0.26
(1,914)	1:A:147:LEU:HD13	1:A:148:ASP:H	11	0.26
(1,914)	1:A:147:LEU:HD11	1:A:148:ASP:H	17	0.26
(1,914)	1:A:147:LEU:HD12	1:A:148:ASP:H	17	0.26
(1,914)	1:A:147:LEU:HD13	1:A:148:ASP:H	17	0.26
(1,841)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:146:ASP:H	15	0.26
(1,841)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:146:ASP:H	15	0.26
(1,841)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:146:ASP:H	15	0.26
(1,811)	1:A:146:ASP:H	1:A:147:LEU:HD11	13	0.26
(1,811)	1:A:146:ASP:H	1:A:147:LEU:HD12	13	0.26
(1,811)	1:A:146:ASP:H	1:A:147:LEU:HD13	13	0.26
(1,758)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD11	18	0.26
(1,758)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD12	18	0.26
(1,758)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD13	18	0.26
(1,758)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD11	18	0.26
(1,758)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD12	18	0.26
(1,758)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD13	18	0.26
(1,758)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD11	18	0.26
(1,758)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD12	18	0.26
(1,758)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD13	18	0.26
(1,664)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:117:VAL:HG11	2	0.26

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,664)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:117:VAL:HG12	2	0.26
(1,664)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:117:VAL:HG13	2	0.26
(1,664)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:117:VAL:HG11	2	0.26
(1,664)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:117:VAL:HG12	2	0.26
(1,664)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:117:VAL:HG13	2	0.26
(1,664)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:117:VAL:HG11	2	0.26
(1,664)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:117:VAL:HG12	2	0.26
(1,664)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:117:VAL:HG13	2	0.26
(1,664)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:117:VAL:HG11	14	0.26
(1,664)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:117:VAL:HG12	14	0.26
(1,664)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:117:VAL:HG13	14	0.26
(1,664)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:117:VAL:HG11	14	0.26
(1,664)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:117:VAL:HG12	14	0.26
(1,664)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:117:VAL:HG13	14	0.26
(1,664)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:117:VAL:HG11	14	0.26
(1,664)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:117:VAL:HG12	14	0.26
(1,664)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:117:VAL:HG13	14	0.26
(1,623)	1:A:133:ALA:H	1:A:136:GLN:H	18	0.26
(1,510)	1:A:137:LEU:HD11	1:A:150:LEU:H	17	0.26
(1,510)	1:A:137:LEU:HD12	1:A:150:LEU:H	17	0.26
(1,510)	1:A:137:LEU:HD13	1:A:150:LEU:H	17	0.26
(1,507)	1:A:37:ALA:H	1:A:57:VAL:HG21	7	0.26
(1,507)	1:A:37:ALA:H	1:A:57:VAL:HG22	7	0.26
(1,507)	1:A:37:ALA:H	1:A:57:VAL:HG23	7	0.26
(1,296)	1:A:137:LEU:HD11	1:A:149:LEU:H	5	0.26
(1,296)	1:A:137:LEU:HD12	1:A:149:LEU:H	5	0.26
(1,296)	1:A:137:LEU:HD13	1:A:149:LEU:H	5	0.26
(1,296)	1:A:137:LEU:HD11	1:A:149:LEU:H	12	0.26
(1,296)	1:A:137:LEU:HD12	1:A:149:LEU:H	12	0.26
(1,296)	1:A:137:LEU:HD13	1:A:149:LEU:H	12	0.26
(1,266)	1:A:117:VAL:HG21	1:A:118:TYR:H	11	0.26
(1,266)	1:A:117:VAL:HG22	1:A:118:TYR:H	11	0.26
(1,266)	1:A:117:VAL:HG23	1:A:118:TYR:H	11	0.26
(1,250)	1:A:57:VAL:HG21	1:A:84:ASN:H	9	0.26
(1,250)	1:A:57:VAL:HG22	1:A:84:ASN:H	9	0.26
(1,250)	1:A:57:VAL:HG23	1:A:84:ASN:H	9	0.26
(1,1084)	1:A:154:GLU:O	1:A:158:SER:H	14	0.26
(1,936)	1:A:153:LEU:HD21	1:A:157:GLN:H	5	0.25
(1,936)	1:A:153:LEU:HD22	1:A:157:GLN:H	5	0.25
(1,936)	1:A:153:LEU:HD23	1:A:157:GLN:H	5	0.25
(1,934)	1:A:137:LEU:HD11	1:A:145:LYS:H	6	0.25
(1,934)	1:A:137:LEU:HD12	1:A:145:LYS:H	6	0.25

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,934)	1:A:137:LEU:HD13	1:A:145:LYS:H	6	0.25
(1,848)	1:A:91:VAL:HG21	1:A:95:TRP:HE1	15	0.25
(1,848)	1:A:91:VAL:HG22	1:A:95:TRP:HE1	15	0.25
(1,848)	1:A:91:VAL:HG23	1:A:95:TRP:HE1	15	0.25
(1,841)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:146:ASP:H	1	0.25
(1,841)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:146:ASP:H	1	0.25
(1,841)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:146:ASP:H	1	0.25
(1,822)	1:A:90:ILE:HD11	1:A:116:LYS:H	4	0.25
(1,822)	1:A:90:ILE:HD12	1:A:116:LYS:H	4	0.25
(1,822)	1:A:90:ILE:HD13	1:A:116:LYS:H	4	0.25
(1,664)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:117:VAL:HG11	4	0.25
(1,664)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:117:VAL:HG12	4	0.25
(1,664)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:117:VAL:HG13	4	0.25
(1,664)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:117:VAL:HG11	4	0.25
(1,664)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:117:VAL:HG12	4	0.25
(1,664)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:117:VAL:HG13	4	0.25
(1,664)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:117:VAL:HG11	4	0.25
(1,664)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:117:VAL:HG12	4	0.25
(1,664)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:117:VAL:HG13	4	0.25
(1,596)	1:A:164:ASN:H	1:A:195:LEU:H	2	0.25
(1,572)	1:A:21:LEU:HD21	1:A:28:ILE:HD11	13	0.25
(1,572)	1:A:21:LEU:HD21	1:A:28:ILE:HD12	13	0.25
(1,572)	1:A:21:LEU:HD21	1:A:28:ILE:HD13	13	0.25
(1,572)	1:A:21:LEU:HD22	1:A:28:ILE:HD11	13	0.25
(1,572)	1:A:21:LEU:HD22	1:A:28:ILE:HD12	13	0.25
(1,572)	1:A:21:LEU:HD22	1:A:28:ILE:HD13	13	0.25
(1,572)	1:A:21:LEU:HD23	1:A:28:ILE:HD11	13	0.25
(1,572)	1:A:21:LEU:HD23	1:A:28:ILE:HD12	13	0.25
(1,572)	1:A:21:LEU:HD23	1:A:28:ILE:HD13	13	0.25
(1,572)	1:A:21:LEU:HD21	1:A:28:ILE:HD11	16	0.25
(1,572)	1:A:21:LEU:HD21	1:A:28:ILE:HD12	16	0.25
(1,572)	1:A:21:LEU:HD21	1:A:28:ILE:HD13	16	0.25
(1,572)	1:A:21:LEU:HD22	1:A:28:ILE:HD11	16	0.25
(1,572)	1:A:21:LEU:HD22	1:A:28:ILE:HD12	16	0.25
(1,572)	1:A:21:LEU:HD22	1:A:28:ILE:HD13	16	0.25
(1,572)	1:A:21:LEU:HD23	1:A:28:ILE:HD11	16	0.25
(1,572)	1:A:21:LEU:HD23	1:A:28:ILE:HD12	16	0.25
(1,572)	1:A:21:LEU:HD23	1:A:28:ILE:HD13	16	0.25
(1,569)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD21	14	0.25
(1,569)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD22	14	0.25
(1,569)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD23	14	0.25
(1,569)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD21	14	0.25

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,569)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD22	14	0.25
(1,569)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD23	14	0.25
(1,569)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD21	14	0.25
(1,569)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD22	14	0.25
(1,569)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD23	14	0.25
(1,535)	1:A:74:LYS:H	1:A:76:VAL:HG11	19	0.25
(1,535)	1:A:74:LYS:H	1:A:76:VAL:HG12	19	0.25
(1,535)	1:A:74:LYS:H	1:A:76:VAL:HG13	19	0.25
(1,518)	1:A:117:VAL:HG11	1:A:121:LEU:HD11	1	0.25
(1,518)	1:A:117:VAL:HG11	1:A:121:LEU:HD12	1	0.25
(1,518)	1:A:117:VAL:HG11	1:A:121:LEU:HD13	1	0.25
(1,518)	1:A:117:VAL:HG12	1:A:121:LEU:HD11	1	0.25
(1,518)	1:A:117:VAL:HG12	1:A:121:LEU:HD12	1	0.25
(1,518)	1:A:117:VAL:HG12	1:A:121:LEU:HD13	1	0.25
(1,518)	1:A:117:VAL:HG13	1:A:121:LEU:HD11	1	0.25
(1,518)	1:A:117:VAL:HG13	1:A:121:LEU:HD12	1	0.25
(1,518)	1:A:117:VAL:HG13	1:A:121:LEU:HD13	1	0.25
(1,507)	1:A:37:ALA:H	1:A:57:VAL:HG21	4	0.25
(1,507)	1:A:37:ALA:H	1:A:57:VAL:HG22	4	0.25
(1,507)	1:A:37:ALA:H	1:A:57:VAL:HG23	4	0.25
(1,453)	1:A:118:TYR:H	1:A:121:LEU:HD21	10	0.25
(1,453)	1:A:118:TYR:H	1:A:121:LEU:HD22	10	0.25
(1,453)	1:A:118:TYR:H	1:A:121:LEU:HD23	10	0.25
(1,382)	1:A:24:VAL:H	1:A:167:ILE:HD11	18	0.25
(1,382)	1:A:24:VAL:H	1:A:167:ILE:HD12	18	0.25
(1,382)	1:A:24:VAL:H	1:A:167:ILE:HD13	18	0.25
(1,346)	1:A:175:LEU:HD21	1:A:184:LYS:H	20	0.25
(1,346)	1:A:175:LEU:HD22	1:A:184:LYS:H	20	0.25
(1,346)	1:A:175:LEU:HD23	1:A:184:LYS:H	20	0.25
(1,296)	1:A:137:LEU:HD11	1:A:149:LEU:H	17	0.25
(1,296)	1:A:137:LEU:HD12	1:A:149:LEU:H	17	0.25
(1,296)	1:A:137:LEU:HD13	1:A:149:LEU:H	17	0.25
(1,266)	1:A:117:VAL:HG21	1:A:118:TYR:H	10	0.25
(1,266)	1:A:117:VAL:HG22	1:A:118:TYR:H	10	0.25
(1,266)	1:A:117:VAL:HG23	1:A:118:TYR:H	10	0.25
(1,1084)	1:A:154:GLU:O	1:A:158:SER:H	2	0.25
(1,994)	1:A:79:THR:H	1:A:54:VAL:H	2	0.24
(1,924)	1:A:27:GLN:H	1:A:126:VAL:HG21	11	0.24
(1,924)	1:A:27:GLN:H	1:A:126:VAL:HG22	11	0.24
(1,924)	1:A:27:GLN:H	1:A:126:VAL:HG23	11	0.24
(1,910)	1:A:81:VAL:HG11	1:A:82:GLN:H	8	0.24
(1,910)	1:A:81:VAL:HG12	1:A:82:GLN:H	8	0.24

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,910)	1:A:81:VAL:HG13	1:A:82:GLN:H	8	0.24
(1,897)	1:A:163:LEU:HD21	1:A:193:GLN:H	6	0.24
(1,897)	1:A:163:LEU:HD22	1:A:193:GLN:H	6	0.24
(1,897)	1:A:163:LEU:HD23	1:A:193:GLN:H	6	0.24
(1,827)	1:A:34:LEU:HD11	1:A:36:LEU:H	1	0.24
(1,827)	1:A:34:LEU:HD12	1:A:36:LEU:H	1	0.24
(1,827)	1:A:34:LEU:HD13	1:A:36:LEU:H	1	0.24
(1,811)	1:A:146:ASP:H	1:A:147:LEU:HD11	7	0.24
(1,811)	1:A:146:ASP:H	1:A:147:LEU:HD12	7	0.24
(1,811)	1:A:146:ASP:H	1:A:147:LEU:HD13	7	0.24
(1,535)	1:A:74:LYS:H	1:A:76:VAL:HG11	20	0.24
(1,535)	1:A:74:LYS:H	1:A:76:VAL:HG12	20	0.24
(1,535)	1:A:74:LYS:H	1:A:76:VAL:HG13	20	0.24
(1,453)	1:A:118:TYR:H	1:A:121:LEU:HD21	15	0.24
(1,453)	1:A:118:TYR:H	1:A:121:LEU:HD22	15	0.24
(1,453)	1:A:118:TYR:H	1:A:121:LEU:HD23	15	0.24
(1,343)	1:A:137:LEU:HD11	1:A:146:ASP:H	17	0.24
(1,343)	1:A:137:LEU:HD12	1:A:146:ASP:H	17	0.24
(1,343)	1:A:137:LEU:HD13	1:A:146:ASP:H	17	0.24
(1,334)	1:A:90:ILE:H	1:A:91:VAL:HG21	10	0.24
(1,334)	1:A:90:ILE:H	1:A:91:VAL:HG22	10	0.24
(1,334)	1:A:90:ILE:H	1:A:91:VAL:HG23	10	0.24
(1,334)	1:A:90:ILE:H	1:A:91:VAL:HG21	19	0.24
(1,334)	1:A:90:ILE:H	1:A:91:VAL:HG22	19	0.24
(1,334)	1:A:90:ILE:H	1:A:91:VAL:HG23	19	0.24
(1,266)	1:A:117:VAL:HG21	1:A:118:TYR:H	5	0.24
(1,266)	1:A:117:VAL:HG22	1:A:118:TYR:H	5	0.24
(1,266)	1:A:117:VAL:HG23	1:A:118:TYR:H	5	0.24
(1,226)	1:A:57:VAL:HG11	1:A:82:GLN:H	10	0.24
(1,226)	1:A:57:VAL:HG12	1:A:82:GLN:H	10	0.24
(1,226)	1:A:57:VAL:HG13	1:A:82:GLN:H	10	0.24
(1,1084)	1:A:154:GLU:O	1:A:158:SER:H	11	0.24
(1,1084)	1:A:154:GLU:O	1:A:158:SER:H	15	0.24
(1,108)	1:A:145:LYS:H	1:A:148:ASP:H	5	0.24
(1,1070)	1:A:108:SER:O	1:A:112:GLN:H	3	0.24
(1,986)	1:A:138:GLN:H	1:A:147:LEU:HD11	17	0.23
(1,986)	1:A:138:GLN:H	1:A:147:LEU:HD12	17	0.23
(1,986)	1:A:138:GLN:H	1:A:147:LEU:HD13	17	0.23
(1,967)	1:A:146:ASP:H	1:A:149:LEU:HD11	18	0.23
(1,967)	1:A:146:ASP:H	1:A:149:LEU:HD12	18	0.23
(1,967)	1:A:146:ASP:H	1:A:149:LEU:HD13	18	0.23
(1,936)	1:A:153:LEU:HD21	1:A:157:GLN:H	12	0.23

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,936)	1:A:153:LEU:HD22	1:A:157:GLN:H	12	0.23
(1,936)	1:A:153:LEU:HD23	1:A:157:GLN:H	12	0.23
(1,914)	1:A:147:LEU:HD11	1:A:148:ASP:H	12	0.23
(1,914)	1:A:147:LEU:HD12	1:A:148:ASP:H	12	0.23
(1,914)	1:A:147:LEU:HD13	1:A:148:ASP:H	12	0.23
(1,910)	1:A:81:VAL:HG11	1:A:82:GLN:H	9	0.23
(1,910)	1:A:81:VAL:HG12	1:A:82:GLN:H	9	0.23
(1,910)	1:A:81:VAL:HG13	1:A:82:GLN:H	9	0.23
(1,855)	1:A:131:GLY:H	1:A:190:LEU:HD11	19	0.23
(1,855)	1:A:131:GLY:H	1:A:190:LEU:HD12	19	0.23
(1,855)	1:A:131:GLY:H	1:A:190:LEU:HD13	19	0.23
(1,841)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:146:ASP:H	19	0.23
(1,841)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:146:ASP:H	19	0.23
(1,841)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:146:ASP:H	19	0.23
(1,814)	1:A:147:LEU:H	1:A:150:LEU:HD11	17	0.23
(1,814)	1:A:147:LEU:H	1:A:150:LEU:HD12	17	0.23
(1,814)	1:A:147:LEU:H	1:A:150:LEU:HD13	17	0.23
(1,811)	1:A:146:ASP:H	1:A:147:LEU:HD11	5	0.23
(1,811)	1:A:146:ASP:H	1:A:147:LEU:HD12	5	0.23
(1,811)	1:A:146:ASP:H	1:A:147:LEU:HD13	5	0.23
(1,810)	1:A:136:GLN:H	1:A:147:LEU:HD11	10	0.23
(1,810)	1:A:136:GLN:H	1:A:147:LEU:HD12	10	0.23
(1,810)	1:A:136:GLN:H	1:A:147:LEU:HD13	10	0.23
(1,755)	1:A:70:LEU:HD11	1:A:78:ILE:HD11	19	0.23
(1,755)	1:A:70:LEU:HD11	1:A:78:ILE:HD12	19	0.23
(1,755)	1:A:70:LEU:HD11	1:A:78:ILE:HD13	19	0.23
(1,755)	1:A:70:LEU:HD12	1:A:78:ILE:HD11	19	0.23
(1,755)	1:A:70:LEU:HD12	1:A:78:ILE:HD12	19	0.23
(1,755)	1:A:70:LEU:HD12	1:A:78:ILE:HD13	19	0.23
(1,755)	1:A:70:LEU:HD13	1:A:78:ILE:HD11	19	0.23
(1,755)	1:A:70:LEU:HD13	1:A:78:ILE:HD12	19	0.23
(1,755)	1:A:70:LEU:HD13	1:A:78:ILE:HD13	19	0.23
(1,704)	1:A:105:LEU:HD21	1:A:109:LEU:HD21	16	0.23
(1,704)	1:A:105:LEU:HD21	1:A:109:LEU:HD22	16	0.23
(1,704)	1:A:105:LEU:HD21	1:A:109:LEU:HD23	16	0.23
(1,704)	1:A:105:LEU:HD22	1:A:109:LEU:HD21	16	0.23
(1,704)	1:A:105:LEU:HD22	1:A:109:LEU:HD22	16	0.23
(1,704)	1:A:105:LEU:HD22	1:A:109:LEU:HD23	16	0.23
(1,704)	1:A:105:LEU:HD23	1:A:109:LEU:HD21	16	0.23
(1,704)	1:A:105:LEU:HD23	1:A:109:LEU:HD22	16	0.23
(1,704)	1:A:105:LEU:HD23	1:A:109:LEU:HD23	16	0.23
(1,664)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:117:VAL:HG11	20	0.23

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,664)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:117:VAL:HG12	20	0.23
(1,664)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:117:VAL:HG13	20	0.23
(1,664)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:117:VAL:HG11	20	0.23
(1,664)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:117:VAL:HG12	20	0.23
(1,664)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:117:VAL:HG13	20	0.23
(1,664)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:117:VAL:HG11	20	0.23
(1,664)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:117:VAL:HG12	20	0.23
(1,664)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:117:VAL:HG13	20	0.23
(1,572)	1:A:21:LEU:HD21	1:A:28:ILE:HD11	1	0.23
(1,572)	1:A:21:LEU:HD21	1:A:28:ILE:HD12	1	0.23
(1,572)	1:A:21:LEU:HD21	1:A:28:ILE:HD13	1	0.23
(1,572)	1:A:21:LEU:HD22	1:A:28:ILE:HD11	1	0.23
(1,572)	1:A:21:LEU:HD22	1:A:28:ILE:HD12	1	0.23
(1,572)	1:A:21:LEU:HD22	1:A:28:ILE:HD13	1	0.23
(1,572)	1:A:21:LEU:HD23	1:A:28:ILE:HD11	1	0.23
(1,572)	1:A:21:LEU:HD23	1:A:28:ILE:HD12	1	0.23
(1,572)	1:A:21:LEU:HD23	1:A:28:ILE:HD13	1	0.23
(1,569)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD21	8	0.23
(1,569)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD22	8	0.23
(1,569)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD23	8	0.23
(1,569)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD21	8	0.23
(1,569)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD22	8	0.23
(1,569)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD23	8	0.23
(1,569)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD21	8	0.23
(1,569)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD22	8	0.23
(1,569)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD23	8	0.23
(1,569)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD21	11	0.23
(1,569)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD22	11	0.23
(1,569)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD23	11	0.23
(1,569)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD21	11	0.23
(1,569)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD22	11	0.23
(1,569)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD23	11	0.23
(1,569)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD21	11	0.23
(1,569)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD22	11	0.23
(1,569)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD23	11	0.23
(1,563)	1:A:50:LEU:HD11	1:A:54:VAL:HG21	10	0.23
(1,563)	1:A:50:LEU:HD11	1:A:54:VAL:HG22	10	0.23
(1,563)	1:A:50:LEU:HD11	1:A:54:VAL:HG23	10	0.23
(1,563)	1:A:50:LEU:HD12	1:A:54:VAL:HG21	10	0.23
(1,563)	1:A:50:LEU:HD12	1:A:54:VAL:HG22	10	0.23
(1,563)	1:A:50:LEU:HD12	1:A:54:VAL:HG23	10	0.23
(1,563)	1:A:50:LEU:HD13	1:A:54:VAL:HG21	10	0.23

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,563)	1:A:50:LEU:HD13	1:A:54:VAL:HG22	10	0.23
(1,563)	1:A:50:LEU:HD13	1:A:54:VAL:HG23	10	0.23
(1,518)	1:A:117:VAL:HG11	1:A:121:LEU:HD11	3	0.23
(1,518)	1:A:117:VAL:HG11	1:A:121:LEU:HD12	3	0.23
(1,518)	1:A:117:VAL:HG11	1:A:121:LEU:HD13	3	0.23
(1,518)	1:A:117:VAL:HG12	1:A:121:LEU:HD11	3	0.23
(1,518)	1:A:117:VAL:HG12	1:A:121:LEU:HD12	3	0.23
(1,518)	1:A:117:VAL:HG12	1:A:121:LEU:HD13	3	0.23
(1,518)	1:A:117:VAL:HG13	1:A:121:LEU:HD11	3	0.23
(1,518)	1:A:117:VAL:HG13	1:A:121:LEU:HD12	3	0.23
(1,518)	1:A:117:VAL:HG13	1:A:121:LEU:HD13	3	0.23
(1,507)	1:A:37:ALA:H	1:A:57:VAL:HG21	20	0.23
(1,507)	1:A:37:ALA:H	1:A:57:VAL:HG22	20	0.23
(1,507)	1:A:37:ALA:H	1:A:57:VAL:HG23	20	0.23
(1,408)	1:A:163:LEU:HD21	1:A:195:LEU:HD21	20	0.23
(1,408)	1:A:163:LEU:HD21	1:A:195:LEU:HD22	20	0.23
(1,408)	1:A:163:LEU:HD21	1:A:195:LEU:HD23	20	0.23
(1,408)	1:A:163:LEU:HD22	1:A:195:LEU:HD21	20	0.23
(1,408)	1:A:163:LEU:HD22	1:A:195:LEU:HD22	20	0.23
(1,408)	1:A:163:LEU:HD22	1:A:195:LEU:HD23	20	0.23
(1,408)	1:A:163:LEU:HD23	1:A:195:LEU:HD21	20	0.23
(1,408)	1:A:163:LEU:HD23	1:A:195:LEU:HD22	20	0.23
(1,408)	1:A:163:LEU:HD23	1:A:195:LEU:HD23	20	0.23
(1,346)	1:A:175:LEU:HD21	1:A:184:LYS:H	13	0.23
(1,346)	1:A:175:LEU:HD22	1:A:184:LYS:H	13	0.23
(1,346)	1:A:175:LEU:HD23	1:A:184:LYS:H	13	0.23
(1,343)	1:A:137:LEU:HD11	1:A:146:ASP:H	18	0.23
(1,343)	1:A:137:LEU:HD12	1:A:146:ASP:H	18	0.23
(1,343)	1:A:137:LEU:HD13	1:A:146:ASP:H	18	0.23
(1,266)	1:A:117:VAL:HG21	1:A:118:TYR:H	2	0.23
(1,266)	1:A:117:VAL:HG22	1:A:118:TYR:H	2	0.23
(1,266)	1:A:117:VAL:HG23	1:A:118:TYR:H	2	0.23
(1,266)	1:A:117:VAL:HG21	1:A:118:TYR:H	17	0.23
(1,266)	1:A:117:VAL:HG22	1:A:118:TYR:H	17	0.23
(1,266)	1:A:117:VAL:HG23	1:A:118:TYR:H	17	0.23
(1,250)	1:A:57:VAL:HG21	1:A:84:ASN:H	8	0.23
(1,250)	1:A:57:VAL:HG22	1:A:84:ASN:H	8	0.23
(1,250)	1:A:57:VAL:HG23	1:A:84:ASN:H	8	0.23
(1,230)	1:A:147:LEU:H	1:A:150:LEU:HD21	19	0.23
(1,230)	1:A:147:LEU:H	1:A:150:LEU:HD22	19	0.23
(1,230)	1:A:147:LEU:H	1:A:150:LEU:HD23	19	0.23
(1,1105)	1:A:102:PHE:H	1:A:128:ILE:O	9	0.23

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,986)	1:A:138:GLN:H	1:A:147:LEU:HD11	8	0.22
(1,986)	1:A:138:GLN:H	1:A:147:LEU:HD12	8	0.22
(1,986)	1:A:138:GLN:H	1:A:147:LEU:HD13	8	0.22
(1,910)	1:A:81:VAL:HG11	1:A:82:GLN:H	1	0.22
(1,910)	1:A:81:VAL:HG12	1:A:82:GLN:H	1	0.22
(1,910)	1:A:81:VAL:HG13	1:A:82:GLN:H	1	0.22
(1,910)	1:A:81:VAL:HG11	1:A:82:GLN:H	10	0.22
(1,910)	1:A:81:VAL:HG12	1:A:82:GLN:H	10	0.22
(1,910)	1:A:81:VAL:HG13	1:A:82:GLN:H	10	0.22
(1,910)	1:A:81:VAL:HG11	1:A:82:GLN:H	20	0.22
(1,910)	1:A:81:VAL:HG12	1:A:82:GLN:H	20	0.22
(1,910)	1:A:81:VAL:HG13	1:A:82:GLN:H	20	0.22
(1,902)	1:A:153:LEU:HD11	1:A:169:ASN:H	7	0.22
(1,902)	1:A:153:LEU:HD12	1:A:169:ASN:H	7	0.22
(1,902)	1:A:153:LEU:HD13	1:A:169:ASN:H	7	0.22
(1,897)	1:A:163:LEU:HD21	1:A:193:GLN:H	3	0.22
(1,897)	1:A:163:LEU:HD22	1:A:193:GLN:H	3	0.22
(1,897)	1:A:163:LEU:HD23	1:A:193:GLN:H	3	0.22
(1,841)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:146:ASP:H	2	0.22
(1,841)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:146:ASP:H	2	0.22
(1,841)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:146:ASP:H	2	0.22
(1,841)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:146:ASP:H	14	0.22
(1,841)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:146:ASP:H	14	0.22
(1,841)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:146:ASP:H	14	0.22
(1,827)	1:A:34:LEU:HD11	1:A:36:LEU:H	11	0.22
(1,827)	1:A:34:LEU:HD12	1:A:36:LEU:H	11	0.22
(1,827)	1:A:34:LEU:HD13	1:A:36:LEU:H	11	0.22
(1,827)	1:A:34:LEU:HD11	1:A:36:LEU:H	18	0.22
(1,827)	1:A:34:LEU:HD12	1:A:36:LEU:H	18	0.22
(1,827)	1:A:34:LEU:HD13	1:A:36:LEU:H	18	0.22
(1,814)	1:A:147:LEU:H	1:A:150:LEU:HD11	18	0.22
(1,814)	1:A:147:LEU:H	1:A:150:LEU:HD12	18	0.22
(1,814)	1:A:147:LEU:H	1:A:150:LEU:HD13	18	0.22
(1,810)	1:A:136:GLN:H	1:A:147:LEU:HD11	7	0.22
(1,810)	1:A:136:GLN:H	1:A:147:LEU:HD12	7	0.22
(1,810)	1:A:136:GLN:H	1:A:147:LEU:HD13	7	0.22
(1,781)	1:A:126:VAL:HG11	1:A:194:LYS:H	19	0.22
(1,781)	1:A:126:VAL:HG12	1:A:194:LYS:H	19	0.22
(1,781)	1:A:126:VAL:HG13	1:A:194:LYS:H	19	0.22
(1,755)	1:A:70:LEU:HD11	1:A:78:ILE:HD11	3	0.22
(1,755)	1:A:70:LEU:HD11	1:A:78:ILE:HD12	3	0.22
(1,755)	1:A:70:LEU:HD11	1:A:78:ILE:HD13	3	0.22

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,755)	1:A:70:LEU:HD12	1:A:78:ILE:HD11	3	0.22
(1,755)	1:A:70:LEU:HD12	1:A:78:ILE:HD12	3	0.22
(1,755)	1:A:70:LEU:HD12	1:A:78:ILE:HD13	3	0.22
(1,755)	1:A:70:LEU:HD13	1:A:78:ILE:HD11	3	0.22
(1,755)	1:A:70:LEU:HD13	1:A:78:ILE:HD12	3	0.22
(1,755)	1:A:70:LEU:HD13	1:A:78:ILE:HD13	3	0.22
(1,701)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD11	3	0.22
(1,701)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD12	3	0.22
(1,701)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD13	3	0.22
(1,701)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD11	3	0.22
(1,701)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD12	3	0.22
(1,701)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD13	3	0.22
(1,701)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD11	3	0.22
(1,701)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD12	3	0.22
(1,701)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD13	3	0.22
(1,693)	1:A:91:VAL:HG21	1:A:98:ILE:HD11	15	0.22
(1,693)	1:A:91:VAL:HG21	1:A:98:ILE:HD12	15	0.22
(1,693)	1:A:91:VAL:HG21	1:A:98:ILE:HD13	15	0.22
(1,693)	1:A:91:VAL:HG22	1:A:98:ILE:HD11	15	0.22
(1,693)	1:A:91:VAL:HG22	1:A:98:ILE:HD12	15	0.22
(1,693)	1:A:91:VAL:HG22	1:A:98:ILE:HD13	15	0.22
(1,693)	1:A:91:VAL:HG23	1:A:98:ILE:HD11	15	0.22
(1,693)	1:A:91:VAL:HG23	1:A:98:ILE:HD12	15	0.22
(1,693)	1:A:91:VAL:HG23	1:A:98:ILE:HD13	15	0.22
(1,664)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:117:VAL:HG11	17	0.22
(1,664)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:117:VAL:HG12	17	0.22
(1,664)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:117:VAL:HG13	17	0.22
(1,664)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:117:VAL:HG11	17	0.22
(1,664)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:117:VAL:HG12	17	0.22
(1,664)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:117:VAL:HG13	17	0.22
(1,664)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:117:VAL:HG11	17	0.22
(1,664)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:117:VAL:HG12	17	0.22
(1,664)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:117:VAL:HG13	17	0.22
(1,572)	1:A:21:LEU:HD21	1:A:28:ILE:HD11	12	0.22
(1,572)	1:A:21:LEU:HD21	1:A:28:ILE:HD12	12	0.22
(1,572)	1:A:21:LEU:HD21	1:A:28:ILE:HD13	12	0.22
(1,572)	1:A:21:LEU:HD22	1:A:28:ILE:HD11	12	0.22
(1,572)	1:A:21:LEU:HD22	1:A:28:ILE:HD12	12	0.22
(1,572)	1:A:21:LEU:HD22	1:A:28:ILE:HD13	12	0.22
(1,572)	1:A:21:LEU:HD23	1:A:28:ILE:HD11	12	0.22
(1,572)	1:A:21:LEU:HD23	1:A:28:ILE:HD12	12	0.22
(1,572)	1:A:21:LEU:HD23	1:A:28:ILE:HD13	12	0.22

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,569)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD21	3	0.22
(1,569)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD22	3	0.22
(1,569)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD23	3	0.22
(1,569)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD21	3	0.22
(1,569)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD22	3	0.22
(1,569)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD23	3	0.22
(1,569)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD21	3	0.22
(1,569)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD22	3	0.22
(1,569)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD23	3	0.22
(1,346)	1:A:175:LEU:HD21	1:A:184:LYS:H	15	0.22
(1,346)	1:A:175:LEU:HD22	1:A:184:LYS:H	15	0.22
(1,346)	1:A:175:LEU:HD23	1:A:184:LYS:H	15	0.22
(1,232)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:H	7	0.22
(1,232)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:H	7	0.22
(1,232)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:H	7	0.22
(1,232)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:H	16	0.22
(1,232)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:H	16	0.22
(1,232)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:H	16	0.22
(1,226)	1:A:57:VAL:HG11	1:A:82:GLN:H	9	0.22
(1,226)	1:A:57:VAL:HG12	1:A:82:GLN:H	9	0.22
(1,226)	1:A:57:VAL:HG13	1:A:82:GLN:H	9	0.22
(1,158)	1:A:163:LEU:H	1:A:195:LEU:HD21	6	0.22
(1,158)	1:A:163:LEU:H	1:A:195:LEU:HD22	6	0.22
(1,158)	1:A:163:LEU:H	1:A:195:LEU:HD23	6	0.22
(1,1099)	1:A:124:GLY:O	1:A:98:ILE:H	16	0.22
(1,1084)	1:A:154:GLU:O	1:A:158:SER:H	13	0.22
(1,1034)	1:A:23:SER:O	1:A:27:GLN:H	4	0.22
(1,1034)	1:A:23:SER:O	1:A:27:GLN:H	20	0.22
(1,1003)	1:A:59:GLN:H	1:A:37:ALA:H	2	0.22
(1,994)	1:A:79:THR:H	1:A:54:VAL:H	16	0.21
(1,988)	1:A:117:VAL:HG21	1:A:121:LEU:H	5	0.21
(1,988)	1:A:117:VAL:HG22	1:A:121:LEU:H	5	0.21
(1,988)	1:A:117:VAL:HG23	1:A:121:LEU:H	5	0.21
(1,988)	1:A:117:VAL:HG21	1:A:121:LEU:H	8	0.21
(1,988)	1:A:117:VAL:HG22	1:A:121:LEU:H	8	0.21
(1,988)	1:A:117:VAL:HG23	1:A:121:LEU:H	8	0.21
(1,936)	1:A:153:LEU:HD21	1:A:157:GLN:H	8	0.21
(1,936)	1:A:153:LEU:HD22	1:A:157:GLN:H	8	0.21
(1,936)	1:A:153:LEU:HD23	1:A:157:GLN:H	8	0.21
(1,936)	1:A:153:LEU:HD21	1:A:157:GLN:H	10	0.21
(1,936)	1:A:153:LEU:HD22	1:A:157:GLN:H	10	0.21
(1,936)	1:A:153:LEU:HD23	1:A:157:GLN:H	10	0.21

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,936)	1:A:153:LEU:HD21	1:A:157:GLN:H	13	0.21
(1,936)	1:A:153:LEU:HD22	1:A:157:GLN:H	13	0.21
(1,936)	1:A:153:LEU:HD23	1:A:157:GLN:H	13	0.21
(1,827)	1:A:34:LEU:HD11	1:A:36:LEU:H	14	0.21
(1,827)	1:A:34:LEU:HD12	1:A:36:LEU:H	14	0.21
(1,827)	1:A:34:LEU:HD13	1:A:36:LEU:H	14	0.21
(1,827)	1:A:34:LEU:HD11	1:A:36:LEU:H	15	0.21
(1,827)	1:A:34:LEU:HD12	1:A:36:LEU:H	15	0.21
(1,827)	1:A:34:LEU:HD13	1:A:36:LEU:H	15	0.21
(1,755)	1:A:70:LEU:HD11	1:A:78:ILE:HD11	1	0.21
(1,755)	1:A:70:LEU:HD11	1:A:78:ILE:HD12	1	0.21
(1,755)	1:A:70:LEU:HD11	1:A:78:ILE:HD13	1	0.21
(1,755)	1:A:70:LEU:HD12	1:A:78:ILE:HD11	1	0.21
(1,755)	1:A:70:LEU:HD12	1:A:78:ILE:HD12	1	0.21
(1,755)	1:A:70:LEU:HD12	1:A:78:ILE:HD13	1	0.21
(1,755)	1:A:70:LEU:HD13	1:A:78:ILE:HD11	1	0.21
(1,755)	1:A:70:LEU:HD13	1:A:78:ILE:HD12	1	0.21
(1,755)	1:A:70:LEU:HD13	1:A:78:ILE:HD13	1	0.21
(1,755)	1:A:70:LEU:HD11	1:A:78:ILE:HD11	9	0.21
(1,755)	1:A:70:LEU:HD11	1:A:78:ILE:HD12	9	0.21
(1,755)	1:A:70:LEU:HD11	1:A:78:ILE:HD13	9	0.21
(1,755)	1:A:70:LEU:HD12	1:A:78:ILE:HD11	9	0.21
(1,755)	1:A:70:LEU:HD12	1:A:78:ILE:HD12	9	0.21
(1,755)	1:A:70:LEU:HD12	1:A:78:ILE:HD13	9	0.21
(1,755)	1:A:70:LEU:HD13	1:A:78:ILE:HD11	9	0.21
(1,755)	1:A:70:LEU:HD13	1:A:78:ILE:HD12	9	0.21
(1,755)	1:A:70:LEU:HD13	1:A:78:ILE:HD13	9	0.21
(1,701)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD11	1	0.21
(1,701)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD12	1	0.21
(1,701)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD13	1	0.21
(1,701)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD11	1	0.21
(1,701)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD12	1	0.21
(1,701)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD13	1	0.21
(1,701)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD11	1	0.21
(1,701)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD12	1	0.21
(1,701)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD13	1	0.21
(1,596)	1:A:164:ASN:H	1:A:195:LEU:H	6	0.21
(1,596)	1:A:164:ASN:H	1:A:195:LEU:H	8	0.21
(1,596)	1:A:164:ASN:H	1:A:195:LEU:H	15	0.21
(1,596)	1:A:164:ASN:H	1:A:195:LEU:H	16	0.21
(1,572)	1:A:21:LEU:HD21	1:A:28:ILE:HD11	17	0.21
(1,572)	1:A:21:LEU:HD21	1:A:28:ILE:HD12	17	0.21

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,572)	1:A:21:LEU:HD21	1:A:28:ILE:HD13	17	0.21
(1,572)	1:A:21:LEU:HD22	1:A:28:ILE:HD11	17	0.21
(1,572)	1:A:21:LEU:HD22	1:A:28:ILE:HD12	17	0.21
(1,572)	1:A:21:LEU:HD22	1:A:28:ILE:HD13	17	0.21
(1,572)	1:A:21:LEU:HD23	1:A:28:ILE:HD11	17	0.21
(1,572)	1:A:21:LEU:HD23	1:A:28:ILE:HD12	17	0.21
(1,572)	1:A:21:LEU:HD23	1:A:28:ILE:HD13	17	0.21
(1,569)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD21	2	0.21
(1,569)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD22	2	0.21
(1,569)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD23	2	0.21
(1,569)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD21	2	0.21
(1,569)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD22	2	0.21
(1,569)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD23	2	0.21
(1,569)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD21	2	0.21
(1,569)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD22	2	0.21
(1,569)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD23	2	0.21
(1,569)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD21	19	0.21
(1,569)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD22	19	0.21
(1,569)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD23	19	0.21
(1,569)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD21	19	0.21
(1,569)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD22	19	0.21
(1,569)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD23	19	0.21
(1,569)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD21	19	0.21
(1,569)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD22	19	0.21
(1,569)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD23	19	0.21
(1,563)	1:A:50:LEU:HD11	1:A:54:VAL:HG21	2	0.21
(1,563)	1:A:50:LEU:HD11	1:A:54:VAL:HG22	2	0.21
(1,563)	1:A:50:LEU:HD11	1:A:54:VAL:HG23	2	0.21
(1,563)	1:A:50:LEU:HD12	1:A:54:VAL:HG21	2	0.21
(1,563)	1:A:50:LEU:HD12	1:A:54:VAL:HG22	2	0.21
(1,563)	1:A:50:LEU:HD12	1:A:54:VAL:HG23	2	0.21
(1,563)	1:A:50:LEU:HD13	1:A:54:VAL:HG21	2	0.21
(1,563)	1:A:50:LEU:HD13	1:A:54:VAL:HG22	2	0.21
(1,563)	1:A:50:LEU:HD13	1:A:54:VAL:HG23	2	0.21
(1,546)	1:A:121:LEU:HD11	1:A:163:LEU:HD21	5	0.21
(1,546)	1:A:121:LEU:HD11	1:A:163:LEU:HD22	5	0.21
(1,546)	1:A:121:LEU:HD11	1:A:163:LEU:HD23	5	0.21
(1,546)	1:A:121:LEU:HD12	1:A:163:LEU:HD21	5	0.21
(1,546)	1:A:121:LEU:HD12	1:A:163:LEU:HD22	5	0.21
(1,546)	1:A:121:LEU:HD12	1:A:163:LEU:HD23	5	0.21
(1,546)	1:A:121:LEU:HD13	1:A:163:LEU:HD21	5	0.21
(1,546)	1:A:121:LEU:HD13	1:A:163:LEU:HD22	5	0.21

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,546)	1:A:121:LEU:HD13	1:A:163:LEU:HD23	5	0.21
(1,408)	1:A:163:LEU:HD21	1:A:195:LEU:HD21	18	0.21
(1,408)	1:A:163:LEU:HD21	1:A:195:LEU:HD22	18	0.21
(1,408)	1:A:163:LEU:HD21	1:A:195:LEU:HD23	18	0.21
(1,408)	1:A:163:LEU:HD22	1:A:195:LEU:HD21	18	0.21
(1,408)	1:A:163:LEU:HD22	1:A:195:LEU:HD22	18	0.21
(1,408)	1:A:163:LEU:HD22	1:A:195:LEU:HD23	18	0.21
(1,408)	1:A:163:LEU:HD23	1:A:195:LEU:HD21	18	0.21
(1,408)	1:A:163:LEU:HD23	1:A:195:LEU:HD22	18	0.21
(1,408)	1:A:163:LEU:HD23	1:A:195:LEU:HD23	18	0.21
(1,398)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:36:LEU:HD21	12	0.21
(1,398)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:36:LEU:HD22	12	0.21
(1,398)	1:A:34:LEU:HD21	1:A:36:LEU:HD23	12	0.21
(1,398)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:36:LEU:HD21	12	0.21
(1,398)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:36:LEU:HD22	12	0.21
(1,398)	1:A:34:LEU:HD22	1:A:36:LEU:HD23	12	0.21
(1,398)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:36:LEU:HD21	12	0.21
(1,398)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:36:LEU:HD22	12	0.21
(1,398)	1:A:34:LEU:HD23	1:A:36:LEU:HD23	12	0.21
(1,379)	1:A:188:ILE:HD11	1:A:190:LEU:HD11	5	0.21
(1,379)	1:A:188:ILE:HD11	1:A:190:LEU:HD12	5	0.21
(1,379)	1:A:188:ILE:HD11	1:A:190:LEU:HD13	5	0.21
(1,379)	1:A:188:ILE:HD12	1:A:190:LEU:HD11	5	0.21
(1,379)	1:A:188:ILE:HD12	1:A:190:LEU:HD12	5	0.21
(1,379)	1:A:188:ILE:HD12	1:A:190:LEU:HD13	5	0.21
(1,379)	1:A:188:ILE:HD13	1:A:190:LEU:HD11	5	0.21
(1,379)	1:A:188:ILE:HD13	1:A:190:LEU:HD12	5	0.21
(1,379)	1:A:188:ILE:HD13	1:A:190:LEU:HD13	5	0.21
(1,346)	1:A:175:LEU:HD21	1:A:184:LYS:H	2	0.21
(1,346)	1:A:175:LEU:HD22	1:A:184:LYS:H	2	0.21
(1,346)	1:A:175:LEU:HD23	1:A:184:LYS:H	2	0.21
(1,311)	1:A:51:GLY:H	1:A:76:VAL:HG11	10	0.21
(1,311)	1:A:51:GLY:H	1:A:76:VAL:HG12	10	0.21
(1,311)	1:A:51:GLY:H	1:A:76:VAL:HG13	10	0.21
(1,310)	1:A:173:ARG:H	1:A:187:LEU:HD11	7	0.21
(1,310)	1:A:173:ARG:H	1:A:187:LEU:HD12	7	0.21
(1,310)	1:A:173:ARG:H	1:A:187:LEU:HD13	7	0.21
(1,266)	1:A:117:VAL:HG21	1:A:118:TYR:H	4	0.21
(1,266)	1:A:117:VAL:HG22	1:A:118:TYR:H	4	0.21
(1,266)	1:A:117:VAL:HG23	1:A:118:TYR:H	4	0.21
(1,266)	1:A:117:VAL:HG21	1:A:118:TYR:H	14	0.21
(1,266)	1:A:117:VAL:HG22	1:A:118:TYR:H	14	0.21

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,266)	1:A:117:VAL:HG23	1:A:118:TYR:H	14	0.21
(1,259)	1:A:71:ALA:H	1:A:78:ILE:HD11	18	0.21
(1,259)	1:A:71:ALA:H	1:A:78:ILE:HD12	18	0.21
(1,259)	1:A:71:ALA:H	1:A:78:ILE:HD13	18	0.21
(1,250)	1:A:57:VAL:HG21	1:A:84:ASN:H	4	0.21
(1,250)	1:A:57:VAL:HG22	1:A:84:ASN:H	4	0.21
(1,250)	1:A:57:VAL:HG23	1:A:84:ASN:H	4	0.21
(1,250)	1:A:57:VAL:HG21	1:A:84:ASN:H	10	0.21
(1,250)	1:A:57:VAL:HG22	1:A:84:ASN:H	10	0.21
(1,250)	1:A:57:VAL:HG23	1:A:84:ASN:H	10	0.21
(1,242)	1:A:133:ALA:H	1:A:147:LEU:HD21	7	0.21
(1,242)	1:A:133:ALA:H	1:A:147:LEU:HD22	7	0.21
(1,242)	1:A:133:ALA:H	1:A:147:LEU:HD23	7	0.21
(1,228)	1:A:147:LEU:H	1:A:147:LEU:HD11	20	0.21
(1,228)	1:A:147:LEU:H	1:A:147:LEU:HD12	20	0.21
(1,228)	1:A:147:LEU:H	1:A:147:LEU:HD13	20	0.21
(1,226)	1:A:57:VAL:HG11	1:A:82:GLN:H	8	0.21
(1,226)	1:A:57:VAL:HG12	1:A:82:GLN:H	8	0.21
(1,226)	1:A:57:VAL:HG13	1:A:82:GLN:H	8	0.21
(1,1099)	1:A:124:GLY:O	1:A:98:ILE:H	12	0.21
(1,1084)	1:A:154:GLU:O	1:A:158:SER:H	3	0.21
(1,1084)	1:A:154:GLU:O	1:A:158:SER:H	4	0.21
(1,1034)	1:A:23:SER:O	1:A:27:GLN:H	6	0.21
(1,1003)	1:A:59:GLN:H	1:A:37:ALA:H	12	0.21
(1,986)	1:A:138:GLN:H	1:A:147:LEU:HD11	18	0.2
(1,986)	1:A:138:GLN:H	1:A:147:LEU:HD12	18	0.2
(1,986)	1:A:138:GLN:H	1:A:147:LEU:HD13	18	0.2
(1,913)	1:A:137:LEU:HD11	1:A:148:ASP:H	19	0.2
(1,913)	1:A:137:LEU:HD12	1:A:148:ASP:H	19	0.2
(1,913)	1:A:137:LEU:HD13	1:A:148:ASP:H	19	0.2
(1,896)	1:A:166:LEU:HD11	1:A:193:GLN:H	17	0.2
(1,896)	1:A:166:LEU:HD12	1:A:193:GLN:H	17	0.2
(1,896)	1:A:166:LEU:HD13	1:A:193:GLN:H	17	0.2
(1,755)	1:A:70:LEU:HD11	1:A:78:ILE:HD11	8	0.2
(1,755)	1:A:70:LEU:HD11	1:A:78:ILE:HD12	8	0.2
(1,755)	1:A:70:LEU:HD11	1:A:78:ILE:HD13	8	0.2
(1,755)	1:A:70:LEU:HD12	1:A:78:ILE:HD11	8	0.2
(1,755)	1:A:70:LEU:HD12	1:A:78:ILE:HD12	8	0.2
(1,755)	1:A:70:LEU:HD12	1:A:78:ILE:HD13	8	0.2
(1,755)	1:A:70:LEU:HD13	1:A:78:ILE:HD11	8	0.2
(1,755)	1:A:70:LEU:HD13	1:A:78:ILE:HD12	8	0.2
(1,755)	1:A:70:LEU:HD13	1:A:78:ILE:HD13	8	0.2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,750)	1:A:81:VAL:HG21	1:A:85:LEU:HD21	1	0.2
(1,750)	1:A:81:VAL:HG21	1:A:85:LEU:HD22	1	0.2
(1,750)	1:A:81:VAL:HG21	1:A:85:LEU:HD23	1	0.2
(1,750)	1:A:81:VAL:HG22	1:A:85:LEU:HD21	1	0.2
(1,750)	1:A:81:VAL:HG22	1:A:85:LEU:HD22	1	0.2
(1,750)	1:A:81:VAL:HG22	1:A:85:LEU:HD23	1	0.2
(1,750)	1:A:81:VAL:HG23	1:A:85:LEU:HD21	1	0.2
(1,750)	1:A:81:VAL:HG23	1:A:85:LEU:HD22	1	0.2
(1,750)	1:A:81:VAL:HG23	1:A:85:LEU:HD23	1	0.2
(1,750)	1:A:81:VAL:HG21	1:A:85:LEU:HD21	8	0.2
(1,750)	1:A:81:VAL:HG21	1:A:85:LEU:HD22	8	0.2
(1,750)	1:A:81:VAL:HG21	1:A:85:LEU:HD23	8	0.2
(1,750)	1:A:81:VAL:HG22	1:A:85:LEU:HD21	8	0.2
(1,750)	1:A:81:VAL:HG22	1:A:85:LEU:HD22	8	0.2
(1,750)	1:A:81:VAL:HG22	1:A:85:LEU:HD23	8	0.2
(1,750)	1:A:81:VAL:HG23	1:A:85:LEU:HD21	8	0.2
(1,750)	1:A:81:VAL:HG23	1:A:85:LEU:HD22	8	0.2
(1,750)	1:A:81:VAL:HG23	1:A:85:LEU:HD23	8	0.2
(1,664)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:117:VAL:HG11	6	0.2
(1,664)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:117:VAL:HG12	6	0.2
(1,664)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:117:VAL:HG13	6	0.2
(1,664)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:117:VAL:HG11	6	0.2
(1,664)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:117:VAL:HG12	6	0.2
(1,664)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:117:VAL:HG13	6	0.2
(1,664)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:117:VAL:HG11	6	0.2
(1,664)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:117:VAL:HG12	6	0.2
(1,664)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:117:VAL:HG13	6	0.2
(1,569)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD21	15	0.2
(1,569)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD22	15	0.2
(1,569)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD23	15	0.2
(1,569)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD21	15	0.2
(1,569)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD22	15	0.2
(1,569)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD23	15	0.2
(1,569)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD21	15	0.2
(1,569)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD22	15	0.2
(1,569)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD23	15	0.2
(1,518)	1:A:117:VAL:HG11	1:A:121:LEU:HD11	4	0.2
(1,518)	1:A:117:VAL:HG11	1:A:121:LEU:HD12	4	0.2
(1,518)	1:A:117:VAL:HG11	1:A:121:LEU:HD13	4	0.2
(1,518)	1:A:117:VAL:HG12	1:A:121:LEU:HD11	4	0.2
(1,518)	1:A:117:VAL:HG12	1:A:121:LEU:HD12	4	0.2
(1,518)	1:A:117:VAL:HG12	1:A:121:LEU:HD13	4	0.2

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,518)	1:A:117:VAL:HG13	1:A:121:LEU:HD11	4	0.2
(1,518)	1:A:117:VAL:HG13	1:A:121:LEU:HD12	4	0.2
(1,518)	1:A:117:VAL:HG13	1:A:121:LEU:HD13	4	0.2
(1,399)	1:A:34:LEU:H	1:A:99:VAL:HG21	16	0.2
(1,399)	1:A:34:LEU:H	1:A:99:VAL:HG22	16	0.2
(1,399)	1:A:34:LEU:H	1:A:99:VAL:HG23	16	0.2
(1,379)	1:A:188:ILE:HD11	1:A:190:LEU:HD11	7	0.2
(1,379)	1:A:188:ILE:HD11	1:A:190:LEU:HD12	7	0.2
(1,379)	1:A:188:ILE:HD11	1:A:190:LEU:HD13	7	0.2
(1,379)	1:A:188:ILE:HD12	1:A:190:LEU:HD11	7	0.2
(1,379)	1:A:188:ILE:HD12	1:A:190:LEU:HD12	7	0.2
(1,379)	1:A:188:ILE:HD12	1:A:190:LEU:HD13	7	0.2
(1,379)	1:A:188:ILE:HD13	1:A:190:LEU:HD11	7	0.2
(1,379)	1:A:188:ILE:HD13	1:A:190:LEU:HD12	7	0.2
(1,379)	1:A:188:ILE:HD13	1:A:190:LEU:HD13	7	0.2
(1,295)	1:A:153:LEU:H	1:A:190:LEU:HD21	8	0.2
(1,295)	1:A:153:LEU:H	1:A:190:LEU:HD22	8	0.2
(1,295)	1:A:153:LEU:H	1:A:190:LEU:HD23	8	0.2
(1,250)	1:A:57:VAL:HG21	1:A:84:ASN:H	7	0.2
(1,250)	1:A:57:VAL:HG22	1:A:84:ASN:H	7	0.2
(1,250)	1:A:57:VAL:HG23	1:A:84:ASN:H	7	0.2
(1,201)	1:A:157:GLN:H	1:A:190:LEU:HD21	19	0.2
(1,201)	1:A:157:GLN:H	1:A:190:LEU:HD22	19	0.2
(1,201)	1:A:157:GLN:H	1:A:190:LEU:HD23	19	0.2
(1,1105)	1:A:102:PHE:H	1:A:128:ILE:O	20	0.2
(1,1084)	1:A:154:GLU:O	1:A:158:SER:H	1	0.2
(1,1034)	1:A:23:SER:O	1:A:27:GLN:H	5	0.2
(1,1032)	1:A:22:VAL:O	1:A:26:ASN:H	14	0.2
(1,1017)	1:A:101:ILE:HA	1:A:128:ILE:H	20	0.2
(1,964)	1:A:116:LYS:H	1:A:117:VAL:HG21	11	0.19
(1,964)	1:A:116:LYS:H	1:A:117:VAL:HG22	11	0.19
(1,964)	1:A:116:LYS:H	1:A:117:VAL:HG23	11	0.19
(1,936)	1:A:153:LEU:HD21	1:A:157:GLN:H	18	0.19
(1,936)	1:A:153:LEU:HD22	1:A:157:GLN:H	18	0.19
(1,936)	1:A:153:LEU:HD23	1:A:157:GLN:H	18	0.19
(1,896)	1:A:166:LEU:HD11	1:A:193:GLN:H	14	0.19
(1,896)	1:A:166:LEU:HD12	1:A:193:GLN:H	14	0.19
(1,896)	1:A:166:LEU:HD13	1:A:193:GLN:H	14	0.19
(1,896)	1:A:166:LEU:HD11	1:A:193:GLN:H	18	0.19
(1,896)	1:A:166:LEU:HD12	1:A:193:GLN:H	18	0.19
(1,896)	1:A:166:LEU:HD13	1:A:193:GLN:H	18	0.19
(1,854)	1:A:131:GLY:H	1:A:153:LEU:HD21	3	0.19

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,854)	1:A:131:GLY:H	1:A:153:LEU:HD22	3	0.19
(1,854)	1:A:131:GLY:H	1:A:153:LEU:HD23	3	0.19
(1,848)	1:A:91:VAL:HG21	1:A:95:TRP:HE1	13	0.19
(1,848)	1:A:91:VAL:HG22	1:A:95:TRP:HE1	13	0.19
(1,848)	1:A:91:VAL:HG23	1:A:95:TRP:HE1	13	0.19
(1,827)	1:A:34:LEU:HD11	1:A:36:LEU:H	17	0.19
(1,827)	1:A:34:LEU:HD12	1:A:36:LEU:H	17	0.19
(1,827)	1:A:34:LEU:HD13	1:A:36:LEU:H	17	0.19
(1,811)	1:A:146:ASP:H	1:A:147:LEU:HD11	14	0.19
(1,811)	1:A:146:ASP:H	1:A:147:LEU:HD12	14	0.19
(1,811)	1:A:146:ASP:H	1:A:147:LEU:HD13	14	0.19
(1,809)	1:A:91:VAL:HG11	1:A:92:ALA:H	10	0.19
(1,809)	1:A:91:VAL:HG12	1:A:92:ALA:H	10	0.19
(1,809)	1:A:91:VAL:HG13	1:A:92:ALA:H	10	0.19
(1,809)	1:A:91:VAL:HG11	1:A:92:ALA:H	13	0.19
(1,809)	1:A:91:VAL:HG12	1:A:92:ALA:H	13	0.19
(1,809)	1:A:91:VAL:HG13	1:A:92:ALA:H	13	0.19
(1,806)	1:A:166:LEU:HD21	1:A:193:GLN:H	15	0.19
(1,806)	1:A:166:LEU:HD22	1:A:193:GLN:H	15	0.19
(1,806)	1:A:166:LEU:HD23	1:A:193:GLN:H	15	0.19
(1,801)	1:A:113:LEU:HD11	1:A:116:LYS:H	9	0.19
(1,801)	1:A:113:LEU:HD12	1:A:116:LYS:H	9	0.19
(1,801)	1:A:113:LEU:HD13	1:A:116:LYS:H	9	0.19
(1,758)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD11	8	0.19
(1,758)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD12	8	0.19
(1,758)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD13	8	0.19
(1,758)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD11	8	0.19
(1,758)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD12	8	0.19
(1,758)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD13	8	0.19
(1,758)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD11	8	0.19
(1,758)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD12	8	0.19
(1,758)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD13	8	0.19
(1,732)	1:A:147:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD21	11	0.19
(1,732)	1:A:147:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD22	11	0.19
(1,732)	1:A:147:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD23	11	0.19
(1,732)	1:A:147:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD21	11	0.19
(1,732)	1:A:147:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD22	11	0.19
(1,732)	1:A:147:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD23	11	0.19
(1,732)	1:A:147:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD21	11	0.19
(1,732)	1:A:147:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD22	11	0.19
(1,732)	1:A:147:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD23	11	0.19
(1,664)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:117:VAL:HG11	5	0.19

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,664)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:117:VAL:HG12	5	0.19
(1,664)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:117:VAL:HG13	5	0.19
(1,664)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:117:VAL:HG11	5	0.19
(1,664)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:117:VAL:HG12	5	0.19
(1,664)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:117:VAL:HG13	5	0.19
(1,664)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:117:VAL:HG11	5	0.19
(1,664)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:117:VAL:HG12	5	0.19
(1,664)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:117:VAL:HG13	5	0.19
(1,664)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:117:VAL:HG11	9	0.19
(1,664)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:117:VAL:HG12	9	0.19
(1,664)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:117:VAL:HG13	9	0.19
(1,664)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:117:VAL:HG11	9	0.19
(1,664)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:117:VAL:HG12	9	0.19
(1,664)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:117:VAL:HG13	9	0.19
(1,664)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:117:VAL:HG11	9	0.19
(1,664)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:117:VAL:HG12	9	0.19
(1,664)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:117:VAL:HG13	9	0.19
(1,664)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:117:VAL:HG11	18	0.19
(1,664)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:117:VAL:HG12	18	0.19
(1,664)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:117:VAL:HG13	18	0.19
(1,664)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:117:VAL:HG11	18	0.19
(1,664)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:117:VAL:HG12	18	0.19
(1,664)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:117:VAL:HG13	18	0.19
(1,664)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:117:VAL:HG11	18	0.19
(1,664)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:117:VAL:HG12	18	0.19
(1,664)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:117:VAL:HG13	18	0.19
(1,570)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:145:LYS:H	3	0.19
(1,570)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:145:LYS:H	3	0.19
(1,570)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:145:LYS:H	3	0.19
(1,569)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD21	1	0.19
(1,569)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD22	1	0.19
(1,569)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD23	1	0.19
(1,569)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD21	1	0.19
(1,569)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD22	1	0.19
(1,569)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD23	1	0.19
(1,569)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD21	1	0.19
(1,569)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD22	1	0.19
(1,569)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD23	1	0.19
(1,563)	1:A:50:LEU:HD11	1:A:54:VAL:HG21	15	0.19
(1,563)	1:A:50:LEU:HD11	1:A:54:VAL:HG22	15	0.19
(1,563)	1:A:50:LEU:HD11	1:A:54:VAL:HG23	15	0.19
(1,563)	1:A:50:LEU:HD12	1:A:54:VAL:HG21	15	0.19

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,563)	1:A:50:LEU:HD12	1:A:54:VAL:HG22	15	0.19
(1,563)	1:A:50:LEU:HD12	1:A:54:VAL:HG23	15	0.19
(1,563)	1:A:50:LEU:HD13	1:A:54:VAL:HG21	15	0.19
(1,563)	1:A:50:LEU:HD13	1:A:54:VAL:HG22	15	0.19
(1,563)	1:A:50:LEU:HD13	1:A:54:VAL:HG23	15	0.19
(1,507)	1:A:37:ALA:H	1:A:57:VAL:HG21	14	0.19
(1,507)	1:A:37:ALA:H	1:A:57:VAL:HG22	14	0.19
(1,507)	1:A:37:ALA:H	1:A:57:VAL:HG23	14	0.19
(1,408)	1:A:163:LEU:HD21	1:A:195:LEU:HD21	17	0.19
(1,408)	1:A:163:LEU:HD21	1:A:195:LEU:HD22	17	0.19
(1,408)	1:A:163:LEU:HD21	1:A:195:LEU:HD23	17	0.19
(1,408)	1:A:163:LEU:HD22	1:A:195:LEU:HD21	17	0.19
(1,408)	1:A:163:LEU:HD22	1:A:195:LEU:HD22	17	0.19
(1,408)	1:A:163:LEU:HD22	1:A:195:LEU:HD23	17	0.19
(1,408)	1:A:163:LEU:HD23	1:A:195:LEU:HD21	17	0.19
(1,408)	1:A:163:LEU:HD23	1:A:195:LEU:HD22	17	0.19
(1,408)	1:A:163:LEU:HD23	1:A:195:LEU:HD23	17	0.19
(1,379)	1:A:188:ILE:HD11	1:A:190:LEU:HD11	2	0.19
(1,379)	1:A:188:ILE:HD11	1:A:190:LEU:HD12	2	0.19
(1,379)	1:A:188:ILE:HD11	1:A:190:LEU:HD13	2	0.19
(1,379)	1:A:188:ILE:HD12	1:A:190:LEU:HD11	2	0.19
(1,379)	1:A:188:ILE:HD12	1:A:190:LEU:HD12	2	0.19
(1,379)	1:A:188:ILE:HD12	1:A:190:LEU:HD13	2	0.19
(1,379)	1:A:188:ILE:HD13	1:A:190:LEU:HD11	2	0.19
(1,379)	1:A:188:ILE:HD13	1:A:190:LEU:HD12	2	0.19
(1,379)	1:A:188:ILE:HD13	1:A:190:LEU:HD13	2	0.19
(1,343)	1:A:137:LEU:HD11	1:A:146:ASP:H	6	0.19
(1,343)	1:A:137:LEU:HD12	1:A:146:ASP:H	6	0.19
(1,343)	1:A:137:LEU:HD13	1:A:146:ASP:H	6	0.19
(1,334)	1:A:90:ILE:H	1:A:91:VAL:HG21	7	0.19
(1,334)	1:A:90:ILE:H	1:A:91:VAL:HG22	7	0.19
(1,334)	1:A:90:ILE:H	1:A:91:VAL:HG23	7	0.19
(1,311)	1:A:51:GLY:H	1:A:76:VAL:HG11	20	0.19
(1,311)	1:A:51:GLY:H	1:A:76:VAL:HG12	20	0.19
(1,311)	1:A:51:GLY:H	1:A:76:VAL:HG13	20	0.19
(1,296)	1:A:137:LEU:HD11	1:A:149:LEU:H	15	0.19
(1,296)	1:A:137:LEU:HD12	1:A:149:LEU:H	15	0.19
(1,296)	1:A:137:LEU:HD13	1:A:149:LEU:H	15	0.19
(1,295)	1:A:153:LEU:H	1:A:190:LEU:HD21	10	0.19
(1,295)	1:A:153:LEU:H	1:A:190:LEU:HD22	10	0.19
(1,295)	1:A:153:LEU:H	1:A:190:LEU:HD23	10	0.19
(1,272)	1:A:124:GLY:H	1:A:163:LEU:HD21	18	0.19

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,272)	1:A:124:GLY:H	1:A:163:LEU:HD22	18	0.19
(1,272)	1:A:124:GLY:H	1:A:163:LEU:HD23	18	0.19
(1,266)	1:A:117:VAL:HG21	1:A:118:TYR:H	12	0.19
(1,266)	1:A:117:VAL:HG22	1:A:118:TYR:H	12	0.19
(1,266)	1:A:117:VAL:HG23	1:A:118:TYR:H	12	0.19
(1,250)	1:A:57:VAL:HG21	1:A:84:ASN:H	1	0.19
(1,250)	1:A:57:VAL:HG22	1:A:84:ASN:H	1	0.19
(1,250)	1:A:57:VAL:HG23	1:A:84:ASN:H	1	0.19
(1,217)	1:A:163:LEU:HD11	1:A:195:LEU:H	2	0.19
(1,217)	1:A:163:LEU:HD12	1:A:195:LEU:H	2	0.19
(1,217)	1:A:163:LEU:HD13	1:A:195:LEU:H	2	0.19
(1,217)	1:A:163:LEU:HD11	1:A:195:LEU:H	4	0.19
(1,217)	1:A:163:LEU:HD12	1:A:195:LEU:H	4	0.19
(1,217)	1:A:163:LEU:HD13	1:A:195:LEU:H	4	0.19
(1,217)	1:A:163:LEU:HD11	1:A:195:LEU:H	5	0.19
(1,217)	1:A:163:LEU:HD12	1:A:195:LEU:H	5	0.19
(1,217)	1:A:163:LEU:HD13	1:A:195:LEU:H	5	0.19
(1,1113)	1:A:127:PHE:H	1:A:192:GLY:O	6	0.19
(1,1105)	1:A:102:PHE:H	1:A:128:ILE:O	14	0.19
(1,1099)	1:A:124:GLY:O	1:A:98:ILE:H	3	0.19
(1,1070)	1:A:108:SER:O	1:A:112:GLN:H	1	0.19
(1,1070)	1:A:108:SER:O	1:A:112:GLN:H	4	0.19
(1,1070)	1:A:108:SER:O	1:A:112:GLN:H	20	0.19
(1,936)	1:A:153:LEU:HD21	1:A:157:GLN:H	9	0.18
(1,936)	1:A:153:LEU:HD22	1:A:157:GLN:H	9	0.18
(1,936)	1:A:153:LEU:HD23	1:A:157:GLN:H	9	0.18
(1,936)	1:A:153:LEU:HD21	1:A:157:GLN:H	15	0.18
(1,936)	1:A:153:LEU:HD22	1:A:157:GLN:H	15	0.18
(1,936)	1:A:153:LEU:HD23	1:A:157:GLN:H	15	0.18
(1,936)	1:A:153:LEU:HD21	1:A:157:GLN:H	16	0.18
(1,936)	1:A:153:LEU:HD22	1:A:157:GLN:H	16	0.18
(1,936)	1:A:153:LEU:HD23	1:A:157:GLN:H	16	0.18
(1,917)	1:A:154:GLU:H	1:A:190:LEU:HD21	11	0.18
(1,917)	1:A:154:GLU:H	1:A:190:LEU:HD22	11	0.18
(1,917)	1:A:154:GLU:H	1:A:190:LEU:HD23	11	0.18
(1,891)	1:A:125:GLY:H	1:A:163:LEU:HD21	13	0.18
(1,891)	1:A:125:GLY:H	1:A:163:LEU:HD22	13	0.18
(1,891)	1:A:125:GLY:H	1:A:163:LEU:HD23	13	0.18
(1,841)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:146:ASP:H	5	0.18
(1,841)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:146:ASP:H	5	0.18
(1,841)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:146:ASP:H	5	0.18
(1,822)	1:A:90:ILE:HD11	1:A:116:LYS:H	17	0.18

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,822)	1:A:90:ILE:HD12	1:A:116:LYS:H	17	0.18
(1,822)	1:A:90:ILE:HD13	1:A:116:LYS:H	17	0.18
(1,811)	1:A:146:ASP:H	1:A:147:LEU:HD11	15	0.18
(1,811)	1:A:146:ASP:H	1:A:147:LEU:HD12	15	0.18
(1,811)	1:A:146:ASP:H	1:A:147:LEU:HD13	15	0.18
(1,810)	1:A:136:GLN:H	1:A:147:LEU:HD11	13	0.18
(1,810)	1:A:136:GLN:H	1:A:147:LEU:HD12	13	0.18
(1,810)	1:A:136:GLN:H	1:A:147:LEU:HD13	13	0.18
(1,781)	1:A:126:VAL:HG11	1:A:194:LYS:H	5	0.18
(1,781)	1:A:126:VAL:HG12	1:A:194:LYS:H	5	0.18
(1,781)	1:A:126:VAL:HG13	1:A:194:LYS:H	5	0.18
(1,781)	1:A:126:VAL:HG11	1:A:194:LYS:H	16	0.18
(1,781)	1:A:126:VAL:HG12	1:A:194:LYS:H	16	0.18
(1,781)	1:A:126:VAL:HG13	1:A:194:LYS:H	16	0.18
(1,732)	1:A:147:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD21	14	0.18
(1,732)	1:A:147:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD22	14	0.18
(1,732)	1:A:147:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD23	14	0.18
(1,732)	1:A:147:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD21	14	0.18
(1,732)	1:A:147:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD22	14	0.18
(1,732)	1:A:147:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD23	14	0.18
(1,732)	1:A:147:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD21	14	0.18
(1,732)	1:A:147:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD22	14	0.18
(1,732)	1:A:147:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD23	14	0.18
(1,732)	1:A:147:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD21	16	0.18
(1,732)	1:A:147:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD22	16	0.18
(1,732)	1:A:147:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD23	16	0.18
(1,732)	1:A:147:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD21	16	0.18
(1,732)	1:A:147:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD22	16	0.18
(1,732)	1:A:147:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD23	16	0.18
(1,732)	1:A:147:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD21	16	0.18
(1,732)	1:A:147:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD22	16	0.18
(1,732)	1:A:147:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD23	16	0.18
(1,701)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD11	14	0.18
(1,701)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD12	14	0.18
(1,701)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD13	14	0.18
(1,701)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD11	14	0.18
(1,701)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD12	14	0.18
(1,701)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD13	14	0.18
(1,701)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD11	14	0.18
(1,701)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD12	14	0.18
(1,701)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD13	14	0.18
(1,701)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD11	15	0.18

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,701)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD12	15	0.18
(1,701)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD13	15	0.18
(1,701)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD11	15	0.18
(1,701)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD12	15	0.18
(1,701)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD13	15	0.18
(1,701)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD11	15	0.18
(1,701)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD12	15	0.18
(1,701)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD13	15	0.18
(1,664)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:117:VAL:HG11	10	0.18
(1,664)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:117:VAL:HG12	10	0.18
(1,664)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:117:VAL:HG13	10	0.18
(1,664)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:117:VAL:HG11	10	0.18
(1,664)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:117:VAL:HG12	10	0.18
(1,664)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:117:VAL:HG13	10	0.18
(1,664)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:117:VAL:HG11	10	0.18
(1,664)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:117:VAL:HG12	10	0.18
(1,664)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:117:VAL:HG13	10	0.18
(1,570)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:145:LYS:H	17	0.18
(1,570)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:145:LYS:H	17	0.18
(1,570)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:145:LYS:H	17	0.18
(1,569)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD21	10	0.18
(1,569)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD22	10	0.18
(1,569)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD23	10	0.18
(1,569)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD21	10	0.18
(1,569)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD22	10	0.18
(1,569)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD23	10	0.18
(1,569)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD21	10	0.18
(1,569)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD22	10	0.18
(1,569)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD23	10	0.18
(1,563)	1:A:50:LEU:HD11	1:A:54:VAL:HG21	5	0.18
(1,563)	1:A:50:LEU:HD11	1:A:54:VAL:HG22	5	0.18
(1,563)	1:A:50:LEU:HD11	1:A:54:VAL:HG23	5	0.18
(1,563)	1:A:50:LEU:HD12	1:A:54:VAL:HG21	5	0.18
(1,563)	1:A:50:LEU:HD12	1:A:54:VAL:HG22	5	0.18
(1,563)	1:A:50:LEU:HD12	1:A:54:VAL:HG23	5	0.18
(1,563)	1:A:50:LEU:HD13	1:A:54:VAL:HG21	5	0.18
(1,563)	1:A:50:LEU:HD13	1:A:54:VAL:HG22	5	0.18
(1,563)	1:A:50:LEU:HD13	1:A:54:VAL:HG23	5	0.18
(1,563)	1:A:50:LEU:HD11	1:A:54:VAL:HG21	7	0.18
(1,563)	1:A:50:LEU:HD11	1:A:54:VAL:HG22	7	0.18
(1,563)	1:A:50:LEU:HD11	1:A:54:VAL:HG23	7	0.18
(1,563)	1:A:50:LEU:HD12	1:A:54:VAL:HG21	7	0.18

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,563)	1:A:50:LEU:HD12	1:A:54:VAL:HG22	7	0.18
(1,563)	1:A:50:LEU:HD12	1:A:54:VAL:HG23	7	0.18
(1,563)	1:A:50:LEU:HD13	1:A:54:VAL:HG21	7	0.18
(1,563)	1:A:50:LEU:HD13	1:A:54:VAL:HG22	7	0.18
(1,563)	1:A:50:LEU:HD13	1:A:54:VAL:HG23	7	0.18
(1,507)	1:A:37:ALA:H	1:A:57:VAL:HG21	10	0.18
(1,507)	1:A:37:ALA:H	1:A:57:VAL:HG22	10	0.18
(1,507)	1:A:37:ALA:H	1:A:57:VAL:HG23	10	0.18
(1,507)	1:A:37:ALA:H	1:A:57:VAL:HG21	12	0.18
(1,507)	1:A:37:ALA:H	1:A:57:VAL:HG22	12	0.18
(1,507)	1:A:37:ALA:H	1:A:57:VAL:HG23	12	0.18
(1,453)	1:A:118:TYR:H	1:A:121:LEU:HD21	18	0.18
(1,453)	1:A:118:TYR:H	1:A:121:LEU:HD22	18	0.18
(1,453)	1:A:118:TYR:H	1:A:121:LEU:HD23	18	0.18
(1,361)	1:A:72:GLN:H	1:A:78:ILE:HD11	15	0.18
(1,361)	1:A:72:GLN:H	1:A:78:ILE:HD12	15	0.18
(1,361)	1:A:72:GLN:H	1:A:78:ILE:HD13	15	0.18
(1,311)	1:A:51:GLY:H	1:A:76:VAL:HG11	7	0.18
(1,311)	1:A:51:GLY:H	1:A:76:VAL:HG12	7	0.18
(1,311)	1:A:51:GLY:H	1:A:76:VAL:HG13	7	0.18
(1,308)	1:A:159:GLU:H	1:A:165:TRP:HE1	9	0.18
(1,296)	1:A:137:LEU:HD11	1:A:149:LEU:H	3	0.18
(1,296)	1:A:137:LEU:HD12	1:A:149:LEU:H	3	0.18
(1,296)	1:A:137:LEU:HD13	1:A:149:LEU:H	3	0.18
(1,296)	1:A:137:LEU:HD11	1:A:149:LEU:H	10	0.18
(1,296)	1:A:137:LEU:HD12	1:A:149:LEU:H	10	0.18
(1,296)	1:A:137:LEU:HD13	1:A:149:LEU:H	10	0.18
(1,259)	1:A:71:ALA:H	1:A:78:ILE:HD11	4	0.18
(1,259)	1:A:71:ALA:H	1:A:78:ILE:HD12	4	0.18
(1,259)	1:A:71:ALA:H	1:A:78:ILE:HD13	4	0.18
(1,217)	1:A:163:LEU:HD11	1:A:195:LEU:H	9	0.18
(1,217)	1:A:163:LEU:HD12	1:A:195:LEU:H	9	0.18
(1,217)	1:A:163:LEU:HD13	1:A:195:LEU:H	9	0.18
(1,217)	1:A:163:LEU:HD11	1:A:195:LEU:H	14	0.18
(1,217)	1:A:163:LEU:HD12	1:A:195:LEU:H	14	0.18
(1,217)	1:A:163:LEU:HD13	1:A:195:LEU:H	14	0.18
(1,1113)	1:A:127:PHE:H	1:A:192:GLY:O	16	0.18
(1,1099)	1:A:124:GLY:O	1:A:98:ILE:H	10	0.18
(1,1084)	1:A:154:GLU:O	1:A:158:SER:H	12	0.18
(1,1084)	1:A:154:GLU:O	1:A:158:SER:H	20	0.18
(1,1070)	1:A:108:SER:O	1:A:112:GLN:H	10	0.18
(1,1070)	1:A:108:SER:O	1:A:112:GLN:H	17	0.18

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1026)	1:A:95:TRP:HE1	1:A:91:VAL:H	12	0.18
(1,1023)	1:A:105:LEU:HD11	1:A:85:LEU:HD21	4	0.18
(1,1023)	1:A:105:LEU:HD11	1:A:85:LEU:HD22	4	0.18
(1,1023)	1:A:105:LEU:HD11	1:A:85:LEU:HD23	4	0.18
(1,1023)	1:A:105:LEU:HD12	1:A:85:LEU:HD21	4	0.18
(1,1023)	1:A:105:LEU:HD12	1:A:85:LEU:HD22	4	0.18
(1,1023)	1:A:105:LEU:HD12	1:A:85:LEU:HD23	4	0.18
(1,1023)	1:A:105:LEU:HD13	1:A:85:LEU:HD21	4	0.18
(1,1023)	1:A:105:LEU:HD13	1:A:85:LEU:HD22	4	0.18
(1,1023)	1:A:105:LEU:HD13	1:A:85:LEU:HD23	4	0.18
(1,1003)	1:A:59:GLN:H	1:A:37:ALA:H	6	0.18
(1,1003)	1:A:59:GLN:H	1:A:37:ALA:H	7	0.18
(1,994)	1:A:79:THR:H	1:A:54:VAL:H	19	0.17
(1,988)	1:A:117:VAL:HG21	1:A:121:LEU:H	12	0.17
(1,988)	1:A:117:VAL:HG22	1:A:121:LEU:H	12	0.17
(1,988)	1:A:117:VAL:HG23	1:A:121:LEU:H	12	0.17
(1,985)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:130:GLU:H	16	0.17
(1,985)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:130:GLU:H	16	0.17
(1,985)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:130:GLU:H	16	0.17
(1,936)	1:A:153:LEU:HD21	1:A:157:GLN:H	20	0.17
(1,936)	1:A:153:LEU:HD22	1:A:157:GLN:H	20	0.17
(1,936)	1:A:153:LEU:HD23	1:A:157:GLN:H	20	0.17
(1,896)	1:A:166:LEU:HD11	1:A:193:GLN:H	6	0.17
(1,896)	1:A:166:LEU:HD12	1:A:193:GLN:H	6	0.17
(1,896)	1:A:166:LEU:HD13	1:A:193:GLN:H	6	0.17
(1,885)	1:A:50:LEU:H	1:A:54:VAL:HG21	1	0.17
(1,885)	1:A:50:LEU:H	1:A:54:VAL:HG22	1	0.17
(1,885)	1:A:50:LEU:H	1:A:54:VAL:HG23	1	0.17
(1,854)	1:A:131:GLY:H	1:A:153:LEU:HD21	18	0.17
(1,854)	1:A:131:GLY:H	1:A:153:LEU:HD22	18	0.17
(1,854)	1:A:131:GLY:H	1:A:153:LEU:HD23	18	0.17
(1,848)	1:A:91:VAL:HG21	1:A:95:TRP:HE1	11	0.17
(1,848)	1:A:91:VAL:HG22	1:A:95:TRP:HE1	11	0.17
(1,848)	1:A:91:VAL:HG23	1:A:95:TRP:HE1	11	0.17
(1,841)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:146:ASP:H	3	0.17
(1,841)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:146:ASP:H	3	0.17
(1,841)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:146:ASP:H	3	0.17
(1,841)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:146:ASP:H	9	0.17
(1,841)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:146:ASP:H	9	0.17
(1,841)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:146:ASP:H	9	0.17
(1,831)	1:A:117:VAL:HG11	1:A:118:TYR:H	8	0.17
(1,831)	1:A:117:VAL:HG12	1:A:118:TYR:H	8	0.17

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,831)	1:A:117:VAL:HG13	1:A:118:TYR:H	8	0.17
(1,810)	1:A:136:GLN:H	1:A:147:LEU:HD11	3	0.17
(1,810)	1:A:136:GLN:H	1:A:147:LEU:HD12	3	0.17
(1,810)	1:A:136:GLN:H	1:A:147:LEU:HD13	3	0.17
(1,809)	1:A:91:VAL:HG11	1:A:92:ALA:H	12	0.17
(1,809)	1:A:91:VAL:HG12	1:A:92:ALA:H	12	0.17
(1,809)	1:A:91:VAL:HG13	1:A:92:ALA:H	12	0.17
(1,701)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD11	4	0.17
(1,701)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD12	4	0.17
(1,701)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD13	4	0.17
(1,701)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD11	4	0.17
(1,701)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD12	4	0.17
(1,701)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD13	4	0.17
(1,701)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD11	4	0.17
(1,701)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD12	4	0.17
(1,701)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD13	4	0.17
(1,572)	1:A:21:LEU:HD21	1:A:28:ILE:HD11	18	0.17
(1,572)	1:A:21:LEU:HD21	1:A:28:ILE:HD12	18	0.17
(1,572)	1:A:21:LEU:HD21	1:A:28:ILE:HD13	18	0.17
(1,572)	1:A:21:LEU:HD22	1:A:28:ILE:HD11	18	0.17
(1,572)	1:A:21:LEU:HD22	1:A:28:ILE:HD12	18	0.17
(1,572)	1:A:21:LEU:HD22	1:A:28:ILE:HD13	18	0.17
(1,572)	1:A:21:LEU:HD23	1:A:28:ILE:HD11	18	0.17
(1,572)	1:A:21:LEU:HD23	1:A:28:ILE:HD12	18	0.17
(1,572)	1:A:21:LEU:HD23	1:A:28:ILE:HD13	18	0.17
(1,570)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:145:LYS:H	6	0.17
(1,570)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:145:LYS:H	6	0.17
(1,570)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:145:LYS:H	6	0.17
(1,569)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD21	9	0.17
(1,569)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD22	9	0.17
(1,569)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD23	9	0.17
(1,569)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD21	9	0.17
(1,569)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD22	9	0.17
(1,569)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD23	9	0.17
(1,569)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD21	9	0.17
(1,569)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD22	9	0.17
(1,569)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD23	9	0.17
(1,563)	1:A:50:LEU:HD11	1:A:54:VAL:HG21	11	0.17
(1,563)	1:A:50:LEU:HD11	1:A:54:VAL:HG22	11	0.17
(1,563)	1:A:50:LEU:HD11	1:A:54:VAL:HG23	11	0.17
(1,563)	1:A:50:LEU:HD12	1:A:54:VAL:HG21	11	0.17
(1,563)	1:A:50:LEU:HD12	1:A:54:VAL:HG22	11	0.17

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,563)	1:A:50:LEU:HD12	1:A:54:VAL:HG23	11	0.17
(1,563)	1:A:50:LEU:HD13	1:A:54:VAL:HG21	11	0.17
(1,563)	1:A:50:LEU:HD13	1:A:54:VAL:HG22	11	0.17
(1,563)	1:A:50:LEU:HD13	1:A:54:VAL:HG23	11	0.17
(1,453)	1:A:118:TYR:H	1:A:121:LEU:HD21	3	0.17
(1,453)	1:A:118:TYR:H	1:A:121:LEU:HD22	3	0.17
(1,453)	1:A:118:TYR:H	1:A:121:LEU:HD23	3	0.17
(1,379)	1:A:188:ILE:HD11	1:A:190:LEU:HD11	12	0.17
(1,379)	1:A:188:ILE:HD11	1:A:190:LEU:HD12	12	0.17
(1,379)	1:A:188:ILE:HD11	1:A:190:LEU:HD13	12	0.17
(1,379)	1:A:188:ILE:HD12	1:A:190:LEU:HD11	12	0.17
(1,379)	1:A:188:ILE:HD12	1:A:190:LEU:HD12	12	0.17
(1,379)	1:A:188:ILE:HD12	1:A:190:LEU:HD13	12	0.17
(1,379)	1:A:188:ILE:HD13	1:A:190:LEU:HD11	12	0.17
(1,379)	1:A:188:ILE:HD13	1:A:190:LEU:HD12	12	0.17
(1,379)	1:A:188:ILE:HD13	1:A:190:LEU:HD13	12	0.17
(1,379)	1:A:188:ILE:HD11	1:A:190:LEU:HD11	19	0.17
(1,379)	1:A:188:ILE:HD11	1:A:190:LEU:HD12	19	0.17
(1,379)	1:A:188:ILE:HD11	1:A:190:LEU:HD13	19	0.17
(1,379)	1:A:188:ILE:HD12	1:A:190:LEU:HD11	19	0.17
(1,379)	1:A:188:ILE:HD12	1:A:190:LEU:HD12	19	0.17
(1,379)	1:A:188:ILE:HD12	1:A:190:LEU:HD13	19	0.17
(1,379)	1:A:188:ILE:HD13	1:A:190:LEU:HD11	19	0.17
(1,379)	1:A:188:ILE:HD13	1:A:190:LEU:HD12	19	0.17
(1,379)	1:A:188:ILE:HD13	1:A:190:LEU:HD13	19	0.17
(1,334)	1:A:90:ILE:H	1:A:91:VAL:HG21	17	0.17
(1,334)	1:A:90:ILE:H	1:A:91:VAL:HG22	17	0.17
(1,334)	1:A:90:ILE:H	1:A:91:VAL:HG23	17	0.17
(1,296)	1:A:137:LEU:HD11	1:A:149:LEU:H	1	0.17
(1,296)	1:A:137:LEU:HD12	1:A:149:LEU:H	1	0.17
(1,296)	1:A:137:LEU:HD13	1:A:149:LEU:H	1	0.17
(1,296)	1:A:137:LEU:HD11	1:A:149:LEU:H	6	0.17
(1,296)	1:A:137:LEU:HD12	1:A:149:LEU:H	6	0.17
(1,296)	1:A:137:LEU:HD13	1:A:149:LEU:H	6	0.17
(1,295)	1:A:153:LEU:H	1:A:190:LEU:HD21	11	0.17
(1,295)	1:A:153:LEU:H	1:A:190:LEU:HD22	11	0.17
(1,295)	1:A:153:LEU:H	1:A:190:LEU:HD23	11	0.17
(1,295)	1:A:153:LEU:H	1:A:190:LEU:HD21	12	0.17
(1,295)	1:A:153:LEU:H	1:A:190:LEU:HD22	12	0.17
(1,295)	1:A:153:LEU:H	1:A:190:LEU:HD23	12	0.17
(1,266)	1:A:117:VAL:HG21	1:A:118:TYR:H	19	0.17
(1,266)	1:A:117:VAL:HG22	1:A:118:TYR:H	19	0.17

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,266)	1:A:117:VAL:HG23	1:A:118:TYR:H	19	0.17
(1,261)	1:A:135:GLU:H	1:A:147:LEU:HD21	8	0.17
(1,261)	1:A:135:GLU:H	1:A:147:LEU:HD22	8	0.17
(1,261)	1:A:135:GLU:H	1:A:147:LEU:HD23	8	0.17
(1,206)	1:A:60:SER:H	1:A:62:VAL:HG21	5	0.17
(1,206)	1:A:60:SER:H	1:A:62:VAL:HG22	5	0.17
(1,206)	1:A:60:SER:H	1:A:62:VAL:HG23	5	0.17
(1,201)	1:A:157:GLN:H	1:A:190:LEU:HD21	20	0.17
(1,201)	1:A:157:GLN:H	1:A:190:LEU:HD22	20	0.17
(1,201)	1:A:157:GLN:H	1:A:190:LEU:HD23	20	0.17
(1,175)	1:A:163:LEU:HD11	1:A:166:LEU:H	4	0.17
(1,175)	1:A:163:LEU:HD12	1:A:166:LEU:H	4	0.17
(1,175)	1:A:163:LEU:HD13	1:A:166:LEU:H	4	0.17
(1,152)	1:A:37:ALA:H	1:A:57:VAL:H	15	0.17
(1,1113)	1:A:127:PHE:H	1:A:192:GLY:O	9	0.17
(1,1099)	1:A:124:GLY:O	1:A:98:ILE:H	5	0.17
(1,1084)	1:A:154:GLU:O	1:A:158:SER:H	7	0.17
(1,1070)	1:A:108:SER:O	1:A:112:GLN:H	11	0.17
(1,994)	1:A:79:THR:H	1:A:54:VAL:H	3	0.16
(1,994)	1:A:79:THR:H	1:A:54:VAL:H	12	0.16
(1,988)	1:A:117:VAL:HG21	1:A:121:LEU:H	15	0.16
(1,988)	1:A:117:VAL:HG22	1:A:121:LEU:H	15	0.16
(1,988)	1:A:117:VAL:HG23	1:A:121:LEU:H	15	0.16
(1,964)	1:A:116:LYS:H	1:A:117:VAL:HG21	3	0.16
(1,964)	1:A:116:LYS:H	1:A:117:VAL:HG22	3	0.16
(1,964)	1:A:116:LYS:H	1:A:117:VAL:HG23	3	0.16
(1,954)	1:A:70:LEU:H	1:A:78:ILE:HD11	1	0.16
(1,954)	1:A:70:LEU:H	1:A:78:ILE:HD12	1	0.16
(1,954)	1:A:70:LEU:H	1:A:78:ILE:HD13	1	0.16
(1,954)	1:A:70:LEU:H	1:A:78:ILE:HD11	19	0.16
(1,954)	1:A:70:LEU:H	1:A:78:ILE:HD12	19	0.16
(1,954)	1:A:70:LEU:H	1:A:78:ILE:HD13	19	0.16
(1,897)	1:A:163:LEU:HD21	1:A:193:GLN:H	17	0.16
(1,897)	1:A:163:LEU:HD22	1:A:193:GLN:H	17	0.16
(1,897)	1:A:163:LEU:HD23	1:A:193:GLN:H	17	0.16
(1,897)	1:A:163:LEU:HD21	1:A:193:GLN:H	19	0.16
(1,897)	1:A:163:LEU:HD22	1:A:193:GLN:H	19	0.16
(1,897)	1:A:163:LEU:HD23	1:A:193:GLN:H	19	0.16
(1,891)	1:A:125:GLY:H	1:A:163:LEU:HD21	4	0.16
(1,891)	1:A:125:GLY:H	1:A:163:LEU:HD22	4	0.16
(1,891)	1:A:125:GLY:H	1:A:163:LEU:HD23	4	0.16
(1,848)	1:A:91:VAL:HG21	1:A:95:TRP:HE1	7	0.16

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,848)	1:A:91:VAL:HG22	1:A:95:TRP:HE1	7	0.16
(1,848)	1:A:91:VAL:HG23	1:A:95:TRP:HE1	7	0.16
(1,812)	1:A:130:GLU:H	1:A:156:LEU:HD11	4	0.16
(1,812)	1:A:130:GLU:H	1:A:156:LEU:HD12	4	0.16
(1,812)	1:A:130:GLU:H	1:A:156:LEU:HD13	4	0.16
(1,755)	1:A:70:LEU:HD11	1:A:78:ILE:HD11	20	0.16
(1,755)	1:A:70:LEU:HD11	1:A:78:ILE:HD12	20	0.16
(1,755)	1:A:70:LEU:HD11	1:A:78:ILE:HD13	20	0.16
(1,755)	1:A:70:LEU:HD12	1:A:78:ILE:HD11	20	0.16
(1,755)	1:A:70:LEU:HD12	1:A:78:ILE:HD12	20	0.16
(1,755)	1:A:70:LEU:HD12	1:A:78:ILE:HD13	20	0.16
(1,755)	1:A:70:LEU:HD13	1:A:78:ILE:HD11	20	0.16
(1,755)	1:A:70:LEU:HD13	1:A:78:ILE:HD12	20	0.16
(1,755)	1:A:70:LEU:HD13	1:A:78:ILE:HD13	20	0.16
(1,732)	1:A:147:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD21	15	0.16
(1,732)	1:A:147:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD22	15	0.16
(1,732)	1:A:147:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD23	15	0.16
(1,732)	1:A:147:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD21	15	0.16
(1,732)	1:A:147:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD22	15	0.16
(1,732)	1:A:147:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD23	15	0.16
(1,732)	1:A:147:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD21	15	0.16
(1,732)	1:A:147:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD22	15	0.16
(1,732)	1:A:147:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD23	15	0.16
(1,732)	1:A:147:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD21	19	0.16
(1,732)	1:A:147:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD22	19	0.16
(1,732)	1:A:147:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD23	19	0.16
(1,732)	1:A:147:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD21	19	0.16
(1,732)	1:A:147:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD22	19	0.16
(1,732)	1:A:147:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD23	19	0.16
(1,732)	1:A:147:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD21	19	0.16
(1,732)	1:A:147:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD22	19	0.16
(1,732)	1:A:147:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD23	19	0.16
(1,701)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD11	5	0.16
(1,701)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD12	5	0.16
(1,701)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD13	5	0.16
(1,701)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD11	5	0.16
(1,701)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD12	5	0.16
(1,701)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD13	5	0.16
(1,701)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD11	5	0.16
(1,701)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD12	5	0.16
(1,701)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD13	5	0.16
(1,596)	1:A:164:ASN:H	1:A:195:LEU:H	9	0.16

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,570)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:145:LYS:H	11	0.16
(1,570)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:145:LYS:H	11	0.16
(1,570)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:145:LYS:H	11	0.16
(1,569)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD21	5	0.16
(1,569)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD22	5	0.16
(1,569)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD23	5	0.16
(1,569)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD21	5	0.16
(1,569)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD22	5	0.16
(1,569)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD23	5	0.16
(1,569)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD21	5	0.16
(1,569)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD22	5	0.16
(1,569)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD23	5	0.16
(1,569)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD21	12	0.16
(1,569)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD22	12	0.16
(1,569)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD23	12	0.16
(1,569)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD21	12	0.16
(1,569)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD22	12	0.16
(1,569)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD23	12	0.16
(1,569)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD21	12	0.16
(1,569)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD22	12	0.16
(1,569)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD23	12	0.16
(1,563)	1:A:50:LEU:HD11	1:A:54:VAL:HG21	4	0.16
(1,563)	1:A:50:LEU:HD11	1:A:54:VAL:HG22	4	0.16
(1,563)	1:A:50:LEU:HD11	1:A:54:VAL:HG23	4	0.16
(1,563)	1:A:50:LEU:HD12	1:A:54:VAL:HG21	4	0.16
(1,563)	1:A:50:LEU:HD12	1:A:54:VAL:HG22	4	0.16
(1,563)	1:A:50:LEU:HD12	1:A:54:VAL:HG23	4	0.16
(1,563)	1:A:50:LEU:HD13	1:A:54:VAL:HG21	4	0.16
(1,563)	1:A:50:LEU:HD13	1:A:54:VAL:HG22	4	0.16
(1,563)	1:A:50:LEU:HD13	1:A:54:VAL:HG23	4	0.16
(1,507)	1:A:37:ALA:H	1:A:57:VAL:HG21	6	0.16
(1,507)	1:A:37:ALA:H	1:A:57:VAL:HG22	6	0.16
(1,507)	1:A:37:ALA:H	1:A:57:VAL:HG23	6	0.16
(1,379)	1:A:188:ILE:HD11	1:A:190:LEU:HD11	18	0.16
(1,379)	1:A:188:ILE:HD11	1:A:190:LEU:HD12	18	0.16
(1,379)	1:A:188:ILE:HD11	1:A:190:LEU:HD13	18	0.16
(1,379)	1:A:188:ILE:HD12	1:A:190:LEU:HD11	18	0.16
(1,379)	1:A:188:ILE:HD12	1:A:190:LEU:HD12	18	0.16
(1,379)	1:A:188:ILE:HD12	1:A:190:LEU:HD13	18	0.16
(1,379)	1:A:188:ILE:HD13	1:A:190:LEU:HD11	18	0.16
(1,379)	1:A:188:ILE:HD13	1:A:190:LEU:HD12	18	0.16
(1,379)	1:A:188:ILE:HD13	1:A:190:LEU:HD13	18	0.16

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,368)	1:A:24:VAL:HG21	1:A:128:ILE:HD11	18	0.16
(1,368)	1:A:24:VAL:HG21	1:A:128:ILE:HD12	18	0.16
(1,368)	1:A:24:VAL:HG21	1:A:128:ILE:HD13	18	0.16
(1,368)	1:A:24:VAL:HG22	1:A:128:ILE:HD11	18	0.16
(1,368)	1:A:24:VAL:HG22	1:A:128:ILE:HD12	18	0.16
(1,368)	1:A:24:VAL:HG22	1:A:128:ILE:HD13	18	0.16
(1,368)	1:A:24:VAL:HG23	1:A:128:ILE:HD11	18	0.16
(1,368)	1:A:24:VAL:HG23	1:A:128:ILE:HD12	18	0.16
(1,368)	1:A:24:VAL:HG23	1:A:128:ILE:HD13	18	0.16
(1,310)	1:A:173:ARG:H	1:A:187:LEU:HD11	19	0.16
(1,310)	1:A:173:ARG:H	1:A:187:LEU:HD12	19	0.16
(1,310)	1:A:173:ARG:H	1:A:187:LEU:HD13	19	0.16
(1,301)	1:A:104:HIS:H	1:A:105:LEU:HD21	4	0.16
(1,301)	1:A:104:HIS:H	1:A:105:LEU:HD22	4	0.16
(1,301)	1:A:104:HIS:H	1:A:105:LEU:HD23	4	0.16
(1,296)	1:A:137:LEU:HD11	1:A:149:LEU:H	4	0.16
(1,296)	1:A:137:LEU:HD12	1:A:149:LEU:H	4	0.16
(1,296)	1:A:137:LEU:HD13	1:A:149:LEU:H	4	0.16
(1,296)	1:A:137:LEU:HD11	1:A:149:LEU:H	11	0.16
(1,296)	1:A:137:LEU:HD12	1:A:149:LEU:H	11	0.16
(1,296)	1:A:137:LEU:HD13	1:A:149:LEU:H	11	0.16
(1,295)	1:A:153:LEU:H	1:A:190:LEU:HD21	1	0.16
(1,295)	1:A:153:LEU:H	1:A:190:LEU:HD22	1	0.16
(1,295)	1:A:153:LEU:H	1:A:190:LEU:HD23	1	0.16
(1,295)	1:A:153:LEU:H	1:A:190:LEU:HD21	16	0.16
(1,295)	1:A:153:LEU:H	1:A:190:LEU:HD22	16	0.16
(1,295)	1:A:153:LEU:H	1:A:190:LEU:HD23	16	0.16
(1,266)	1:A:117:VAL:HG21	1:A:118:TYR:H	20	0.16
(1,266)	1:A:117:VAL:HG22	1:A:118:TYR:H	20	0.16
(1,266)	1:A:117:VAL:HG23	1:A:118:TYR:H	20	0.16
(1,254)	1:A:57:VAL:HG11	1:A:83:SER:H	16	0.16
(1,254)	1:A:57:VAL:HG12	1:A:83:SER:H	16	0.16
(1,254)	1:A:57:VAL:HG13	1:A:83:SER:H	16	0.16
(1,229)	1:A:147:LEU:H	1:A:147:LEU:HD21	9	0.16
(1,229)	1:A:147:LEU:H	1:A:147:LEU:HD22	9	0.16
(1,229)	1:A:147:LEU:H	1:A:147:LEU:HD23	9	0.16
(1,211)	1:A:85:LEU:H	1:A:88:PHE:H	1	0.16
(1,168)	1:A:137:LEU:H	1:A:150:LEU:HD21	17	0.16
(1,168)	1:A:137:LEU:H	1:A:150:LEU:HD22	17	0.16
(1,168)	1:A:137:LEU:H	1:A:150:LEU:HD23	17	0.16
(1,152)	1:A:37:ALA:H	1:A:57:VAL:H	16	0.16
(1,1113)	1:A:127:PHE:H	1:A:192:GLY:O	8	0.16

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1113)	1:A:127:PHE:H	1:A:192:GLY:O	18	0.16
(1,1099)	1:A:124:GLY:O	1:A:98:ILE:H	13	0.16
(1,109)	1:A:149:LEU:H	1:A:150:LEU:H	18	0.16
(1,1084)	1:A:154:GLU:O	1:A:158:SER:H	16	0.16
(1,1026)	1:A:95:TRP:HE1	1:A:91:VAL:H	4	0.16
(1,1016)	1:A:165:TRP:HZ3	1:A:127:PHE:HZ	9	0.16
(1,1003)	1:A:59:GLN:H	1:A:37:ALA:H	16	0.16
(1,994)	1:A:79:THR:H	1:A:54:VAL:H	18	0.15
(1,988)	1:A:117:VAL:HG21	1:A:121:LEU:H	13	0.15
(1,988)	1:A:117:VAL:HG22	1:A:121:LEU:H	13	0.15
(1,988)	1:A:117:VAL:HG23	1:A:121:LEU:H	13	0.15
(1,972)	1:A:85:LEU:HD21	1:A:89:ASP:H	12	0.15
(1,972)	1:A:85:LEU:HD22	1:A:89:ASP:H	12	0.15
(1,972)	1:A:85:LEU:HD23	1:A:89:ASP:H	12	0.15
(1,971)	1:A:160:LEU:HD11	1:A:163:LEU:H	9	0.15
(1,971)	1:A:160:LEU:HD12	1:A:163:LEU:H	9	0.15
(1,971)	1:A:160:LEU:HD13	1:A:163:LEU:H	9	0.15
(1,964)	1:A:116:LYS:H	1:A:117:VAL:HG21	13	0.15
(1,964)	1:A:116:LYS:H	1:A:117:VAL:HG22	13	0.15
(1,964)	1:A:116:LYS:H	1:A:117:VAL:HG23	13	0.15
(1,936)	1:A:153:LEU:HD21	1:A:157:GLN:H	1	0.15
(1,936)	1:A:153:LEU:HD22	1:A:157:GLN:H	1	0.15
(1,936)	1:A:153:LEU:HD23	1:A:157:GLN:H	1	0.15
(1,936)	1:A:153:LEU:HD21	1:A:157:GLN:H	7	0.15
(1,936)	1:A:153:LEU:HD22	1:A:157:GLN:H	7	0.15
(1,936)	1:A:153:LEU:HD23	1:A:157:GLN:H	7	0.15
(1,915)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:148:ASP:H	1	0.15
(1,915)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:148:ASP:H	1	0.15
(1,915)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:148:ASP:H	1	0.15
(1,900)	1:A:153:LEU:H	1:A:190:LEU:HD11	18	0.15
(1,900)	1:A:153:LEU:H	1:A:190:LEU:HD12	18	0.15
(1,900)	1:A:153:LEU:H	1:A:190:LEU:HD13	18	0.15
(1,897)	1:A:163:LEU:HD21	1:A:193:GLN:H	15	0.15
(1,897)	1:A:163:LEU:HD22	1:A:193:GLN:H	15	0.15
(1,897)	1:A:163:LEU:HD23	1:A:193:GLN:H	15	0.15
(1,897)	1:A:163:LEU:HD21	1:A:193:GLN:H	20	0.15
(1,897)	1:A:163:LEU:HD22	1:A:193:GLN:H	20	0.15
(1,897)	1:A:163:LEU:HD23	1:A:193:GLN:H	20	0.15
(1,891)	1:A:125:GLY:H	1:A:163:LEU:HD21	10	0.15
(1,891)	1:A:125:GLY:H	1:A:163:LEU:HD22	10	0.15
(1,891)	1:A:125:GLY:H	1:A:163:LEU:HD23	10	0.15
(1,885)	1:A:50:LEU:H	1:A:54:VAL:HG21	13	0.15

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,885)	1:A:50:LEU:H	1:A:54:VAL:HG22	13	0.15
(1,885)	1:A:50:LEU:H	1:A:54:VAL:HG23	13	0.15
(1,848)	1:A:91:VAL:HG21	1:A:95:TRP:HE1	8	0.15
(1,848)	1:A:91:VAL:HG22	1:A:95:TRP:HE1	8	0.15
(1,848)	1:A:91:VAL:HG23	1:A:95:TRP:HE1	8	0.15
(1,848)	1:A:91:VAL:HG21	1:A:95:TRP:HE1	18	0.15
(1,848)	1:A:91:VAL:HG22	1:A:95:TRP:HE1	18	0.15
(1,848)	1:A:91:VAL:HG23	1:A:95:TRP:HE1	18	0.15
(1,847)	1:A:37:ALA:H	1:A:57:VAL:HG11	20	0.15
(1,847)	1:A:37:ALA:H	1:A:57:VAL:HG12	20	0.15
(1,847)	1:A:37:ALA:H	1:A:57:VAL:HG13	20	0.15
(1,827)	1:A:34:LEU:HD11	1:A:36:LEU:H	6	0.15
(1,827)	1:A:34:LEU:HD12	1:A:36:LEU:H	6	0.15
(1,827)	1:A:34:LEU:HD13	1:A:36:LEU:H	6	0.15
(1,827)	1:A:34:LEU:HD11	1:A:36:LEU:H	8	0.15
(1,827)	1:A:34:LEU:HD12	1:A:36:LEU:H	8	0.15
(1,827)	1:A:34:LEU:HD13	1:A:36:LEU:H	8	0.15
(1,827)	1:A:34:LEU:HD11	1:A:36:LEU:H	9	0.15
(1,827)	1:A:34:LEU:HD12	1:A:36:LEU:H	9	0.15
(1,827)	1:A:34:LEU:HD13	1:A:36:LEU:H	9	0.15
(1,809)	1:A:91:VAL:HG11	1:A:92:ALA:H	5	0.15
(1,809)	1:A:91:VAL:HG12	1:A:92:ALA:H	5	0.15
(1,809)	1:A:91:VAL:HG13	1:A:92:ALA:H	5	0.15
(1,809)	1:A:91:VAL:HG11	1:A:92:ALA:H	9	0.15
(1,809)	1:A:91:VAL:HG12	1:A:92:ALA:H	9	0.15
(1,809)	1:A:91:VAL:HG13	1:A:92:ALA:H	9	0.15
(1,801)	1:A:113:LEU:HD11	1:A:116:LYS:H	17	0.15
(1,801)	1:A:113:LEU:HD12	1:A:116:LYS:H	17	0.15
(1,801)	1:A:113:LEU:HD13	1:A:116:LYS:H	17	0.15
(1,790)	1:A:84:ASN:H	1:A:85:LEU:HD21	20	0.15
(1,790)	1:A:84:ASN:H	1:A:85:LEU:HD22	20	0.15
(1,790)	1:A:84:ASN:H	1:A:85:LEU:HD23	20	0.15
(1,755)	1:A:70:LEU:HD11	1:A:78:ILE:HD11	18	0.15
(1,755)	1:A:70:LEU:HD11	1:A:78:ILE:HD12	18	0.15
(1,755)	1:A:70:LEU:HD11	1:A:78:ILE:HD13	18	0.15
(1,755)	1:A:70:LEU:HD12	1:A:78:ILE:HD11	18	0.15
(1,755)	1:A:70:LEU:HD12	1:A:78:ILE:HD12	18	0.15
(1,755)	1:A:70:LEU:HD12	1:A:78:ILE:HD13	18	0.15
(1,755)	1:A:70:LEU:HD13	1:A:78:ILE:HD11	18	0.15
(1,755)	1:A:70:LEU:HD13	1:A:78:ILE:HD12	18	0.15
(1,755)	1:A:70:LEU:HD13	1:A:78:ILE:HD13	18	0.15
(1,732)	1:A:147:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD21	9	0.15

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,732)	1:A:147:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD22	9	0.15
(1,732)	1:A:147:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD23	9	0.15
(1,732)	1:A:147:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD21	9	0.15
(1,732)	1:A:147:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD22	9	0.15
(1,732)	1:A:147:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD23	9	0.15
(1,732)	1:A:147:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD21	9	0.15
(1,732)	1:A:147:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD22	9	0.15
(1,732)	1:A:147:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD23	9	0.15
(1,701)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD11	19	0.15
(1,701)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD12	19	0.15
(1,701)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD13	19	0.15
(1,701)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD11	19	0.15
(1,701)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD12	19	0.15
(1,701)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD13	19	0.15
(1,701)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD11	19	0.15
(1,701)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD12	19	0.15
(1,701)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD13	19	0.15
(1,701)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD11	20	0.15
(1,701)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD12	20	0.15
(1,701)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD13	20	0.15
(1,701)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD11	20	0.15
(1,701)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD12	20	0.15
(1,701)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD13	20	0.15
(1,701)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD11	20	0.15
(1,701)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD12	20	0.15
(1,701)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD13	20	0.15
(1,664)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:117:VAL:HG11	13	0.15
(1,664)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:117:VAL:HG12	13	0.15
(1,664)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:117:VAL:HG13	13	0.15
(1,664)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:117:VAL:HG11	13	0.15
(1,664)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:117:VAL:HG12	13	0.15
(1,664)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:117:VAL:HG13	13	0.15
(1,664)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:117:VAL:HG11	13	0.15
(1,664)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:117:VAL:HG12	13	0.15
(1,664)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:117:VAL:HG13	13	0.15
(1,622)	1:A:133:ALA:H	1:A:137:LEU:H	8	0.15
(1,570)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:145:LYS:H	5	0.15
(1,570)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:145:LYS:H	5	0.15
(1,570)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:145:LYS:H	5	0.15
(1,570)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:145:LYS:H	10	0.15
(1,570)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:145:LYS:H	10	0.15
(1,570)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:145:LYS:H	10	0.15

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,569)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD21	13	0.15
(1,569)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD22	13	0.15
(1,569)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD23	13	0.15
(1,569)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD21	13	0.15
(1,569)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD22	13	0.15
(1,569)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD23	13	0.15
(1,569)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD21	13	0.15
(1,569)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD22	13	0.15
(1,569)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD23	13	0.15
(1,566)	1:A:57:VAL:HG21	1:A:85:LEU:HD11	2	0.15
(1,566)	1:A:57:VAL:HG21	1:A:85:LEU:HD12	2	0.15
(1,566)	1:A:57:VAL:HG21	1:A:85:LEU:HD13	2	0.15
(1,566)	1:A:57:VAL:HG22	1:A:85:LEU:HD11	2	0.15
(1,566)	1:A:57:VAL:HG22	1:A:85:LEU:HD12	2	0.15
(1,566)	1:A:57:VAL:HG22	1:A:85:LEU:HD13	2	0.15
(1,566)	1:A:57:VAL:HG23	1:A:85:LEU:HD11	2	0.15
(1,566)	1:A:57:VAL:HG23	1:A:85:LEU:HD12	2	0.15
(1,566)	1:A:57:VAL:HG23	1:A:85:LEU:HD13	2	0.15
(1,563)	1:A:50:LEU:HD11	1:A:54:VAL:HG21	13	0.15
(1,563)	1:A:50:LEU:HD11	1:A:54:VAL:HG22	13	0.15
(1,563)	1:A:50:LEU:HD11	1:A:54:VAL:HG23	13	0.15
(1,563)	1:A:50:LEU:HD12	1:A:54:VAL:HG21	13	0.15
(1,563)	1:A:50:LEU:HD12	1:A:54:VAL:HG22	13	0.15
(1,563)	1:A:50:LEU:HD12	1:A:54:VAL:HG23	13	0.15
(1,563)	1:A:50:LEU:HD13	1:A:54:VAL:HG21	13	0.15
(1,563)	1:A:50:LEU:HD13	1:A:54:VAL:HG22	13	0.15
(1,563)	1:A:50:LEU:HD13	1:A:54:VAL:HG23	13	0.15
(1,546)	1:A:121:LEU:HD11	1:A:163:LEU:HD21	8	0.15
(1,546)	1:A:121:LEU:HD11	1:A:163:LEU:HD22	8	0.15
(1,546)	1:A:121:LEU:HD11	1:A:163:LEU:HD23	8	0.15
(1,546)	1:A:121:LEU:HD12	1:A:163:LEU:HD21	8	0.15
(1,546)	1:A:121:LEU:HD12	1:A:163:LEU:HD22	8	0.15
(1,546)	1:A:121:LEU:HD12	1:A:163:LEU:HD23	8	0.15
(1,546)	1:A:121:LEU:HD13	1:A:163:LEU:HD21	8	0.15
(1,546)	1:A:121:LEU:HD13	1:A:163:LEU:HD22	8	0.15
(1,546)	1:A:121:LEU:HD13	1:A:163:LEU:HD23	8	0.15
(1,408)	1:A:163:LEU:HD21	1:A:195:LEU:HD21	15	0.15
(1,408)	1:A:163:LEU:HD21	1:A:195:LEU:HD22	15	0.15
(1,408)	1:A:163:LEU:HD21	1:A:195:LEU:HD23	15	0.15
(1,408)	1:A:163:LEU:HD22	1:A:195:LEU:HD21	15	0.15
(1,408)	1:A:163:LEU:HD22	1:A:195:LEU:HD22	15	0.15
(1,408)	1:A:163:LEU:HD22	1:A:195:LEU:HD23	15	0.15

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,408)	1:A:163:LEU:HD23	1:A:195:LEU:HD21	15	0.15
(1,408)	1:A:163:LEU:HD23	1:A:195:LEU:HD22	15	0.15
(1,408)	1:A:163:LEU:HD23	1:A:195:LEU:HD23	15	0.15
(1,361)	1:A:72:GLN:H	1:A:78:ILE:HD11	2	0.15
(1,361)	1:A:72:GLN:H	1:A:78:ILE:HD12	2	0.15
(1,361)	1:A:72:GLN:H	1:A:78:ILE:HD13	2	0.15
(1,346)	1:A:175:LEU:HD21	1:A:184:LYS:H	4	0.15
(1,346)	1:A:175:LEU:HD22	1:A:184:LYS:H	4	0.15
(1,346)	1:A:175:LEU:HD23	1:A:184:LYS:H	4	0.15
(1,334)	1:A:90:ILE:H	1:A:91:VAL:HG21	14	0.15
(1,334)	1:A:90:ILE:H	1:A:91:VAL:HG22	14	0.15
(1,334)	1:A:90:ILE:H	1:A:91:VAL:HG23	14	0.15
(1,295)	1:A:153:LEU:H	1:A:190:LEU:HD21	19	0.15
(1,295)	1:A:153:LEU:H	1:A:190:LEU:HD22	19	0.15
(1,295)	1:A:153:LEU:H	1:A:190:LEU:HD23	19	0.15
(1,259)	1:A:71:ALA:H	1:A:78:ILE:HD11	2	0.15
(1,259)	1:A:71:ALA:H	1:A:78:ILE:HD12	2	0.15
(1,259)	1:A:71:ALA:H	1:A:78:ILE:HD13	2	0.15
(1,226)	1:A:57:VAL:HG11	1:A:82:GLN:H	1	0.15
(1,226)	1:A:57:VAL:HG12	1:A:82:GLN:H	1	0.15
(1,226)	1:A:57:VAL:HG13	1:A:82:GLN:H	1	0.15
(1,217)	1:A:163:LEU:HD11	1:A:195:LEU:H	10	0.15
(1,217)	1:A:163:LEU:HD12	1:A:195:LEU:H	10	0.15
(1,217)	1:A:163:LEU:HD13	1:A:195:LEU:H	10	0.15
(1,217)	1:A:163:LEU:HD11	1:A:195:LEU:H	12	0.15
(1,217)	1:A:163:LEU:HD12	1:A:195:LEU:H	12	0.15
(1,217)	1:A:163:LEU:HD13	1:A:195:LEU:H	12	0.15
(1,205)	1:A:24:VAL:HG11	1:A:192:GLY:H	10	0.15
(1,205)	1:A:24:VAL:HG12	1:A:192:GLY:H	10	0.15
(1,205)	1:A:24:VAL:HG13	1:A:192:GLY:H	10	0.15
(1,205)	1:A:24:VAL:HG11	1:A:192:GLY:H	11	0.15
(1,205)	1:A:24:VAL:HG12	1:A:192:GLY:H	11	0.15
(1,205)	1:A:24:VAL:HG13	1:A:192:GLY:H	11	0.15
(1,202)	1:A:138:GLN:H	1:A:147:LEU:HD21	4	0.15
(1,202)	1:A:138:GLN:H	1:A:147:LEU:HD22	4	0.15
(1,202)	1:A:138:GLN:H	1:A:147:LEU:HD23	4	0.15
(1,174)	1:A:61:SER:H	1:A:62:VAL:HG11	4	0.15
(1,174)	1:A:61:SER:H	1:A:62:VAL:HG12	4	0.15
(1,174)	1:A:61:SER:H	1:A:62:VAL:HG13	4	0.15
(1,174)	1:A:61:SER:H	1:A:62:VAL:HG11	20	0.15
(1,174)	1:A:61:SER:H	1:A:62:VAL:HG12	20	0.15
(1,174)	1:A:61:SER:H	1:A:62:VAL:HG13	20	0.15

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,168)	1:A:137:LEU:H	1:A:150:LEU:HD21	18	0.15
(1,168)	1:A:137:LEU:H	1:A:150:LEU:HD22	18	0.15
(1,168)	1:A:137:LEU:H	1:A:150:LEU:HD23	18	0.15
(1,1084)	1:A:154:GLU:O	1:A:158:SER:H	5	0.15
(1,1070)	1:A:108:SER:O	1:A:112:GLN:H	9	0.15
(1,1070)	1:A:108:SER:O	1:A:112:GLN:H	14	0.15
(1,1032)	1:A:22:VAL:O	1:A:26:ASN:H	9	0.15
(1,101)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:GLN:H	2	0.15
(1,1006)	1:A:100:SER:H	1:A:126:VAL:H	2	0.15
(1,1006)	1:A:100:SER:H	1:A:126:VAL:H	5	0.15
(1,994)	1:A:79:THR:H	1:A:54:VAL:H	13	0.14
(1,964)	1:A:116:LYS:H	1:A:117:VAL:HG21	4	0.14
(1,964)	1:A:116:LYS:H	1:A:117:VAL:HG22	4	0.14
(1,964)	1:A:116:LYS:H	1:A:117:VAL:HG23	4	0.14
(1,964)	1:A:116:LYS:H	1:A:117:VAL:HG21	7	0.14
(1,964)	1:A:116:LYS:H	1:A:117:VAL:HG22	7	0.14
(1,964)	1:A:116:LYS:H	1:A:117:VAL:HG23	7	0.14
(1,964)	1:A:116:LYS:H	1:A:117:VAL:HG21	10	0.14
(1,964)	1:A:116:LYS:H	1:A:117:VAL:HG22	10	0.14
(1,964)	1:A:116:LYS:H	1:A:117:VAL:HG23	10	0.14
(1,964)	1:A:116:LYS:H	1:A:117:VAL:HG21	17	0.14
(1,964)	1:A:116:LYS:H	1:A:117:VAL:HG22	17	0.14
(1,964)	1:A:116:LYS:H	1:A:117:VAL:HG23	17	0.14
(1,915)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:148:ASP:H	19	0.14
(1,915)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:148:ASP:H	19	0.14
(1,915)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:148:ASP:H	19	0.14
(1,912)	1:A:56:ALA:H	1:A:81:VAL:HG21	2	0.14
(1,912)	1:A:56:ALA:H	1:A:81:VAL:HG22	2	0.14
(1,912)	1:A:56:ALA:H	1:A:81:VAL:HG23	2	0.14
(1,897)	1:A:163:LEU:HD21	1:A:193:GLN:H	1	0.14
(1,897)	1:A:163:LEU:HD22	1:A:193:GLN:H	1	0.14
(1,897)	1:A:163:LEU:HD23	1:A:193:GLN:H	1	0.14
(1,896)	1:A:166:LEU:HD11	1:A:193:GLN:H	15	0.14
(1,896)	1:A:166:LEU:HD12	1:A:193:GLN:H	15	0.14
(1,896)	1:A:166:LEU:HD13	1:A:193:GLN:H	15	0.14
(1,885)	1:A:50:LEU:H	1:A:54:VAL:HG21	16	0.14
(1,885)	1:A:50:LEU:H	1:A:54:VAL:HG22	16	0.14
(1,885)	1:A:50:LEU:H	1:A:54:VAL:HG23	16	0.14
(1,841)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:146:ASP:H	10	0.14
(1,841)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:146:ASP:H	10	0.14
(1,841)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:146:ASP:H	10	0.14
(1,814)	1:A:147:LEU:H	1:A:150:LEU:HD11	8	0.14

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,814)	1:A:147:LEU:H	1:A:150:LEU:HD12	8	0.14
(1,814)	1:A:147:LEU:H	1:A:150:LEU:HD13	8	0.14
(1,755)	1:A:70:LEU:HD11	1:A:78:ILE:HD11	16	0.14
(1,755)	1:A:70:LEU:HD11	1:A:78:ILE:HD12	16	0.14
(1,755)	1:A:70:LEU:HD11	1:A:78:ILE:HD13	16	0.14
(1,755)	1:A:70:LEU:HD12	1:A:78:ILE:HD11	16	0.14
(1,755)	1:A:70:LEU:HD12	1:A:78:ILE:HD12	16	0.14
(1,755)	1:A:70:LEU:HD12	1:A:78:ILE:HD13	16	0.14
(1,755)	1:A:70:LEU:HD13	1:A:78:ILE:HD11	16	0.14
(1,755)	1:A:70:LEU:HD13	1:A:78:ILE:HD12	16	0.14
(1,755)	1:A:70:LEU:HD13	1:A:78:ILE:HD13	16	0.14
(1,701)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD11	10	0.14
(1,701)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD12	10	0.14
(1,701)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD13	10	0.14
(1,701)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD11	10	0.14
(1,701)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD12	10	0.14
(1,701)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD13	10	0.14
(1,701)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD11	10	0.14
(1,701)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD12	10	0.14
(1,701)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD13	10	0.14
(1,693)	1:A:91:VAL:HG21	1:A:98:ILE:HD11	11	0.14
(1,693)	1:A:91:VAL:HG21	1:A:98:ILE:HD12	11	0.14
(1,693)	1:A:91:VAL:HG21	1:A:98:ILE:HD13	11	0.14
(1,693)	1:A:91:VAL:HG22	1:A:98:ILE:HD11	11	0.14
(1,693)	1:A:91:VAL:HG22	1:A:98:ILE:HD12	11	0.14
(1,693)	1:A:91:VAL:HG22	1:A:98:ILE:HD13	11	0.14
(1,693)	1:A:91:VAL:HG23	1:A:98:ILE:HD11	11	0.14
(1,693)	1:A:91:VAL:HG23	1:A:98:ILE:HD12	11	0.14
(1,693)	1:A:91:VAL:HG23	1:A:98:ILE:HD13	11	0.14
(1,641)	1:A:32:LYS:H	1:A:53:GLU:H	9	0.14
(1,570)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:145:LYS:H	4	0.14
(1,570)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:145:LYS:H	4	0.14
(1,570)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:145:LYS:H	4	0.14
(1,566)	1:A:57:VAL:HG21	1:A:85:LEU:HD11	18	0.14
(1,566)	1:A:57:VAL:HG21	1:A:85:LEU:HD12	18	0.14
(1,566)	1:A:57:VAL:HG21	1:A:85:LEU:HD13	18	0.14
(1,566)	1:A:57:VAL:HG22	1:A:85:LEU:HD11	18	0.14
(1,566)	1:A:57:VAL:HG22	1:A:85:LEU:HD12	18	0.14
(1,566)	1:A:57:VAL:HG22	1:A:85:LEU:HD13	18	0.14
(1,566)	1:A:57:VAL:HG23	1:A:85:LEU:HD11	18	0.14
(1,566)	1:A:57:VAL:HG23	1:A:85:LEU:HD12	18	0.14
(1,566)	1:A:57:VAL:HG23	1:A:85:LEU:HD13	18	0.14

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,563)	1:A:50:LEU:HD11	1:A:54:VAL:HG21	1	0.14
(1,563)	1:A:50:LEU:HD11	1:A:54:VAL:HG22	1	0.14
(1,563)	1:A:50:LEU:HD11	1:A:54:VAL:HG23	1	0.14
(1,563)	1:A:50:LEU:HD12	1:A:54:VAL:HG21	1	0.14
(1,563)	1:A:50:LEU:HD12	1:A:54:VAL:HG22	1	0.14
(1,563)	1:A:50:LEU:HD12	1:A:54:VAL:HG23	1	0.14
(1,563)	1:A:50:LEU:HD13	1:A:54:VAL:HG21	1	0.14
(1,563)	1:A:50:LEU:HD13	1:A:54:VAL:HG22	1	0.14
(1,563)	1:A:50:LEU:HD13	1:A:54:VAL:HG23	1	0.14
(1,546)	1:A:121:LEU:HD11	1:A:163:LEU:HD21	1	0.14
(1,546)	1:A:121:LEU:HD11	1:A:163:LEU:HD22	1	0.14
(1,546)	1:A:121:LEU:HD11	1:A:163:LEU:HD23	1	0.14
(1,546)	1:A:121:LEU:HD12	1:A:163:LEU:HD21	1	0.14
(1,546)	1:A:121:LEU:HD12	1:A:163:LEU:HD22	1	0.14
(1,546)	1:A:121:LEU:HD12	1:A:163:LEU:HD23	1	0.14
(1,546)	1:A:121:LEU:HD13	1:A:163:LEU:HD21	1	0.14
(1,546)	1:A:121:LEU:HD13	1:A:163:LEU:HD22	1	0.14
(1,546)	1:A:121:LEU:HD13	1:A:163:LEU:HD23	1	0.14
(1,497)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:156:LEU:HD21	15	0.14
(1,497)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:156:LEU:HD22	15	0.14
(1,497)	1:A:129:LEU:HD21	1:A:156:LEU:HD23	15	0.14
(1,497)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:156:LEU:HD21	15	0.14
(1,497)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:156:LEU:HD22	15	0.14
(1,497)	1:A:129:LEU:HD22	1:A:156:LEU:HD23	15	0.14
(1,497)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:156:LEU:HD21	15	0.14
(1,497)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:156:LEU:HD22	15	0.14
(1,497)	1:A:129:LEU:HD23	1:A:156:LEU:HD23	15	0.14
(1,467)	1:A:62:VAL:HG11	1:A:63:GLY:H	8	0.14
(1,467)	1:A:62:VAL:HG12	1:A:63:GLY:H	8	0.14
(1,467)	1:A:62:VAL:HG13	1:A:63:GLY:H	8	0.14
(1,455)	1:A:121:LEU:HD21	1:A:160:LEU:HD21	12	0.14
(1,455)	1:A:121:LEU:HD21	1:A:160:LEU:HD22	12	0.14
(1,455)	1:A:121:LEU:HD21	1:A:160:LEU:HD23	12	0.14
(1,455)	1:A:121:LEU:HD22	1:A:160:LEU:HD21	12	0.14
(1,455)	1:A:121:LEU:HD22	1:A:160:LEU:HD22	12	0.14
(1,455)	1:A:121:LEU:HD22	1:A:160:LEU:HD23	12	0.14
(1,455)	1:A:121:LEU:HD23	1:A:160:LEU:HD21	12	0.14
(1,455)	1:A:121:LEU:HD23	1:A:160:LEU:HD22	12	0.14
(1,455)	1:A:121:LEU:HD23	1:A:160:LEU:HD23	12	0.14
(1,399)	1:A:34:LEU:H	1:A:99:VAL:HG21	5	0.14
(1,399)	1:A:34:LEU:H	1:A:99:VAL:HG22	5	0.14
(1,399)	1:A:34:LEU:H	1:A:99:VAL:HG23	5	0.14

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,382)	1:A:24:VAL:H	1:A:167:ILE:HD11	9	0.14
(1,382)	1:A:24:VAL:H	1:A:167:ILE:HD12	9	0.14
(1,382)	1:A:24:VAL:H	1:A:167:ILE:HD13	9	0.14
(1,379)	1:A:188:ILE:HD11	1:A:190:LEU:HD11	1	0.14
(1,379)	1:A:188:ILE:HD11	1:A:190:LEU:HD12	1	0.14
(1,379)	1:A:188:ILE:HD11	1:A:190:LEU:HD13	1	0.14
(1,379)	1:A:188:ILE:HD12	1:A:190:LEU:HD11	1	0.14
(1,379)	1:A:188:ILE:HD12	1:A:190:LEU:HD12	1	0.14
(1,379)	1:A:188:ILE:HD12	1:A:190:LEU:HD13	1	0.14
(1,379)	1:A:188:ILE:HD13	1:A:190:LEU:HD11	1	0.14
(1,379)	1:A:188:ILE:HD13	1:A:190:LEU:HD12	1	0.14
(1,379)	1:A:188:ILE:HD13	1:A:190:LEU:HD13	1	0.14
(1,379)	1:A:188:ILE:HD11	1:A:190:LEU:HD11	16	0.14
(1,379)	1:A:188:ILE:HD11	1:A:190:LEU:HD12	16	0.14
(1,379)	1:A:188:ILE:HD11	1:A:190:LEU:HD13	16	0.14
(1,379)	1:A:188:ILE:HD12	1:A:190:LEU:HD11	16	0.14
(1,379)	1:A:188:ILE:HD12	1:A:190:LEU:HD12	16	0.14
(1,379)	1:A:188:ILE:HD12	1:A:190:LEU:HD13	16	0.14
(1,379)	1:A:188:ILE:HD13	1:A:190:LEU:HD11	16	0.14
(1,379)	1:A:188:ILE:HD13	1:A:190:LEU:HD12	16	0.14
(1,379)	1:A:188:ILE:HD13	1:A:190:LEU:HD13	16	0.14
(1,37)	1:A:91:VAL:H	1:A:92:ALA:H	17	0.14
(1,37)	1:A:91:VAL:H	1:A:92:ALA:H	19	0.14
(1,37)	1:A:91:VAL:H	1:A:92:ALA:H	20	0.14
(1,334)	1:A:90:ILE:H	1:A:91:VAL:HG21	9	0.14
(1,334)	1:A:90:ILE:H	1:A:91:VAL:HG22	9	0.14
(1,334)	1:A:90:ILE:H	1:A:91:VAL:HG23	9	0.14
(1,296)	1:A:137:LEU:HD11	1:A:149:LEU:H	14	0.14
(1,296)	1:A:137:LEU:HD12	1:A:149:LEU:H	14	0.14
(1,296)	1:A:137:LEU:HD13	1:A:149:LEU:H	14	0.14
(1,295)	1:A:153:LEU:H	1:A:190:LEU:HD21	3	0.14
(1,295)	1:A:153:LEU:H	1:A:190:LEU:HD22	3	0.14
(1,295)	1:A:153:LEU:H	1:A:190:LEU:HD23	3	0.14
(1,295)	1:A:153:LEU:H	1:A:190:LEU:HD21	9	0.14
(1,295)	1:A:153:LEU:H	1:A:190:LEU:HD22	9	0.14
(1,295)	1:A:153:LEU:H	1:A:190:LEU:HD23	9	0.14
(1,266)	1:A:117:VAL:HG21	1:A:118:TYR:H	1	0.14
(1,266)	1:A:117:VAL:HG22	1:A:118:TYR:H	1	0.14
(1,266)	1:A:117:VAL:HG23	1:A:118:TYR:H	1	0.14
(1,266)	1:A:117:VAL:HG21	1:A:118:TYR:H	7	0.14
(1,266)	1:A:117:VAL:HG22	1:A:118:TYR:H	7	0.14
(1,266)	1:A:117:VAL:HG23	1:A:118:TYR:H	7	0.14

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,266)	1:A:117:VAL:HG21	1:A:118:TYR:H	16	0.14
(1,266)	1:A:117:VAL:HG22	1:A:118:TYR:H	16	0.14
(1,266)	1:A:117:VAL:HG23	1:A:118:TYR:H	16	0.14
(1,259)	1:A:71:ALA:H	1:A:78:ILE:HD11	15	0.14
(1,259)	1:A:71:ALA:H	1:A:78:ILE:HD12	15	0.14
(1,259)	1:A:71:ALA:H	1:A:78:ILE:HD13	15	0.14
(1,217)	1:A:163:LEU:HD11	1:A:195:LEU:H	18	0.14
(1,217)	1:A:163:LEU:HD12	1:A:195:LEU:H	18	0.14
(1,217)	1:A:163:LEU:HD13	1:A:195:LEU:H	18	0.14
(1,205)	1:A:24:VAL:HG11	1:A:192:GLY:H	17	0.14
(1,205)	1:A:24:VAL:HG12	1:A:192:GLY:H	17	0.14
(1,205)	1:A:24:VAL:HG13	1:A:192:GLY:H	17	0.14
(1,201)	1:A:157:GLN:H	1:A:190:LEU:HD21	11	0.14
(1,201)	1:A:157:GLN:H	1:A:190:LEU:HD22	11	0.14
(1,201)	1:A:157:GLN:H	1:A:190:LEU:HD23	11	0.14
(1,176)	1:A:186:ALA:H	1:A:187:LEU:HD21	17	0.14
(1,176)	1:A:186:ALA:H	1:A:187:LEU:HD22	17	0.14
(1,176)	1:A:186:ALA:H	1:A:187:LEU:HD23	17	0.14
(1,174)	1:A:61:SER:H	1:A:62:VAL:HG11	6	0.14
(1,174)	1:A:61:SER:H	1:A:62:VAL:HG12	6	0.14
(1,174)	1:A:61:SER:H	1:A:62:VAL:HG13	6	0.14
(1,174)	1:A:61:SER:H	1:A:62:VAL:HG11	17	0.14
(1,174)	1:A:61:SER:H	1:A:62:VAL:HG12	17	0.14
(1,174)	1:A:61:SER:H	1:A:62:VAL:HG13	17	0.14
(1,158)	1:A:163:LEU:H	1:A:195:LEU:HD21	16	0.14
(1,158)	1:A:163:LEU:H	1:A:195:LEU:HD22	16	0.14
(1,158)	1:A:163:LEU:H	1:A:195:LEU:HD23	16	0.14
(1,1113)	1:A:127:PHE:H	1:A:192:GLY:O	11	0.14
(1,1105)	1:A:102:PHE:H	1:A:128:ILE:O	8	0.14
(1,1099)	1:A:124:GLY:O	1:A:98:ILE:H	11	0.14
(1,1084)	1:A:154:GLU:O	1:A:158:SER:H	6	0.14
(1,1084)	1:A:154:GLU:O	1:A:158:SER:H	9	0.14
(1,1084)	1:A:154:GLU:O	1:A:158:SER:H	10	0.14
(1,1084)	1:A:154:GLU:O	1:A:158:SER:H	18	0.14
(1,1070)	1:A:108:SER:O	1:A:112:GLN:H	6	0.14
(1,1034)	1:A:23:SER:O	1:A:27:GLN:H	13	0.14
(1,1034)	1:A:23:SER:O	1:A:27:GLN:H	18	0.14
(1,1032)	1:A:22:VAL:O	1:A:26:ASN:H	4	0.14
(1,1023)	1:A:105:LEU:HD11	1:A:85:LEU:HD21	2	0.14
(1,1023)	1:A:105:LEU:HD11	1:A:85:LEU:HD22	2	0.14
(1,1023)	1:A:105:LEU:HD11	1:A:85:LEU:HD23	2	0.14
(1,1023)	1:A:105:LEU:HD12	1:A:85:LEU:HD21	2	0.14

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1023)	1:A:105:LEU:HD12	1:A:85:LEU:HD22	2	0.14
(1,1023)	1:A:105:LEU:HD12	1:A:85:LEU:HD23	2	0.14
(1,1023)	1:A:105:LEU:HD13	1:A:85:LEU:HD21	2	0.14
(1,1023)	1:A:105:LEU:HD13	1:A:85:LEU:HD22	2	0.14
(1,1023)	1:A:105:LEU:HD13	1:A:85:LEU:HD23	2	0.14
(1,1023)	1:A:105:LEU:HD11	1:A:85:LEU:HD21	20	0.14
(1,1023)	1:A:105:LEU:HD11	1:A:85:LEU:HD22	20	0.14
(1,1023)	1:A:105:LEU:HD11	1:A:85:LEU:HD23	20	0.14
(1,1023)	1:A:105:LEU:HD12	1:A:85:LEU:HD21	20	0.14
(1,1023)	1:A:105:LEU:HD12	1:A:85:LEU:HD22	20	0.14
(1,1023)	1:A:105:LEU:HD12	1:A:85:LEU:HD23	20	0.14
(1,1023)	1:A:105:LEU:HD13	1:A:85:LEU:HD21	20	0.14
(1,1023)	1:A:105:LEU:HD13	1:A:85:LEU:HD22	20	0.14
(1,1023)	1:A:105:LEU:HD13	1:A:85:LEU:HD23	20	0.14
(1,1003)	1:A:59:GLN:H	1:A:37:ALA:H	3	0.14
(1,1003)	1:A:59:GLN:H	1:A:37:ALA:H	8	0.14
(1,994)	1:A:79:THR:H	1:A:54:VAL:H	5	0.13
(1,972)	1:A:85:LEU:HD21	1:A:89:ASP:H	17	0.13
(1,972)	1:A:85:LEU:HD22	1:A:89:ASP:H	17	0.13
(1,972)	1:A:85:LEU:HD23	1:A:89:ASP:H	17	0.13
(1,964)	1:A:116:LYS:H	1:A:117:VAL:HG21	15	0.13
(1,964)	1:A:116:LYS:H	1:A:117:VAL:HG22	15	0.13
(1,964)	1:A:116:LYS:H	1:A:117:VAL:HG23	15	0.13
(1,964)	1:A:116:LYS:H	1:A:117:VAL:HG21	18	0.13
(1,964)	1:A:116:LYS:H	1:A:117:VAL:HG22	18	0.13
(1,964)	1:A:116:LYS:H	1:A:117:VAL:HG23	18	0.13
(1,936)	1:A:153:LEU:HD21	1:A:157:GLN:H	2	0.13
(1,936)	1:A:153:LEU:HD22	1:A:157:GLN:H	2	0.13
(1,936)	1:A:153:LEU:HD23	1:A:157:GLN:H	2	0.13
(1,936)	1:A:153:LEU:HD21	1:A:157:GLN:H	4	0.13
(1,936)	1:A:153:LEU:HD22	1:A:157:GLN:H	4	0.13
(1,936)	1:A:153:LEU:HD23	1:A:157:GLN:H	4	0.13
(1,936)	1:A:153:LEU:HD21	1:A:157:GLN:H	6	0.13
(1,936)	1:A:153:LEU:HD22	1:A:157:GLN:H	6	0.13
(1,936)	1:A:153:LEU:HD23	1:A:157:GLN:H	6	0.13
(1,936)	1:A:153:LEU:HD21	1:A:157:GLN:H	19	0.13
(1,936)	1:A:153:LEU:HD22	1:A:157:GLN:H	19	0.13
(1,936)	1:A:153:LEU:HD23	1:A:157:GLN:H	19	0.13
(1,924)	1:A:27:GLN:H	1:A:126:VAL:HG21	14	0.13
(1,924)	1:A:27:GLN:H	1:A:126:VAL:HG22	14	0.13
(1,924)	1:A:27:GLN:H	1:A:126:VAL:HG23	14	0.13
(1,902)	1:A:153:LEU:HD11	1:A:169:ASN:H	19	0.13

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,902)	1:A:153:LEU:HD12	1:A:169:ASN:H	19	0.13
(1,902)	1:A:153:LEU:HD13	1:A:169:ASN:H	19	0.13
(1,885)	1:A:50:LEU:H	1:A:54:VAL:HG21	6	0.13
(1,885)	1:A:50:LEU:H	1:A:54:VAL:HG22	6	0.13
(1,885)	1:A:50:LEU:H	1:A:54:VAL:HG23	6	0.13
(1,885)	1:A:50:LEU:H	1:A:54:VAL:HG21	8	0.13
(1,885)	1:A:50:LEU:H	1:A:54:VAL:HG22	8	0.13
(1,885)	1:A:50:LEU:H	1:A:54:VAL:HG23	8	0.13
(1,885)	1:A:50:LEU:H	1:A:54:VAL:HG21	15	0.13
(1,885)	1:A:50:LEU:H	1:A:54:VAL:HG22	15	0.13
(1,885)	1:A:50:LEU:H	1:A:54:VAL:HG23	15	0.13
(1,885)	1:A:50:LEU:H	1:A:54:VAL:HG21	20	0.13
(1,885)	1:A:50:LEU:H	1:A:54:VAL:HG22	20	0.13
(1,885)	1:A:50:LEU:H	1:A:54:VAL:HG23	20	0.13
(1,854)	1:A:131:GLY:H	1:A:153:LEU:HD21	8	0.13
(1,854)	1:A:131:GLY:H	1:A:153:LEU:HD22	8	0.13
(1,854)	1:A:131:GLY:H	1:A:153:LEU:HD23	8	0.13
(1,854)	1:A:131:GLY:H	1:A:153:LEU:HD21	13	0.13
(1,854)	1:A:131:GLY:H	1:A:153:LEU:HD22	13	0.13
(1,854)	1:A:131:GLY:H	1:A:153:LEU:HD23	13	0.13
(1,854)	1:A:131:GLY:H	1:A:153:LEU:HD21	16	0.13
(1,854)	1:A:131:GLY:H	1:A:153:LEU:HD22	16	0.13
(1,854)	1:A:131:GLY:H	1:A:153:LEU:HD23	16	0.13
(1,841)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:146:ASP:H	12	0.13
(1,841)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:146:ASP:H	12	0.13
(1,841)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:146:ASP:H	12	0.13
(1,827)	1:A:34:LEU:HD11	1:A:36:LEU:H	12	0.13
(1,827)	1:A:34:LEU:HD12	1:A:36:LEU:H	12	0.13
(1,827)	1:A:34:LEU:HD13	1:A:36:LEU:H	12	0.13
(1,811)	1:A:146:ASP:H	1:A:147:LEU:HD11	2	0.13
(1,811)	1:A:146:ASP:H	1:A:147:LEU:HD12	2	0.13
(1,811)	1:A:146:ASP:H	1:A:147:LEU:HD13	2	0.13
(1,809)	1:A:91:VAL:HG11	1:A:92:ALA:H	16	0.13
(1,809)	1:A:91:VAL:HG12	1:A:92:ALA:H	16	0.13
(1,809)	1:A:91:VAL:HG13	1:A:92:ALA:H	16	0.13
(1,806)	1:A:166:LEU:HD21	1:A:193:GLN:H	17	0.13
(1,806)	1:A:166:LEU:HD22	1:A:193:GLN:H	17	0.13
(1,806)	1:A:166:LEU:HD23	1:A:193:GLN:H	17	0.13
(1,79)	1:A:175:LEU:HD21	1:A:185:ALA:H	9	0.13
(1,79)	1:A:175:LEU:HD22	1:A:185:ALA:H	9	0.13
(1,79)	1:A:175:LEU:HD23	1:A:185:ALA:H	9	0.13
(1,79)	1:A:175:LEU:HD21	1:A:185:ALA:H	12	0.13

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,79)	1:A:175:LEU:HD22	1:A:185:ALA:H	12	0.13
(1,79)	1:A:175:LEU:HD23	1:A:185:ALA:H	12	0.13
(1,750)	1:A:81:VAL:HG21	1:A:85:LEU:HD21	3	0.13
(1,750)	1:A:81:VAL:HG21	1:A:85:LEU:HD22	3	0.13
(1,750)	1:A:81:VAL:HG21	1:A:85:LEU:HD23	3	0.13
(1,750)	1:A:81:VAL:HG22	1:A:85:LEU:HD21	3	0.13
(1,750)	1:A:81:VAL:HG22	1:A:85:LEU:HD22	3	0.13
(1,750)	1:A:81:VAL:HG22	1:A:85:LEU:HD23	3	0.13
(1,750)	1:A:81:VAL:HG23	1:A:85:LEU:HD21	3	0.13
(1,750)	1:A:81:VAL:HG23	1:A:85:LEU:HD22	3	0.13
(1,750)	1:A:81:VAL:HG23	1:A:85:LEU:HD23	3	0.13
(1,732)	1:A:147:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD21	1	0.13
(1,732)	1:A:147:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD22	1	0.13
(1,732)	1:A:147:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD23	1	0.13
(1,732)	1:A:147:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD21	1	0.13
(1,732)	1:A:147:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD22	1	0.13
(1,732)	1:A:147:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD23	1	0.13
(1,732)	1:A:147:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD21	1	0.13
(1,732)	1:A:147:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD22	1	0.13
(1,732)	1:A:147:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD23	1	0.13
(1,732)	1:A:147:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD21	10	0.13
(1,732)	1:A:147:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD22	10	0.13
(1,732)	1:A:147:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD23	10	0.13
(1,732)	1:A:147:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD21	10	0.13
(1,732)	1:A:147:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD22	10	0.13
(1,732)	1:A:147:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD23	10	0.13
(1,732)	1:A:147:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD21	10	0.13
(1,732)	1:A:147:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD22	10	0.13
(1,732)	1:A:147:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD23	10	0.13
(1,701)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD11	11	0.13
(1,701)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD12	11	0.13
(1,701)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD13	11	0.13
(1,701)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD11	11	0.13
(1,701)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD12	11	0.13
(1,701)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD13	11	0.13
(1,701)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD11	11	0.13
(1,701)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD12	11	0.13
(1,701)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD13	11	0.13
(1,654)	1:A:60:SER:H	1:A:83:SER:H	20	0.13
(1,596)	1:A:164:ASN:H	1:A:195:LEU:H	14	0.13
(1,572)	1:A:21:LEU:HD21	1:A:28:ILE:HD11	19	0.13
(1,572)	1:A:21:LEU:HD21	1:A:28:ILE:HD12	19	0.13

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,572)	1:A:21:LEU:HD21	1:A:28:ILE:HD13	19	0.13
(1,572)	1:A:21:LEU:HD22	1:A:28:ILE:HD11	19	0.13
(1,572)	1:A:21:LEU:HD22	1:A:28:ILE:HD12	19	0.13
(1,572)	1:A:21:LEU:HD22	1:A:28:ILE:HD13	19	0.13
(1,572)	1:A:21:LEU:HD23	1:A:28:ILE:HD11	19	0.13
(1,572)	1:A:21:LEU:HD23	1:A:28:ILE:HD12	19	0.13
(1,572)	1:A:21:LEU:HD23	1:A:28:ILE:HD13	19	0.13
(1,569)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD21	4	0.13
(1,569)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD22	4	0.13
(1,569)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD23	4	0.13
(1,569)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD21	4	0.13
(1,569)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD22	4	0.13
(1,569)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD23	4	0.13
(1,569)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD21	4	0.13
(1,569)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD22	4	0.13
(1,569)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD23	4	0.13
(1,535)	1:A:74:LYS:H	1:A:76:VAL:HG11	18	0.13
(1,535)	1:A:74:LYS:H	1:A:76:VAL:HG12	18	0.13
(1,535)	1:A:74:LYS:H	1:A:76:VAL:HG13	18	0.13
(1,518)	1:A:117:VAL:HG11	1:A:121:LEU:HD11	16	0.13
(1,518)	1:A:117:VAL:HG11	1:A:121:LEU:HD12	16	0.13
(1,518)	1:A:117:VAL:HG11	1:A:121:LEU:HD13	16	0.13
(1,518)	1:A:117:VAL:HG12	1:A:121:LEU:HD11	16	0.13
(1,518)	1:A:117:VAL:HG12	1:A:121:LEU:HD12	16	0.13
(1,518)	1:A:117:VAL:HG12	1:A:121:LEU:HD13	16	0.13
(1,518)	1:A:117:VAL:HG13	1:A:121:LEU:HD11	16	0.13
(1,518)	1:A:117:VAL:HG13	1:A:121:LEU:HD12	16	0.13
(1,518)	1:A:117:VAL:HG13	1:A:121:LEU:HD13	16	0.13
(1,511)	1:A:145:LYS:H	1:A:149:LEU:HD21	11	0.13
(1,511)	1:A:145:LYS:H	1:A:149:LEU:HD22	11	0.13
(1,511)	1:A:145:LYS:H	1:A:149:LEU:HD23	11	0.13
(1,508)	1:A:57:VAL:HG21	1:A:85:LEU:HD21	3	0.13
(1,508)	1:A:57:VAL:HG21	1:A:85:LEU:HD22	3	0.13
(1,508)	1:A:57:VAL:HG21	1:A:85:LEU:HD23	3	0.13
(1,508)	1:A:57:VAL:HG22	1:A:85:LEU:HD21	3	0.13
(1,508)	1:A:57:VAL:HG22	1:A:85:LEU:HD22	3	0.13
(1,508)	1:A:57:VAL:HG22	1:A:85:LEU:HD23	3	0.13
(1,508)	1:A:57:VAL:HG23	1:A:85:LEU:HD21	3	0.13
(1,508)	1:A:57:VAL:HG23	1:A:85:LEU:HD22	3	0.13
(1,508)	1:A:57:VAL:HG23	1:A:85:LEU:HD23	3	0.13
(1,508)	1:A:57:VAL:HG21	1:A:85:LEU:HD21	5	0.13
(1,508)	1:A:57:VAL:HG21	1:A:85:LEU:HD22	5	0.13

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,508)	1:A:57:VAL:HG21	1:A:85:LEU:HD23	5	0.13
(1,508)	1:A:57:VAL:HG22	1:A:85:LEU:HD21	5	0.13
(1,508)	1:A:57:VAL:HG22	1:A:85:LEU:HD22	5	0.13
(1,508)	1:A:57:VAL:HG22	1:A:85:LEU:HD23	5	0.13
(1,508)	1:A:57:VAL:HG23	1:A:85:LEU:HD21	5	0.13
(1,508)	1:A:57:VAL:HG23	1:A:85:LEU:HD22	5	0.13
(1,508)	1:A:57:VAL:HG23	1:A:85:LEU:HD23	5	0.13
(1,498)	1:A:156:LEU:HD21	1:A:160:LEU:HD11	1	0.13
(1,498)	1:A:156:LEU:HD21	1:A:160:LEU:HD12	1	0.13
(1,498)	1:A:156:LEU:HD21	1:A:160:LEU:HD13	1	0.13
(1,498)	1:A:156:LEU:HD22	1:A:160:LEU:HD11	1	0.13
(1,498)	1:A:156:LEU:HD22	1:A:160:LEU:HD12	1	0.13
(1,498)	1:A:156:LEU:HD22	1:A:160:LEU:HD13	1	0.13
(1,498)	1:A:156:LEU:HD23	1:A:160:LEU:HD11	1	0.13
(1,498)	1:A:156:LEU:HD23	1:A:160:LEU:HD12	1	0.13
(1,498)	1:A:156:LEU:HD23	1:A:160:LEU:HD13	1	0.13
(1,408)	1:A:163:LEU:HD21	1:A:195:LEU:HD21	5	0.13
(1,408)	1:A:163:LEU:HD21	1:A:195:LEU:HD22	5	0.13
(1,408)	1:A:163:LEU:HD21	1:A:195:LEU:HD23	5	0.13
(1,408)	1:A:163:LEU:HD22	1:A:195:LEU:HD21	5	0.13
(1,408)	1:A:163:LEU:HD22	1:A:195:LEU:HD22	5	0.13
(1,408)	1:A:163:LEU:HD22	1:A:195:LEU:HD23	5	0.13
(1,408)	1:A:163:LEU:HD23	1:A:195:LEU:HD21	5	0.13
(1,408)	1:A:163:LEU:HD23	1:A:195:LEU:HD22	5	0.13
(1,408)	1:A:163:LEU:HD23	1:A:195:LEU:HD23	5	0.13
(1,407)	1:A:126:VAL:HG11	1:A:163:LEU:HD21	19	0.13
(1,407)	1:A:126:VAL:HG11	1:A:163:LEU:HD22	19	0.13
(1,407)	1:A:126:VAL:HG11	1:A:163:LEU:HD23	19	0.13
(1,407)	1:A:126:VAL:HG12	1:A:163:LEU:HD21	19	0.13
(1,407)	1:A:126:VAL:HG12	1:A:163:LEU:HD22	19	0.13
(1,407)	1:A:126:VAL:HG12	1:A:163:LEU:HD23	19	0.13
(1,407)	1:A:126:VAL:HG13	1:A:163:LEU:HD21	19	0.13
(1,407)	1:A:126:VAL:HG13	1:A:163:LEU:HD22	19	0.13
(1,407)	1:A:126:VAL:HG13	1:A:163:LEU:HD23	19	0.13
(1,346)	1:A:175:LEU:HD21	1:A:184:LYS:H	17	0.13
(1,346)	1:A:175:LEU:HD22	1:A:184:LYS:H	17	0.13
(1,346)	1:A:175:LEU:HD23	1:A:184:LYS:H	17	0.13
(1,334)	1:A:90:ILE:H	1:A:91:VAL:HG21	8	0.13
(1,334)	1:A:90:ILE:H	1:A:91:VAL:HG22	8	0.13
(1,334)	1:A:90:ILE:H	1:A:91:VAL:HG23	8	0.13
(1,295)	1:A:153:LEU:H	1:A:190:LEU:HD21	5	0.13
(1,295)	1:A:153:LEU:H	1:A:190:LEU:HD22	5	0.13

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,295)	1:A:153:LEU:H	1:A:190:LEU:HD23	5	0.13
(1,295)	1:A:153:LEU:H	1:A:190:LEU:HD21	6	0.13
(1,295)	1:A:153:LEU:H	1:A:190:LEU:HD22	6	0.13
(1,295)	1:A:153:LEU:H	1:A:190:LEU:HD23	6	0.13
(1,281)	1:A:187:LEU:HD21	1:A:188:ILE:H	17	0.13
(1,281)	1:A:187:LEU:HD22	1:A:188:ILE:H	17	0.13
(1,281)	1:A:187:LEU:HD23	1:A:188:ILE:H	17	0.13
(1,272)	1:A:124:GLY:H	1:A:163:LEU:HD21	10	0.13
(1,272)	1:A:124:GLY:H	1:A:163:LEU:HD22	10	0.13
(1,272)	1:A:124:GLY:H	1:A:163:LEU:HD23	10	0.13
(1,270)	1:A:121:LEU:HD11	1:A:124:GLY:H	17	0.13
(1,270)	1:A:121:LEU:HD12	1:A:124:GLY:H	17	0.13
(1,270)	1:A:121:LEU:HD13	1:A:124:GLY:H	17	0.13
(1,270)	1:A:121:LEU:HD11	1:A:124:GLY:H	19	0.13
(1,270)	1:A:121:LEU:HD12	1:A:124:GLY:H	19	0.13
(1,270)	1:A:121:LEU:HD13	1:A:124:GLY:H	19	0.13
(1,247)	1:A:35:CYS:H	1:A:81:VAL:HG21	3	0.13
(1,247)	1:A:35:CYS:H	1:A:81:VAL:HG22	3	0.13
(1,247)	1:A:35:CYS:H	1:A:81:VAL:HG23	3	0.13
(1,243)	1:A:133:ALA:H	1:A:150:LEU:HD11	8	0.13
(1,243)	1:A:133:ALA:H	1:A:150:LEU:HD12	8	0.13
(1,243)	1:A:133:ALA:H	1:A:150:LEU:HD13	8	0.13
(1,242)	1:A:133:ALA:H	1:A:147:LEU:HD21	12	0.13
(1,242)	1:A:133:ALA:H	1:A:147:LEU:HD22	12	0.13
(1,242)	1:A:133:ALA:H	1:A:147:LEU:HD23	12	0.13
(1,233)	1:A:54:VAL:HG11	1:A:55:THR:H	8	0.13
(1,233)	1:A:54:VAL:HG12	1:A:55:THR:H	8	0.13
(1,233)	1:A:54:VAL:HG13	1:A:55:THR:H	8	0.13
(1,226)	1:A:57:VAL:HG11	1:A:82:GLN:H	18	0.13
(1,226)	1:A:57:VAL:HG12	1:A:82:GLN:H	18	0.13
(1,226)	1:A:57:VAL:HG13	1:A:82:GLN:H	18	0.13
(1,217)	1:A:163:LEU:HD11	1:A:195:LEU:H	11	0.13
(1,217)	1:A:163:LEU:HD12	1:A:195:LEU:H	11	0.13
(1,217)	1:A:163:LEU:HD13	1:A:195:LEU:H	11	0.13
(1,205)	1:A:24:VAL:HG11	1:A:192:GLY:H	4	0.13
(1,205)	1:A:24:VAL:HG12	1:A:192:GLY:H	4	0.13
(1,205)	1:A:24:VAL:HG13	1:A:192:GLY:H	4	0.13
(1,174)	1:A:61:SER:H	1:A:62:VAL:HG11	14	0.13
(1,174)	1:A:61:SER:H	1:A:62:VAL:HG12	14	0.13
(1,174)	1:A:61:SER:H	1:A:62:VAL:HG13	14	0.13
(1,158)	1:A:163:LEU:H	1:A:195:LEU:HD21	11	0.13
(1,158)	1:A:163:LEU:H	1:A:195:LEU:HD22	11	0.13

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,158)	1:A:163:LEU:H	1:A:195:LEU:HD23	11	0.13
(1,146)	1:A:175:LEU:H	1:A:185:ALA:H	11	0.13
(1,123)	1:A:24:VAL:H	1:A:128:ILE:HD11	6	0.13
(1,123)	1:A:24:VAL:H	1:A:128:ILE:HD12	6	0.13
(1,123)	1:A:24:VAL:H	1:A:128:ILE:HD13	6	0.13
(1,1113)	1:A:127:PHE:H	1:A:192:GLY:O	19	0.13
(1,1105)	1:A:102:PHE:H	1:A:128:ILE:O	15	0.13
(1,1105)	1:A:102:PHE:H	1:A:128:ILE:O	17	0.13
(1,1099)	1:A:124:GLY:O	1:A:98:ILE:H	1	0.13
(1,1099)	1:A:124:GLY:O	1:A:98:ILE:H	19	0.13
(1,1098)	1:A:124:GLY:O	1:A:98:ILE:N	7	0.13
(1,1098)	1:A:124:GLY:O	1:A:98:ILE:N	10	0.13
(1,1070)	1:A:108:SER:O	1:A:112:GLN:H	5	0.13
(1,1046)	1:A:46:PHE:O	1:A:50:LEU:H	1	0.13
(1,1034)	1:A:23:SER:O	1:A:27:GLN:H	2	0.13
(1,1034)	1:A:23:SER:O	1:A:27:GLN:H	15	0.13
(1,1032)	1:A:22:VAL:O	1:A:26:ASN:H	15	0.13
(1,1023)	1:A:105:LEU:HD11	1:A:85:LEU:HD21	8	0.13
(1,1023)	1:A:105:LEU:HD11	1:A:85:LEU:HD22	8	0.13
(1,1023)	1:A:105:LEU:HD11	1:A:85:LEU:HD23	8	0.13
(1,1023)	1:A:105:LEU:HD12	1:A:85:LEU:HD21	8	0.13
(1,1023)	1:A:105:LEU:HD12	1:A:85:LEU:HD22	8	0.13
(1,1023)	1:A:105:LEU:HD12	1:A:85:LEU:HD23	8	0.13
(1,1023)	1:A:105:LEU:HD13	1:A:85:LEU:HD21	8	0.13
(1,1023)	1:A:105:LEU:HD13	1:A:85:LEU:HD22	8	0.13
(1,1023)	1:A:105:LEU:HD13	1:A:85:LEU:HD23	8	0.13
(1,1017)	1:A:101:ILE:HA	1:A:128:ILE:H	7	0.13
(1,1013)	1:A:126:VAL:HA	1:A:193:GLN:HA	15	0.13
(1,1003)	1:A:59:GLN:H	1:A:37:ALA:H	10	0.13
(1,994)	1:A:79:THR:H	1:A:54:VAL:H	17	0.12
(1,993)	1:A:36:LEU:H	1:A:99:VAL:H	1	0.12
(1,988)	1:A:117:VAL:HG21	1:A:121:LEU:H	11	0.12
(1,988)	1:A:117:VAL:HG22	1:A:121:LEU:H	11	0.12
(1,988)	1:A:117:VAL:HG23	1:A:121:LEU:H	11	0.12
(1,967)	1:A:146:ASP:H	1:A:149:LEU:HD11	6	0.12
(1,967)	1:A:146:ASP:H	1:A:149:LEU:HD12	6	0.12
(1,967)	1:A:146:ASP:H	1:A:149:LEU:HD13	6	0.12
(1,964)	1:A:116:LYS:H	1:A:117:VAL:HG21	6	0.12
(1,964)	1:A:116:LYS:H	1:A:117:VAL:HG22	6	0.12
(1,964)	1:A:116:LYS:H	1:A:117:VAL:HG23	6	0.12
(1,964)	1:A:116:LYS:H	1:A:117:VAL:HG21	9	0.12
(1,964)	1:A:116:LYS:H	1:A:117:VAL:HG22	9	0.12

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,964)	1:A:116:LYS:H	1:A:117:VAL:HG23	9	0.12
(1,964)	1:A:116:LYS:H	1:A:117:VAL:HG21	19	0.12
(1,964)	1:A:116:LYS:H	1:A:117:VAL:HG22	19	0.12
(1,964)	1:A:116:LYS:H	1:A:117:VAL:HG23	19	0.12
(1,954)	1:A:70:LEU:H	1:A:78:ILE:HD11	17	0.12
(1,954)	1:A:70:LEU:H	1:A:78:ILE:HD12	17	0.12
(1,954)	1:A:70:LEU:H	1:A:78:ILE:HD13	17	0.12
(1,936)	1:A:153:LEU:HD21	1:A:157:GLN:H	3	0.12
(1,936)	1:A:153:LEU:HD22	1:A:157:GLN:H	3	0.12
(1,936)	1:A:153:LEU:HD23	1:A:157:GLN:H	3	0.12
(1,934)	1:A:137:LEU:HD11	1:A:145:LYS:H	17	0.12
(1,934)	1:A:137:LEU:HD12	1:A:145:LYS:H	17	0.12
(1,934)	1:A:137:LEU:HD13	1:A:145:LYS:H	17	0.12
(1,912)	1:A:56:ALA:H	1:A:81:VAL:HG21	5	0.12
(1,912)	1:A:56:ALA:H	1:A:81:VAL:HG22	5	0.12
(1,912)	1:A:56:ALA:H	1:A:81:VAL:HG23	5	0.12
(1,896)	1:A:166:LEU:HD11	1:A:193:GLN:H	4	0.12
(1,896)	1:A:166:LEU:HD12	1:A:193:GLN:H	4	0.12
(1,896)	1:A:166:LEU:HD13	1:A:193:GLN:H	4	0.12
(1,891)	1:A:125:GLY:H	1:A:163:LEU:HD21	15	0.12
(1,891)	1:A:125:GLY:H	1:A:163:LEU:HD22	15	0.12
(1,891)	1:A:125:GLY:H	1:A:163:LEU:HD23	15	0.12
(1,891)	1:A:125:GLY:H	1:A:163:LEU:HD21	18	0.12
(1,891)	1:A:125:GLY:H	1:A:163:LEU:HD22	18	0.12
(1,891)	1:A:125:GLY:H	1:A:163:LEU:HD23	18	0.12
(1,854)	1:A:131:GLY:H	1:A:153:LEU:HD21	2	0.12
(1,854)	1:A:131:GLY:H	1:A:153:LEU:HD22	2	0.12
(1,854)	1:A:131:GLY:H	1:A:153:LEU:HD23	2	0.12
(1,854)	1:A:131:GLY:H	1:A:153:LEU:HD21	4	0.12
(1,854)	1:A:131:GLY:H	1:A:153:LEU:HD22	4	0.12
(1,854)	1:A:131:GLY:H	1:A:153:LEU:HD23	4	0.12
(1,854)	1:A:131:GLY:H	1:A:153:LEU:HD21	17	0.12
(1,854)	1:A:131:GLY:H	1:A:153:LEU:HD22	17	0.12
(1,854)	1:A:131:GLY:H	1:A:153:LEU:HD23	17	0.12
(1,848)	1:A:91:VAL:HG21	1:A:95:TRP:HE1	2	0.12
(1,848)	1:A:91:VAL:HG22	1:A:95:TRP:HE1	2	0.12
(1,848)	1:A:91:VAL:HG23	1:A:95:TRP:HE1	2	0.12
(1,848)	1:A:91:VAL:HG21	1:A:95:TRP:HE1	6	0.12
(1,848)	1:A:91:VAL:HG22	1:A:95:TRP:HE1	6	0.12
(1,848)	1:A:91:VAL:HG23	1:A:95:TRP:HE1	6	0.12
(1,841)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:146:ASP:H	4	0.12
(1,841)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:146:ASP:H	4	0.12

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,841)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:146:ASP:H	4	0.12
(1,840)	1:A:98:ILE:HD11	1:A:121:LEU:H	14	0.12
(1,840)	1:A:98:ILE:HD12	1:A:121:LEU:H	14	0.12
(1,840)	1:A:98:ILE:HD13	1:A:121:LEU:H	14	0.12
(1,831)	1:A:117:VAL:HG11	1:A:118:TYR:H	1	0.12
(1,831)	1:A:117:VAL:HG12	1:A:118:TYR:H	1	0.12
(1,831)	1:A:117:VAL:HG13	1:A:118:TYR:H	1	0.12
(1,831)	1:A:117:VAL:HG11	1:A:118:TYR:H	2	0.12
(1,831)	1:A:117:VAL:HG12	1:A:118:TYR:H	2	0.12
(1,831)	1:A:117:VAL:HG13	1:A:118:TYR:H	2	0.12
(1,827)	1:A:34:LEU:HD11	1:A:36:LEU:H	10	0.12
(1,827)	1:A:34:LEU:HD12	1:A:36:LEU:H	10	0.12
(1,827)	1:A:34:LEU:HD13	1:A:36:LEU:H	10	0.12
(1,827)	1:A:34:LEU:HD11	1:A:36:LEU:H	13	0.12
(1,827)	1:A:34:LEU:HD12	1:A:36:LEU:H	13	0.12
(1,827)	1:A:34:LEU:HD13	1:A:36:LEU:H	13	0.12
(1,827)	1:A:34:LEU:HD11	1:A:36:LEU:H	20	0.12
(1,827)	1:A:34:LEU:HD12	1:A:36:LEU:H	20	0.12
(1,827)	1:A:34:LEU:HD13	1:A:36:LEU:H	20	0.12
(1,823)	1:A:23:SER:H	1:A:24:VAL:HG21	19	0.12
(1,823)	1:A:23:SER:H	1:A:24:VAL:HG22	19	0.12
(1,823)	1:A:23:SER:H	1:A:24:VAL:HG23	19	0.12
(1,809)	1:A:91:VAL:HG11	1:A:92:ALA:H	1	0.12
(1,809)	1:A:91:VAL:HG12	1:A:92:ALA:H	1	0.12
(1,809)	1:A:91:VAL:HG13	1:A:92:ALA:H	1	0.12
(1,809)	1:A:91:VAL:HG11	1:A:92:ALA:H	14	0.12
(1,809)	1:A:91:VAL:HG12	1:A:92:ALA:H	14	0.12
(1,809)	1:A:91:VAL:HG13	1:A:92:ALA:H	14	0.12
(1,806)	1:A:166:LEU:HD21	1:A:193:GLN:H	3	0.12
(1,806)	1:A:166:LEU:HD22	1:A:193:GLN:H	3	0.12
(1,806)	1:A:166:LEU:HD23	1:A:193:GLN:H	3	0.12
(1,801)	1:A:113:LEU:HD11	1:A:116:LYS:H	6	0.12
(1,801)	1:A:113:LEU:HD12	1:A:116:LYS:H	6	0.12
(1,801)	1:A:113:LEU:HD13	1:A:116:LYS:H	6	0.12
(1,790)	1:A:84:ASN:H	1:A:85:LEU:HD21	9	0.12
(1,790)	1:A:84:ASN:H	1:A:85:LEU:HD22	9	0.12
(1,790)	1:A:84:ASN:H	1:A:85:LEU:HD23	9	0.12
(1,776)	1:A:153:LEU:HD11	1:A:190:LEU:HD11	14	0.12
(1,776)	1:A:153:LEU:HD11	1:A:190:LEU:HD12	14	0.12
(1,776)	1:A:153:LEU:HD11	1:A:190:LEU:HD13	14	0.12
(1,776)	1:A:153:LEU:HD12	1:A:190:LEU:HD11	14	0.12
(1,776)	1:A:153:LEU:HD12	1:A:190:LEU:HD12	14	0.12

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,776)	1:A:153:LEU:HD12	1:A:190:LEU:HD13	14	0.12
(1,776)	1:A:153:LEU:HD13	1:A:190:LEU:HD11	14	0.12
(1,776)	1:A:153:LEU:HD13	1:A:190:LEU:HD12	14	0.12
(1,776)	1:A:153:LEU:HD13	1:A:190:LEU:HD13	14	0.12
(1,732)	1:A:147:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD21	4	0.12
(1,732)	1:A:147:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD22	4	0.12
(1,732)	1:A:147:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD23	4	0.12
(1,732)	1:A:147:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD21	4	0.12
(1,732)	1:A:147:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD22	4	0.12
(1,732)	1:A:147:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD23	4	0.12
(1,732)	1:A:147:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD21	4	0.12
(1,732)	1:A:147:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD22	4	0.12
(1,732)	1:A:147:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD23	4	0.12
(1,701)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD11	9	0.12
(1,701)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD12	9	0.12
(1,701)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:HD13	9	0.12
(1,701)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD11	9	0.12
(1,701)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD12	9	0.12
(1,701)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:HD13	9	0.12
(1,701)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD11	9	0.12
(1,701)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD12	9	0.12
(1,701)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:HD13	9	0.12
(1,694)	1:A:99:VAL:HG11	1:A:101:ILE:HD11	16	0.12
(1,694)	1:A:99:VAL:HG11	1:A:101:ILE:HD12	16	0.12
(1,694)	1:A:99:VAL:HG11	1:A:101:ILE:HD13	16	0.12
(1,694)	1:A:99:VAL:HG12	1:A:101:ILE:HD11	16	0.12
(1,694)	1:A:99:VAL:HG12	1:A:101:ILE:HD12	16	0.12
(1,694)	1:A:99:VAL:HG12	1:A:101:ILE:HD13	16	0.12
(1,694)	1:A:99:VAL:HG13	1:A:101:ILE:HD11	16	0.12
(1,694)	1:A:99:VAL:HG13	1:A:101:ILE:HD12	16	0.12
(1,694)	1:A:99:VAL:HG13	1:A:101:ILE:HD13	16	0.12
(1,632)	1:A:146:ASP:H	1:A:150:LEU:H	8	0.12
(1,596)	1:A:164:ASN:H	1:A:195:LEU:H	11	0.12
(1,596)	1:A:164:ASN:H	1:A:195:LEU:H	13	0.12
(1,570)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:145:LYS:H	9	0.12
(1,570)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:145:LYS:H	9	0.12
(1,570)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:145:LYS:H	9	0.12
(1,570)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:145:LYS:H	19	0.12
(1,570)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:145:LYS:H	19	0.12
(1,570)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:145:LYS:H	19	0.12
(1,560)	1:A:47:LEU:HD21	1:A:50:LEU:HD21	10	0.12
(1,560)	1:A:47:LEU:HD21	1:A:50:LEU:HD22	10	0.12

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,560)	1:A:47:LEU:HD21	1:A:50:LEU:HD23	10	0.12
(1,560)	1:A:47:LEU:HD22	1:A:50:LEU:HD21	10	0.12
(1,560)	1:A:47:LEU:HD22	1:A:50:LEU:HD22	10	0.12
(1,560)	1:A:47:LEU:HD22	1:A:50:LEU:HD23	10	0.12
(1,560)	1:A:47:LEU:HD23	1:A:50:LEU:HD21	10	0.12
(1,560)	1:A:47:LEU:HD23	1:A:50:LEU:HD22	10	0.12
(1,560)	1:A:47:LEU:HD23	1:A:50:LEU:HD23	10	0.12
(1,546)	1:A:121:LEU:HD11	1:A:163:LEU:HD21	9	0.12
(1,546)	1:A:121:LEU:HD11	1:A:163:LEU:HD22	9	0.12
(1,546)	1:A:121:LEU:HD11	1:A:163:LEU:HD23	9	0.12
(1,546)	1:A:121:LEU:HD12	1:A:163:LEU:HD21	9	0.12
(1,546)	1:A:121:LEU:HD12	1:A:163:LEU:HD22	9	0.12
(1,546)	1:A:121:LEU:HD12	1:A:163:LEU:HD23	9	0.12
(1,546)	1:A:121:LEU:HD13	1:A:163:LEU:HD21	9	0.12
(1,546)	1:A:121:LEU:HD13	1:A:163:LEU:HD22	9	0.12
(1,546)	1:A:121:LEU:HD13	1:A:163:LEU:HD23	9	0.12
(1,546)	1:A:121:LEU:HD11	1:A:163:LEU:HD21	16	0.12
(1,546)	1:A:121:LEU:HD11	1:A:163:LEU:HD22	16	0.12
(1,546)	1:A:121:LEU:HD11	1:A:163:LEU:HD23	16	0.12
(1,546)	1:A:121:LEU:HD12	1:A:163:LEU:HD21	16	0.12
(1,546)	1:A:121:LEU:HD12	1:A:163:LEU:HD22	16	0.12
(1,546)	1:A:121:LEU:HD12	1:A:163:LEU:HD23	16	0.12
(1,546)	1:A:121:LEU:HD13	1:A:163:LEU:HD21	16	0.12
(1,546)	1:A:121:LEU:HD13	1:A:163:LEU:HD22	16	0.12
(1,546)	1:A:121:LEU:HD13	1:A:163:LEU:HD23	16	0.12
(1,535)	1:A:74:LYS:H	1:A:76:VAL:HG11	7	0.12
(1,535)	1:A:74:LYS:H	1:A:76:VAL:HG12	7	0.12
(1,535)	1:A:74:LYS:H	1:A:76:VAL:HG13	7	0.12
(1,511)	1:A:145:LYS:H	1:A:149:LEU:HD21	14	0.12
(1,511)	1:A:145:LYS:H	1:A:149:LEU:HD22	14	0.12
(1,511)	1:A:145:LYS:H	1:A:149:LEU:HD23	14	0.12
(1,511)	1:A:145:LYS:H	1:A:149:LEU:HD21	15	0.12
(1,511)	1:A:145:LYS:H	1:A:149:LEU:HD22	15	0.12
(1,511)	1:A:145:LYS:H	1:A:149:LEU:HD23	15	0.12
(1,498)	1:A:156:LEU:HD21	1:A:160:LEU:HD11	9	0.12
(1,498)	1:A:156:LEU:HD21	1:A:160:LEU:HD12	9	0.12
(1,498)	1:A:156:LEU:HD21	1:A:160:LEU:HD13	9	0.12
(1,498)	1:A:156:LEU:HD22	1:A:160:LEU:HD11	9	0.12
(1,498)	1:A:156:LEU:HD22	1:A:160:LEU:HD12	9	0.12
(1,498)	1:A:156:LEU:HD22	1:A:160:LEU:HD13	9	0.12
(1,498)	1:A:156:LEU:HD23	1:A:160:LEU:HD11	9	0.12
(1,498)	1:A:156:LEU:HD23	1:A:160:LEU:HD12	9	0.12

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,498)	1:A:156:LEU:HD23	1:A:160:LEU:HD13	9	0.12
(1,498)	1:A:156:LEU:HD21	1:A:160:LEU:HD11	18	0.12
(1,498)	1:A:156:LEU:HD21	1:A:160:LEU:HD12	18	0.12
(1,498)	1:A:156:LEU:HD21	1:A:160:LEU:HD13	18	0.12
(1,498)	1:A:156:LEU:HD22	1:A:160:LEU:HD11	18	0.12
(1,498)	1:A:156:LEU:HD22	1:A:160:LEU:HD12	18	0.12
(1,498)	1:A:156:LEU:HD22	1:A:160:LEU:HD13	18	0.12
(1,498)	1:A:156:LEU:HD23	1:A:160:LEU:HD11	18	0.12
(1,498)	1:A:156:LEU:HD23	1:A:160:LEU:HD12	18	0.12
(1,498)	1:A:156:LEU:HD23	1:A:160:LEU:HD13	18	0.12
(1,491)	1:A:37:ALA:H	1:A:85:LEU:HD11	12	0.12
(1,491)	1:A:37:ALA:H	1:A:85:LEU:HD12	12	0.12
(1,491)	1:A:37:ALA:H	1:A:85:LEU:HD13	12	0.12
(1,453)	1:A:118:TYR:H	1:A:121:LEU:HD21	4	0.12
(1,453)	1:A:118:TYR:H	1:A:121:LEU:HD22	4	0.12
(1,453)	1:A:118:TYR:H	1:A:121:LEU:HD23	4	0.12
(1,408)	1:A:163:LEU:HD21	1:A:195:LEU:HD21	3	0.12
(1,408)	1:A:163:LEU:HD21	1:A:195:LEU:HD22	3	0.12
(1,408)	1:A:163:LEU:HD21	1:A:195:LEU:HD23	3	0.12
(1,408)	1:A:163:LEU:HD22	1:A:195:LEU:HD21	3	0.12
(1,408)	1:A:163:LEU:HD22	1:A:195:LEU:HD22	3	0.12
(1,408)	1:A:163:LEU:HD22	1:A:195:LEU:HD23	3	0.12
(1,408)	1:A:163:LEU:HD23	1:A:195:LEU:HD21	3	0.12
(1,408)	1:A:163:LEU:HD23	1:A:195:LEU:HD22	3	0.12
(1,408)	1:A:163:LEU:HD23	1:A:195:LEU:HD23	3	0.12
(1,392)	1:A:63:GLY:H	1:A:64:LEU:HD21	11	0.12
(1,392)	1:A:63:GLY:H	1:A:64:LEU:HD22	11	0.12
(1,392)	1:A:63:GLY:H	1:A:64:LEU:HD23	11	0.12
(1,382)	1:A:24:VAL:H	1:A:167:ILE:HD11	10	0.12
(1,382)	1:A:24:VAL:H	1:A:167:ILE:HD12	10	0.12
(1,382)	1:A:24:VAL:H	1:A:167:ILE:HD13	10	0.12
(1,382)	1:A:24:VAL:H	1:A:167:ILE:HD11	20	0.12
(1,382)	1:A:24:VAL:H	1:A:167:ILE:HD12	20	0.12
(1,382)	1:A:24:VAL:H	1:A:167:ILE:HD13	20	0.12
(1,379)	1:A:188:ILE:HD11	1:A:190:LEU:HD11	4	0.12
(1,379)	1:A:188:ILE:HD11	1:A:190:LEU:HD12	4	0.12
(1,379)	1:A:188:ILE:HD11	1:A:190:LEU:HD13	4	0.12
(1,379)	1:A:188:ILE:HD12	1:A:190:LEU:HD11	4	0.12
(1,379)	1:A:188:ILE:HD12	1:A:190:LEU:HD12	4	0.12
(1,379)	1:A:188:ILE:HD12	1:A:190:LEU:HD13	4	0.12
(1,379)	1:A:188:ILE:HD13	1:A:190:LEU:HD11	4	0.12
(1,379)	1:A:188:ILE:HD13	1:A:190:LEU:HD12	4	0.12

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,379)	1:A:188:ILE:HD13	1:A:190:LEU:HD13	4	0.12
(1,379)	1:A:188:ILE:HD11	1:A:190:LEU:HD11	6	0.12
(1,379)	1:A:188:ILE:HD11	1:A:190:LEU:HD12	6	0.12
(1,379)	1:A:188:ILE:HD11	1:A:190:LEU:HD13	6	0.12
(1,379)	1:A:188:ILE:HD12	1:A:190:LEU:HD11	6	0.12
(1,379)	1:A:188:ILE:HD12	1:A:190:LEU:HD12	6	0.12
(1,379)	1:A:188:ILE:HD12	1:A:190:LEU:HD13	6	0.12
(1,379)	1:A:188:ILE:HD13	1:A:190:LEU:HD11	6	0.12
(1,379)	1:A:188:ILE:HD13	1:A:190:LEU:HD12	6	0.12
(1,379)	1:A:188:ILE:HD13	1:A:190:LEU:HD13	6	0.12
(1,367)	1:A:21:LEU:HD11	1:A:128:ILE:HD11	14	0.12
(1,367)	1:A:21:LEU:HD11	1:A:128:ILE:HD12	14	0.12
(1,367)	1:A:21:LEU:HD11	1:A:128:ILE:HD13	14	0.12
(1,367)	1:A:21:LEU:HD12	1:A:128:ILE:HD11	14	0.12
(1,367)	1:A:21:LEU:HD12	1:A:128:ILE:HD12	14	0.12
(1,367)	1:A:21:LEU:HD12	1:A:128:ILE:HD13	14	0.12
(1,367)	1:A:21:LEU:HD13	1:A:128:ILE:HD11	14	0.12
(1,367)	1:A:21:LEU:HD13	1:A:128:ILE:HD12	14	0.12
(1,367)	1:A:21:LEU:HD13	1:A:128:ILE:HD13	14	0.12
(1,346)	1:A:175:LEU:HD21	1:A:184:LYS:H	1	0.12
(1,346)	1:A:175:LEU:HD22	1:A:184:LYS:H	1	0.12
(1,346)	1:A:175:LEU:HD23	1:A:184:LYS:H	1	0.12
(1,311)	1:A:51:GLY:H	1:A:76:VAL:HG11	17	0.12
(1,311)	1:A:51:GLY:H	1:A:76:VAL:HG12	17	0.12
(1,311)	1:A:51:GLY:H	1:A:76:VAL:HG13	17	0.12
(1,289)	1:A:101:ILE:HD11	1:A:128:ILE:H	9	0.12
(1,289)	1:A:101:ILE:HD12	1:A:128:ILE:H	9	0.12
(1,289)	1:A:101:ILE:HD13	1:A:128:ILE:H	9	0.12
(1,289)	1:A:101:ILE:HD11	1:A:128:ILE:H	14	0.12
(1,289)	1:A:101:ILE:HD12	1:A:128:ILE:H	14	0.12
(1,289)	1:A:101:ILE:HD13	1:A:128:ILE:H	14	0.12
(1,270)	1:A:121:LEU:HD11	1:A:124:GLY:H	10	0.12
(1,270)	1:A:121:LEU:HD12	1:A:124:GLY:H	10	0.12
(1,270)	1:A:121:LEU:HD13	1:A:124:GLY:H	10	0.12
(1,266)	1:A:117:VAL:HG21	1:A:118:TYR:H	8	0.12
(1,266)	1:A:117:VAL:HG22	1:A:118:TYR:H	8	0.12
(1,266)	1:A:117:VAL:HG23	1:A:118:TYR:H	8	0.12
(1,263)	1:A:163:LEU:HD11	1:A:164:ASN:H	11	0.12
(1,263)	1:A:163:LEU:HD12	1:A:164:ASN:H	11	0.12
(1,263)	1:A:163:LEU:HD13	1:A:164:ASN:H	11	0.12
(1,259)	1:A:71:ALA:H	1:A:78:ILE:HD11	7	0.12
(1,259)	1:A:71:ALA:H	1:A:78:ILE:HD12	7	0.12

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,259)	1:A:71:ALA:H	1:A:78:ILE:HD13	7	0.12
(1,259)	1:A:71:ALA:H	1:A:78:ILE:HD11	8	0.12
(1,259)	1:A:71:ALA:H	1:A:78:ILE:HD12	8	0.12
(1,259)	1:A:71:ALA:H	1:A:78:ILE:HD13	8	0.12
(1,259)	1:A:71:ALA:H	1:A:78:ILE:HD11	14	0.12
(1,259)	1:A:71:ALA:H	1:A:78:ILE:HD12	14	0.12
(1,259)	1:A:71:ALA:H	1:A:78:ILE:HD13	14	0.12
(1,233)	1:A:54:VAL:HG11	1:A:55:THR:H	15	0.12
(1,233)	1:A:54:VAL:HG12	1:A:55:THR:H	15	0.12
(1,233)	1:A:54:VAL:HG13	1:A:55:THR:H	15	0.12
(1,232)	1:A:137:LEU:HD21	1:A:147:LEU:H	6	0.12
(1,232)	1:A:137:LEU:HD22	1:A:147:LEU:H	6	0.12
(1,232)	1:A:137:LEU:HD23	1:A:147:LEU:H	6	0.12
(1,231)	1:A:137:LEU:HD11	1:A:147:LEU:H	20	0.12
(1,231)	1:A:137:LEU:HD12	1:A:147:LEU:H	20	0.12
(1,231)	1:A:137:LEU:HD13	1:A:147:LEU:H	20	0.12
(1,230)	1:A:147:LEU:H	1:A:150:LEU:HD21	7	0.12
(1,230)	1:A:147:LEU:H	1:A:150:LEU:HD22	7	0.12
(1,230)	1:A:147:LEU:H	1:A:150:LEU:HD23	7	0.12
(1,228)	1:A:147:LEU:H	1:A:147:LEU:HD11	8	0.12
(1,228)	1:A:147:LEU:H	1:A:147:LEU:HD12	8	0.12
(1,228)	1:A:147:LEU:H	1:A:147:LEU:HD13	8	0.12
(1,226)	1:A:57:VAL:HG11	1:A:82:GLN:H	3	0.12
(1,226)	1:A:57:VAL:HG12	1:A:82:GLN:H	3	0.12
(1,226)	1:A:57:VAL:HG13	1:A:82:GLN:H	3	0.12
(1,226)	1:A:57:VAL:HG11	1:A:82:GLN:H	15	0.12
(1,226)	1:A:57:VAL:HG12	1:A:82:GLN:H	15	0.12
(1,226)	1:A:57:VAL:HG13	1:A:82:GLN:H	15	0.12
(1,205)	1:A:24:VAL:HG11	1:A:192:GLY:H	18	0.12
(1,205)	1:A:24:VAL:HG12	1:A:192:GLY:H	18	0.12
(1,205)	1:A:24:VAL:HG13	1:A:192:GLY:H	18	0.12
(1,202)	1:A:138:GLN:H	1:A:147:LEU:HD21	2	0.12
(1,202)	1:A:138:GLN:H	1:A:147:LEU:HD22	2	0.12
(1,202)	1:A:138:GLN:H	1:A:147:LEU:HD23	2	0.12
(1,174)	1:A:61:SER:H	1:A:62:VAL:HG11	5	0.12
(1,174)	1:A:61:SER:H	1:A:62:VAL:HG12	5	0.12
(1,174)	1:A:61:SER:H	1:A:62:VAL:HG13	5	0.12
(1,122)	1:A:24:VAL:H	1:A:191:LEU:HD21	2	0.12
(1,122)	1:A:24:VAL:H	1:A:191:LEU:HD22	2	0.12
(1,122)	1:A:24:VAL:H	1:A:191:LEU:HD23	2	0.12
(1,1113)	1:A:127:PHE:H	1:A:192:GLY:O	15	0.12
(1,1099)	1:A:124:GLY:O	1:A:98:ILE:H	2	0.12

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,1084)	1:A:154:GLU:O	1:A:158:SER:H	8	0.12
(1,1034)	1:A:23:SER:O	1:A:27:GLN:H	8	0.12
(1,1034)	1:A:23:SER:O	1:A:27:GLN:H	11	0.12
(1,1032)	1:A:22:VAL:O	1:A:26:ASN:H	2	0.12
(1,1032)	1:A:22:VAL:O	1:A:26:ASN:H	10	0.12
(1,1023)	1:A:105:LEU:HD11	1:A:85:LEU:HD21	3	0.12
(1,1023)	1:A:105:LEU:HD11	1:A:85:LEU:HD22	3	0.12
(1,1023)	1:A:105:LEU:HD11	1:A:85:LEU:HD23	3	0.12
(1,1023)	1:A:105:LEU:HD12	1:A:85:LEU:HD21	3	0.12
(1,1023)	1:A:105:LEU:HD12	1:A:85:LEU:HD22	3	0.12
(1,1023)	1:A:105:LEU:HD12	1:A:85:LEU:HD23	3	0.12
(1,1023)	1:A:105:LEU:HD13	1:A:85:LEU:HD21	3	0.12
(1,1023)	1:A:105:LEU:HD13	1:A:85:LEU:HD22	3	0.12
(1,1023)	1:A:105:LEU:HD13	1:A:85:LEU:HD23	3	0.12
(1,1023)	1:A:105:LEU:HD11	1:A:85:LEU:HD21	9	0.12
(1,1023)	1:A:105:LEU:HD11	1:A:85:LEU:HD22	9	0.12
(1,1023)	1:A:105:LEU:HD11	1:A:85:LEU:HD23	9	0.12
(1,1023)	1:A:105:LEU:HD12	1:A:85:LEU:HD21	9	0.12
(1,1023)	1:A:105:LEU:HD12	1:A:85:LEU:HD22	9	0.12
(1,1023)	1:A:105:LEU:HD12	1:A:85:LEU:HD23	9	0.12
(1,1023)	1:A:105:LEU:HD13	1:A:85:LEU:HD21	9	0.12
(1,1023)	1:A:105:LEU:HD13	1:A:85:LEU:HD22	9	0.12
(1,1023)	1:A:105:LEU:HD13	1:A:85:LEU:HD23	9	0.12
(1,1017)	1:A:101:ILE:HA	1:A:128:ILE:H	14	0.12
(1,1003)	1:A:59:GLN:H	1:A:37:ALA:H	1	0.12
(1,1003)	1:A:59:GLN:H	1:A:37:ALA:H	4	0.12
(1,988)	1:A:117:VAL:HG21	1:A:121:LEU:H	1	0.11
(1,988)	1:A:117:VAL:HG22	1:A:121:LEU:H	1	0.11
(1,988)	1:A:117:VAL:HG23	1:A:121:LEU:H	1	0.11
(1,986)	1:A:138:GLN:H	1:A:147:LEU:HD11	6	0.11
(1,986)	1:A:138:GLN:H	1:A:147:LEU:HD12	6	0.11
(1,986)	1:A:138:GLN:H	1:A:147:LEU:HD13	6	0.11
(1,972)	1:A:85:LEU:HD21	1:A:89:ASP:H	16	0.11
(1,972)	1:A:85:LEU:HD22	1:A:89:ASP:H	16	0.11
(1,972)	1:A:85:LEU:HD23	1:A:89:ASP:H	16	0.11
(1,964)	1:A:116:LYS:H	1:A:117:VAL:HG21	14	0.11
(1,964)	1:A:116:LYS:H	1:A:117:VAL:HG22	14	0.11
(1,964)	1:A:116:LYS:H	1:A:117:VAL:HG23	14	0.11
(1,964)	1:A:116:LYS:H	1:A:117:VAL:HG21	20	0.11
(1,964)	1:A:116:LYS:H	1:A:117:VAL:HG22	20	0.11
(1,964)	1:A:116:LYS:H	1:A:117:VAL:HG23	20	0.11
(1,957)	1:A:136:GLN:H	1:A:150:LEU:HD11	18	0.11

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,957)	1:A:136:GLN:H	1:A:150:LEU:HD12	18	0.11
(1,957)	1:A:136:GLN:H	1:A:150:LEU:HD13	18	0.11
(1,932)	1:A:172:GLU:H	1:A:187:LEU:HD11	11	0.11
(1,932)	1:A:172:GLU:H	1:A:187:LEU:HD12	11	0.11
(1,932)	1:A:172:GLU:H	1:A:187:LEU:HD13	11	0.11
(1,932)	1:A:172:GLU:H	1:A:187:LEU:HD11	14	0.11
(1,932)	1:A:172:GLU:H	1:A:187:LEU:HD12	14	0.11
(1,932)	1:A:172:GLU:H	1:A:187:LEU:HD13	14	0.11
(1,912)	1:A:56:ALA:H	1:A:81:VAL:HG21	19	0.11
(1,912)	1:A:56:ALA:H	1:A:81:VAL:HG22	19	0.11
(1,912)	1:A:56:ALA:H	1:A:81:VAL:HG23	19	0.11
(1,897)	1:A:163:LEU:HD21	1:A:193:GLN:H	2	0.11
(1,897)	1:A:163:LEU:HD22	1:A:193:GLN:H	2	0.11
(1,897)	1:A:163:LEU:HD23	1:A:193:GLN:H	2	0.11
(1,897)	1:A:163:LEU:HD21	1:A:193:GLN:H	5	0.11
(1,897)	1:A:163:LEU:HD22	1:A:193:GLN:H	5	0.11
(1,897)	1:A:163:LEU:HD23	1:A:193:GLN:H	5	0.11
(1,897)	1:A:163:LEU:HD21	1:A:193:GLN:H	18	0.11
(1,897)	1:A:163:LEU:HD22	1:A:193:GLN:H	18	0.11
(1,897)	1:A:163:LEU:HD23	1:A:193:GLN:H	18	0.11
(1,885)	1:A:50:LEU:H	1:A:54:VAL:HG21	2	0.11
(1,885)	1:A:50:LEU:H	1:A:54:VAL:HG22	2	0.11
(1,885)	1:A:50:LEU:H	1:A:54:VAL:HG23	2	0.11
(1,885)	1:A:50:LEU:H	1:A:54:VAL:HG21	17	0.11
(1,885)	1:A:50:LEU:H	1:A:54:VAL:HG22	17	0.11
(1,885)	1:A:50:LEU:H	1:A:54:VAL:HG23	17	0.11
(1,875)	1:A:105:LEU:HD21	1:A:109:LEU:H	16	0.11
(1,875)	1:A:105:LEU:HD22	1:A:109:LEU:H	16	0.11
(1,875)	1:A:105:LEU:HD23	1:A:109:LEU:H	16	0.11
(1,812)	1:A:130:GLU:H	1:A:156:LEU:HD11	15	0.11
(1,812)	1:A:130:GLU:H	1:A:156:LEU:HD12	15	0.11
(1,812)	1:A:130:GLU:H	1:A:156:LEU:HD13	15	0.11
(1,812)	1:A:130:GLU:H	1:A:156:LEU:HD11	19	0.11
(1,812)	1:A:130:GLU:H	1:A:156:LEU:HD12	19	0.11
(1,812)	1:A:130:GLU:H	1:A:156:LEU:HD13	19	0.11
(1,809)	1:A:91:VAL:HG11	1:A:92:ALA:H	18	0.11
(1,809)	1:A:91:VAL:HG12	1:A:92:ALA:H	18	0.11
(1,809)	1:A:91:VAL:HG13	1:A:92:ALA:H	18	0.11
(1,801)	1:A:113:LEU:HD11	1:A:116:LYS:H	7	0.11
(1,801)	1:A:113:LEU:HD12	1:A:116:LYS:H	7	0.11
(1,801)	1:A:113:LEU:HD13	1:A:116:LYS:H	7	0.11
(1,801)	1:A:113:LEU:HD11	1:A:116:LYS:H	14	0.11

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,801)	1:A:113:LEU:HD12	1:A:116:LYS:H	14	0.11
(1,801)	1:A:113:LEU:HD13	1:A:116:LYS:H	14	0.11
(1,79)	1:A:175:LEU:HD21	1:A:185:ALA:H	7	0.11
(1,79)	1:A:175:LEU:HD22	1:A:185:ALA:H	7	0.11
(1,79)	1:A:175:LEU:HD23	1:A:185:ALA:H	7	0.11
(1,773)	1:A:126:VAL:HG21	1:A:166:LEU:HD11	12	0.11
(1,773)	1:A:126:VAL:HG21	1:A:166:LEU:HD12	12	0.11
(1,773)	1:A:126:VAL:HG21	1:A:166:LEU:HD13	12	0.11
(1,773)	1:A:126:VAL:HG22	1:A:166:LEU:HD11	12	0.11
(1,773)	1:A:126:VAL:HG22	1:A:166:LEU:HD12	12	0.11
(1,773)	1:A:126:VAL:HG22	1:A:166:LEU:HD13	12	0.11
(1,773)	1:A:126:VAL:HG23	1:A:166:LEU:HD11	12	0.11
(1,773)	1:A:126:VAL:HG23	1:A:166:LEU:HD12	12	0.11
(1,773)	1:A:126:VAL:HG23	1:A:166:LEU:HD13	12	0.11
(1,77)	1:A:173:ARG:H	1:A:185:ALA:H	4	0.11
(1,755)	1:A:70:LEU:HD11	1:A:78:ILE:HD11	17	0.11
(1,755)	1:A:70:LEU:HD11	1:A:78:ILE:HD12	17	0.11
(1,755)	1:A:70:LEU:HD11	1:A:78:ILE:HD13	17	0.11
(1,755)	1:A:70:LEU:HD12	1:A:78:ILE:HD11	17	0.11
(1,755)	1:A:70:LEU:HD12	1:A:78:ILE:HD12	17	0.11
(1,755)	1:A:70:LEU:HD12	1:A:78:ILE:HD13	17	0.11
(1,755)	1:A:70:LEU:HD13	1:A:78:ILE:HD11	17	0.11
(1,755)	1:A:70:LEU:HD13	1:A:78:ILE:HD12	17	0.11
(1,755)	1:A:70:LEU:HD13	1:A:78:ILE:HD13	17	0.11
(1,750)	1:A:81:VAL:HG21	1:A:85:LEU:HD21	9	0.11
(1,750)	1:A:81:VAL:HG21	1:A:85:LEU:HD22	9	0.11
(1,750)	1:A:81:VAL:HG21	1:A:85:LEU:HD23	9	0.11
(1,750)	1:A:81:VAL:HG22	1:A:85:LEU:HD21	9	0.11
(1,750)	1:A:81:VAL:HG22	1:A:85:LEU:HD22	9	0.11
(1,750)	1:A:81:VAL:HG22	1:A:85:LEU:HD23	9	0.11
(1,750)	1:A:81:VAL:HG23	1:A:85:LEU:HD21	9	0.11
(1,750)	1:A:81:VAL:HG23	1:A:85:LEU:HD22	9	0.11
(1,750)	1:A:81:VAL:HG23	1:A:85:LEU:HD23	9	0.11
(1,746)	1:A:160:LEU:HD11	1:A:163:LEU:HD11	4	0.11
(1,746)	1:A:160:LEU:HD11	1:A:163:LEU:HD12	4	0.11
(1,746)	1:A:160:LEU:HD11	1:A:163:LEU:HD13	4	0.11
(1,746)	1:A:160:LEU:HD12	1:A:163:LEU:HD11	4	0.11
(1,746)	1:A:160:LEU:HD12	1:A:163:LEU:HD12	4	0.11
(1,746)	1:A:160:LEU:HD12	1:A:163:LEU:HD13	4	0.11
(1,746)	1:A:160:LEU:HD13	1:A:163:LEU:HD11	4	0.11
(1,746)	1:A:160:LEU:HD13	1:A:163:LEU:HD12	4	0.11
(1,746)	1:A:160:LEU:HD13	1:A:163:LEU:HD13	4	0.11

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,732)	1:A:147:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD21	2	0.11
(1,732)	1:A:147:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD22	2	0.11
(1,732)	1:A:147:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD23	2	0.11
(1,732)	1:A:147:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD21	2	0.11
(1,732)	1:A:147:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD22	2	0.11
(1,732)	1:A:147:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD23	2	0.11
(1,732)	1:A:147:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD21	2	0.11
(1,732)	1:A:147:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD22	2	0.11
(1,732)	1:A:147:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD23	2	0.11
(1,732)	1:A:147:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD21	7	0.11
(1,732)	1:A:147:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD22	7	0.11
(1,732)	1:A:147:LEU:HD21	1:A:150:LEU:HD23	7	0.11
(1,732)	1:A:147:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD21	7	0.11
(1,732)	1:A:147:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD22	7	0.11
(1,732)	1:A:147:LEU:HD22	1:A:150:LEU:HD23	7	0.11
(1,732)	1:A:147:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD21	7	0.11
(1,732)	1:A:147:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD22	7	0.11
(1,732)	1:A:147:LEU:HD23	1:A:150:LEU:HD23	7	0.11
(1,654)	1:A:60:SER:H	1:A:83:SER:H	18	0.11
(1,635)	1:A:113:LEU:H	1:A:114:TYR:H	7	0.11
(1,632)	1:A:146:ASP:H	1:A:150:LEU:H	6	0.11
(1,596)	1:A:164:ASN:H	1:A:195:LEU:H	5	0.11
(1,590)	1:A:171:LEU:H	1:A:187:LEU:H	12	0.11
(1,574)	1:A:36:LEU:HD11	1:A:85:LEU:HD21	15	0.11
(1,574)	1:A:36:LEU:HD11	1:A:85:LEU:HD22	15	0.11
(1,574)	1:A:36:LEU:HD11	1:A:85:LEU:HD23	15	0.11
(1,574)	1:A:36:LEU:HD12	1:A:85:LEU:HD21	15	0.11
(1,574)	1:A:36:LEU:HD12	1:A:85:LEU:HD22	15	0.11
(1,574)	1:A:36:LEU:HD12	1:A:85:LEU:HD23	15	0.11
(1,574)	1:A:36:LEU:HD13	1:A:85:LEU:HD21	15	0.11
(1,574)	1:A:36:LEU:HD13	1:A:85:LEU:HD22	15	0.11
(1,574)	1:A:36:LEU:HD13	1:A:85:LEU:HD23	15	0.11
(1,572)	1:A:21:LEU:HD21	1:A:28:ILE:HD11	7	0.11
(1,572)	1:A:21:LEU:HD21	1:A:28:ILE:HD12	7	0.11
(1,572)	1:A:21:LEU:HD21	1:A:28:ILE:HD13	7	0.11
(1,572)	1:A:21:LEU:HD22	1:A:28:ILE:HD11	7	0.11
(1,572)	1:A:21:LEU:HD22	1:A:28:ILE:HD12	7	0.11
(1,572)	1:A:21:LEU:HD22	1:A:28:ILE:HD13	7	0.11
(1,572)	1:A:21:LEU:HD23	1:A:28:ILE:HD11	7	0.11
(1,572)	1:A:21:LEU:HD23	1:A:28:ILE:HD12	7	0.11
(1,572)	1:A:21:LEU:HD23	1:A:28:ILE:HD13	7	0.11
(1,572)	1:A:21:LEU:HD21	1:A:28:ILE:HD11	8	0.11

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,572)	1:A:21:LEU:HD21	1:A:28:ILE:HD12	8	0.11
(1,572)	1:A:21:LEU:HD21	1:A:28:ILE:HD13	8	0.11
(1,572)	1:A:21:LEU:HD22	1:A:28:ILE:HD11	8	0.11
(1,572)	1:A:21:LEU:HD22	1:A:28:ILE:HD12	8	0.11
(1,572)	1:A:21:LEU:HD22	1:A:28:ILE:HD13	8	0.11
(1,572)	1:A:21:LEU:HD23	1:A:28:ILE:HD11	8	0.11
(1,572)	1:A:21:LEU:HD23	1:A:28:ILE:HD12	8	0.11
(1,572)	1:A:21:LEU:HD23	1:A:28:ILE:HD13	8	0.11
(1,567)	1:A:70:LEU:HD11	1:A:74:LYS:H	20	0.11
(1,567)	1:A:70:LEU:HD12	1:A:74:LYS:H	20	0.11
(1,567)	1:A:70:LEU:HD13	1:A:74:LYS:H	20	0.11
(1,563)	1:A:50:LEU:HD11	1:A:54:VAL:HG21	6	0.11
(1,563)	1:A:50:LEU:HD11	1:A:54:VAL:HG22	6	0.11
(1,563)	1:A:50:LEU:HD11	1:A:54:VAL:HG23	6	0.11
(1,563)	1:A:50:LEU:HD12	1:A:54:VAL:HG21	6	0.11
(1,563)	1:A:50:LEU:HD12	1:A:54:VAL:HG22	6	0.11
(1,563)	1:A:50:LEU:HD12	1:A:54:VAL:HG23	6	0.11
(1,563)	1:A:50:LEU:HD13	1:A:54:VAL:HG21	6	0.11
(1,563)	1:A:50:LEU:HD13	1:A:54:VAL:HG22	6	0.11
(1,563)	1:A:50:LEU:HD13	1:A:54:VAL:HG23	6	0.11
(1,547)	1:A:36:LEU:HD21	1:A:81:VAL:HG11	20	0.11
(1,547)	1:A:36:LEU:HD21	1:A:81:VAL:HG12	20	0.11
(1,547)	1:A:36:LEU:HD21	1:A:81:VAL:HG13	20	0.11
(1,547)	1:A:36:LEU:HD22	1:A:81:VAL:HG11	20	0.11
(1,547)	1:A:36:LEU:HD22	1:A:81:VAL:HG12	20	0.11
(1,547)	1:A:36:LEU:HD22	1:A:81:VAL:HG13	20	0.11
(1,547)	1:A:36:LEU:HD23	1:A:81:VAL:HG11	20	0.11
(1,547)	1:A:36:LEU:HD23	1:A:81:VAL:HG12	20	0.11
(1,547)	1:A:36:LEU:HD23	1:A:81:VAL:HG13	20	0.11
(1,546)	1:A:121:LEU:HD11	1:A:163:LEU:HD21	7	0.11
(1,546)	1:A:121:LEU:HD11	1:A:163:LEU:HD22	7	0.11
(1,546)	1:A:121:LEU:HD11	1:A:163:LEU:HD23	7	0.11
(1,546)	1:A:121:LEU:HD12	1:A:163:LEU:HD21	7	0.11
(1,546)	1:A:121:LEU:HD12	1:A:163:LEU:HD22	7	0.11
(1,546)	1:A:121:LEU:HD12	1:A:163:LEU:HD23	7	0.11
(1,546)	1:A:121:LEU:HD13	1:A:163:LEU:HD21	7	0.11
(1,546)	1:A:121:LEU:HD13	1:A:163:LEU:HD22	7	0.11
(1,546)	1:A:121:LEU:HD13	1:A:163:LEU:HD23	7	0.11
(1,535)	1:A:74:LYS:H	1:A:76:VAL:HG11	11	0.11
(1,535)	1:A:74:LYS:H	1:A:76:VAL:HG12	11	0.11
(1,535)	1:A:74:LYS:H	1:A:76:VAL:HG13	11	0.11
(1,518)	1:A:117:VAL:HG11	1:A:121:LEU:HD11	7	0.11

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,518)	1:A:117:VAL:HG11	1:A:121:LEU:HD12	7	0.11
(1,518)	1:A:117:VAL:HG11	1:A:121:LEU:HD13	7	0.11
(1,518)	1:A:117:VAL:HG12	1:A:121:LEU:HD11	7	0.11
(1,518)	1:A:117:VAL:HG12	1:A:121:LEU:HD12	7	0.11
(1,518)	1:A:117:VAL:HG12	1:A:121:LEU:HD13	7	0.11
(1,518)	1:A:117:VAL:HG13	1:A:121:LEU:HD11	7	0.11
(1,518)	1:A:117:VAL:HG13	1:A:121:LEU:HD12	7	0.11
(1,518)	1:A:117:VAL:HG13	1:A:121:LEU:HD13	7	0.11
(1,511)	1:A:145:LYS:H	1:A:149:LEU:HD21	12	0.11
(1,511)	1:A:145:LYS:H	1:A:149:LEU:HD22	12	0.11
(1,511)	1:A:145:LYS:H	1:A:149:LEU:HD23	12	0.11
(1,510)	1:A:137:LEU:HD11	1:A:150:LEU:H	5	0.11
(1,510)	1:A:137:LEU:HD12	1:A:150:LEU:H	5	0.11
(1,510)	1:A:137:LEU:HD13	1:A:150:LEU:H	5	0.11
(1,510)	1:A:137:LEU:HD11	1:A:150:LEU:H	12	0.11
(1,510)	1:A:137:LEU:HD12	1:A:150:LEU:H	12	0.11
(1,510)	1:A:137:LEU:HD13	1:A:150:LEU:H	12	0.11
(1,498)	1:A:156:LEU:HD21	1:A:160:LEU:HD11	16	0.11
(1,498)	1:A:156:LEU:HD21	1:A:160:LEU:HD12	16	0.11
(1,498)	1:A:156:LEU:HD21	1:A:160:LEU:HD13	16	0.11
(1,498)	1:A:156:LEU:HD22	1:A:160:LEU:HD11	16	0.11
(1,498)	1:A:156:LEU:HD22	1:A:160:LEU:HD12	16	0.11
(1,498)	1:A:156:LEU:HD22	1:A:160:LEU:HD13	16	0.11
(1,498)	1:A:156:LEU:HD23	1:A:160:LEU:HD11	16	0.11
(1,498)	1:A:156:LEU:HD23	1:A:160:LEU:HD12	16	0.11
(1,498)	1:A:156:LEU:HD23	1:A:160:LEU:HD13	16	0.11
(1,491)	1:A:37:ALA:H	1:A:85:LEU:HD11	4	0.11
(1,491)	1:A:37:ALA:H	1:A:85:LEU:HD12	4	0.11
(1,491)	1:A:37:ALA:H	1:A:85:LEU:HD13	4	0.11
(1,467)	1:A:62:VAL:HG11	1:A:63:GLY:H	20	0.11
(1,467)	1:A:62:VAL:HG12	1:A:63:GLY:H	20	0.11
(1,467)	1:A:62:VAL:HG13	1:A:63:GLY:H	20	0.11
(1,466)	1:A:113:LEU:HD11	1:A:117:VAL:HG11	2	0.11
(1,466)	1:A:113:LEU:HD11	1:A:117:VAL:HG12	2	0.11
(1,466)	1:A:113:LEU:HD11	1:A:117:VAL:HG13	2	0.11
(1,466)	1:A:113:LEU:HD12	1:A:117:VAL:HG11	2	0.11
(1,466)	1:A:113:LEU:HD12	1:A:117:VAL:HG12	2	0.11
(1,466)	1:A:113:LEU:HD12	1:A:117:VAL:HG13	2	0.11
(1,466)	1:A:113:LEU:HD13	1:A:117:VAL:HG11	2	0.11
(1,466)	1:A:113:LEU:HD13	1:A:117:VAL:HG12	2	0.11
(1,466)	1:A:113:LEU:HD13	1:A:117:VAL:HG13	2	0.11
(1,466)	1:A:113:LEU:HD11	1:A:117:VAL:HG11	5	0.11

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,466)	1:A:113:LEU:HD11	1:A:117:VAL:HG12	5	0.11
(1,466)	1:A:113:LEU:HD11	1:A:117:VAL:HG13	5	0.11
(1,466)	1:A:113:LEU:HD12	1:A:117:VAL:HG11	5	0.11
(1,466)	1:A:113:LEU:HD12	1:A:117:VAL:HG12	5	0.11
(1,466)	1:A:113:LEU:HD12	1:A:117:VAL:HG13	5	0.11
(1,466)	1:A:113:LEU:HD13	1:A:117:VAL:HG11	5	0.11
(1,466)	1:A:113:LEU:HD13	1:A:117:VAL:HG12	5	0.11
(1,466)	1:A:113:LEU:HD13	1:A:117:VAL:HG13	5	0.11
(1,453)	1:A:118:TYR:H	1:A:121:LEU:HD21	19	0.11
(1,453)	1:A:118:TYR:H	1:A:121:LEU:HD22	19	0.11
(1,453)	1:A:118:TYR:H	1:A:121:LEU:HD23	19	0.11
(1,419)	1:A:169:ASN:H	1:A:171:LEU:HD21	10	0.11
(1,419)	1:A:169:ASN:H	1:A:171:LEU:HD22	10	0.11
(1,419)	1:A:169:ASN:H	1:A:171:LEU:HD23	10	0.11
(1,408)	1:A:163:LEU:HD21	1:A:195:LEU:HD21	13	0.11
(1,408)	1:A:163:LEU:HD21	1:A:195:LEU:HD22	13	0.11
(1,408)	1:A:163:LEU:HD21	1:A:195:LEU:HD23	13	0.11
(1,408)	1:A:163:LEU:HD22	1:A:195:LEU:HD21	13	0.11
(1,408)	1:A:163:LEU:HD22	1:A:195:LEU:HD22	13	0.11
(1,408)	1:A:163:LEU:HD22	1:A:195:LEU:HD23	13	0.11
(1,408)	1:A:163:LEU:HD23	1:A:195:LEU:HD21	13	0.11
(1,408)	1:A:163:LEU:HD23	1:A:195:LEU:HD22	13	0.11
(1,408)	1:A:163:LEU:HD23	1:A:195:LEU:HD23	13	0.11
(1,399)	1:A:34:LEU:H	1:A:99:VAL:HG21	4	0.11
(1,399)	1:A:34:LEU:H	1:A:99:VAL:HG22	4	0.11
(1,399)	1:A:34:LEU:H	1:A:99:VAL:HG23	4	0.11
(1,399)	1:A:34:LEU:H	1:A:99:VAL:HG21	7	0.11
(1,399)	1:A:34:LEU:H	1:A:99:VAL:HG22	7	0.11
(1,399)	1:A:34:LEU:H	1:A:99:VAL:HG23	7	0.11
(1,399)	1:A:34:LEU:H	1:A:99:VAL:HG21	8	0.11
(1,399)	1:A:34:LEU:H	1:A:99:VAL:HG22	8	0.11
(1,399)	1:A:34:LEU:H	1:A:99:VAL:HG23	8	0.11
(1,399)	1:A:34:LEU:H	1:A:99:VAL:HG21	9	0.11
(1,399)	1:A:34:LEU:H	1:A:99:VAL:HG22	9	0.11
(1,399)	1:A:34:LEU:H	1:A:99:VAL:HG23	9	0.11
(1,399)	1:A:34:LEU:H	1:A:99:VAL:HG21	15	0.11
(1,399)	1:A:34:LEU:H	1:A:99:VAL:HG22	15	0.11
(1,399)	1:A:34:LEU:H	1:A:99:VAL:HG23	15	0.11
(1,382)	1:A:24:VAL:H	1:A:167:ILE:HD11	16	0.11
(1,382)	1:A:24:VAL:H	1:A:167:ILE:HD12	16	0.11
(1,382)	1:A:24:VAL:H	1:A:167:ILE:HD13	16	0.11
(1,375)	1:A:33:ILE:HD11	1:A:47:LEU:HD11	12	0.11

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,375)	1:A:33:ILE:HD11	1:A:47:LEU:HD12	12	0.11
(1,375)	1:A:33:ILE:HD11	1:A:47:LEU:HD13	12	0.11
(1,375)	1:A:33:ILE:HD12	1:A:47:LEU:HD11	12	0.11
(1,375)	1:A:33:ILE:HD12	1:A:47:LEU:HD12	12	0.11
(1,375)	1:A:33:ILE:HD12	1:A:47:LEU:HD13	12	0.11
(1,375)	1:A:33:ILE:HD13	1:A:47:LEU:HD11	12	0.11
(1,375)	1:A:33:ILE:HD13	1:A:47:LEU:HD12	12	0.11
(1,375)	1:A:33:ILE:HD13	1:A:47:LEU:HD13	12	0.11
(1,311)	1:A:51:GLY:H	1:A:76:VAL:HG11	1	0.11
(1,311)	1:A:51:GLY:H	1:A:76:VAL:HG12	1	0.11
(1,311)	1:A:51:GLY:H	1:A:76:VAL:HG13	1	0.11
(1,304)	1:A:91:VAL:HG11	1:A:93:ASP:H	17	0.11
(1,304)	1:A:91:VAL:HG12	1:A:93:ASP:H	17	0.11
(1,304)	1:A:91:VAL:HG13	1:A:93:ASP:H	17	0.11
(1,296)	1:A:137:LEU:HD11	1:A:149:LEU:H	2	0.11
(1,296)	1:A:137:LEU:HD12	1:A:149:LEU:H	2	0.11
(1,296)	1:A:137:LEU:HD13	1:A:149:LEU:H	2	0.11
(1,296)	1:A:137:LEU:HD11	1:A:149:LEU:H	9	0.11
(1,296)	1:A:137:LEU:HD12	1:A:149:LEU:H	9	0.11
(1,296)	1:A:137:LEU:HD13	1:A:149:LEU:H	9	0.11
(1,295)	1:A:153:LEU:H	1:A:190:LEU:HD21	4	0.11
(1,295)	1:A:153:LEU:H	1:A:190:LEU:HD22	4	0.11
(1,295)	1:A:153:LEU:H	1:A:190:LEU:HD23	4	0.11
(1,295)	1:A:153:LEU:H	1:A:190:LEU:HD21	20	0.11
(1,295)	1:A:153:LEU:H	1:A:190:LEU:HD22	20	0.11
(1,295)	1:A:153:LEU:H	1:A:190:LEU:HD23	20	0.11
(1,289)	1:A:101:ILE:HD11	1:A:128:ILE:H	19	0.11
(1,289)	1:A:101:ILE:HD12	1:A:128:ILE:H	19	0.11
(1,289)	1:A:101:ILE:HD13	1:A:128:ILE:H	19	0.11
(1,289)	1:A:101:ILE:HD11	1:A:128:ILE:H	20	0.11
(1,289)	1:A:101:ILE:HD12	1:A:128:ILE:H	20	0.11
(1,289)	1:A:101:ILE:HD13	1:A:128:ILE:H	20	0.11
(1,269)	1:A:145:LYS:H	1:A:149:LEU:HD11	6	0.11
(1,269)	1:A:145:LYS:H	1:A:149:LEU:HD12	6	0.11
(1,269)	1:A:145:LYS:H	1:A:149:LEU:HD13	6	0.11
(1,269)	1:A:145:LYS:H	1:A:149:LEU:HD11	8	0.11
(1,269)	1:A:145:LYS:H	1:A:149:LEU:HD12	8	0.11
(1,269)	1:A:145:LYS:H	1:A:149:LEU:HD13	8	0.11
(1,263)	1:A:163:LEU:HD11	1:A:164:ASN:H	10	0.11
(1,263)	1:A:163:LEU:HD12	1:A:164:ASN:H	10	0.11
(1,263)	1:A:163:LEU:HD13	1:A:164:ASN:H	10	0.11
(1,259)	1:A:71:ALA:H	1:A:78:ILE:HD11	5	0.11

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,259)	1:A:71:ALA:H	1:A:78:ILE:HD12	5	0.11
(1,259)	1:A:71:ALA:H	1:A:78:ILE:HD13	5	0.11
(1,259)	1:A:71:ALA:H	1:A:78:ILE:HD11	16	0.11
(1,259)	1:A:71:ALA:H	1:A:78:ILE:HD12	16	0.11
(1,259)	1:A:71:ALA:H	1:A:78:ILE:HD13	16	0.11
(1,236)	1:A:21:LEU:HD11	1:A:25:ALA:H	4	0.11
(1,236)	1:A:21:LEU:HD12	1:A:25:ALA:H	4	0.11
(1,236)	1:A:21:LEU:HD13	1:A:25:ALA:H	4	0.11
(1,233)	1:A:54:VAL:HG11	1:A:55:THR:H	6	0.11
(1,233)	1:A:54:VAL:HG12	1:A:55:THR:H	6	0.11
(1,233)	1:A:54:VAL:HG13	1:A:55:THR:H	6	0.11
(1,230)	1:A:147:LEU:H	1:A:150:LEU:HD21	16	0.11
(1,230)	1:A:147:LEU:H	1:A:150:LEU:HD22	16	0.11
(1,230)	1:A:147:LEU:H	1:A:150:LEU:HD23	16	0.11
(1,229)	1:A:147:LEU:H	1:A:147:LEU:HD21	1	0.11
(1,229)	1:A:147:LEU:H	1:A:147:LEU:HD22	1	0.11
(1,229)	1:A:147:LEU:H	1:A:147:LEU:HD23	1	0.11
(1,229)	1:A:147:LEU:H	1:A:147:LEU:HD21	11	0.11
(1,229)	1:A:147:LEU:H	1:A:147:LEU:HD22	11	0.11
(1,229)	1:A:147:LEU:H	1:A:147:LEU:HD23	11	0.11
(1,217)	1:A:163:LEU:HD11	1:A:195:LEU:H	1	0.11
(1,217)	1:A:163:LEU:HD12	1:A:195:LEU:H	1	0.11
(1,217)	1:A:163:LEU:HD13	1:A:195:LEU:H	1	0.11
(1,217)	1:A:163:LEU:HD11	1:A:195:LEU:H	15	0.11
(1,217)	1:A:163:LEU:HD12	1:A:195:LEU:H	15	0.11
(1,217)	1:A:163:LEU:HD13	1:A:195:LEU:H	15	0.11
(1,217)	1:A:163:LEU:HD11	1:A:195:LEU:H	16	0.11
(1,217)	1:A:163:LEU:HD12	1:A:195:LEU:H	16	0.11
(1,217)	1:A:163:LEU:HD13	1:A:195:LEU:H	16	0.11
(1,176)	1:A:186:ALA:H	1:A:187:LEU:HD21	7	0.11
(1,176)	1:A:186:ALA:H	1:A:187:LEU:HD22	7	0.11
(1,176)	1:A:186:ALA:H	1:A:187:LEU:HD23	7	0.11
(1,175)	1:A:163:LEU:HD11	1:A:166:LEU:H	17	0.11
(1,175)	1:A:163:LEU:HD12	1:A:166:LEU:H	17	0.11
(1,175)	1:A:163:LEU:HD13	1:A:166:LEU:H	17	0.11
(1,174)	1:A:61:SER:H	1:A:62:VAL:HG11	3	0.11
(1,174)	1:A:61:SER:H	1:A:62:VAL:HG12	3	0.11
(1,174)	1:A:61:SER:H	1:A:62:VAL:HG13	3	0.11
(1,174)	1:A:61:SER:H	1:A:62:VAL:HG11	16	0.11
(1,174)	1:A:61:SER:H	1:A:62:VAL:HG12	16	0.11
(1,174)	1:A:61:SER:H	1:A:62:VAL:HG13	16	0.11
(1,123)	1:A:24:VAL:H	1:A:128:ILE:HD11	1	0.11

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,123)	1:A:24:VAL:H	1:A:128:ILE:HD12	1	0.11
(1,123)	1:A:24:VAL:H	1:A:128:ILE:HD13	1	0.11
(1,123)	1:A:24:VAL:H	1:A:128:ILE:HD11	9	0.11
(1,123)	1:A:24:VAL:H	1:A:128:ILE:HD12	9	0.11
(1,123)	1:A:24:VAL:H	1:A:128:ILE:HD13	9	0.11
(1,1109)	1:A:129:LEU:H	1:A:190:LEU:O	19	0.11
(1,1105)	1:A:102:PHE:H	1:A:128:ILE:O	11	0.11
(1,1099)	1:A:124:GLY:O	1:A:98:ILE:H	18	0.11
(1,1084)	1:A:154:GLU:O	1:A:158:SER:H	19	0.11
(1,1035)	1:A:23:SER:O	1:A:27:GLN:N	3	0.11
(1,1034)	1:A:23:SER:O	1:A:27:GLN:H	9	0.11
(1,1034)	1:A:23:SER:O	1:A:27:GLN:H	16	0.11
(1,1032)	1:A:22:VAL:O	1:A:26:ASN:H	8	0.11
(1,1017)	1:A:101:ILE:HA	1:A:128:ILE:H	19	0.11
(1,1016)	1:A:165:TRP:HZ3	1:A:127:PHE:HZ	3	0.11
(1,101)	1:A:135:GLU:H	1:A:138:GLN:H	4	0.11
(1,1003)	1:A:59:GLN:H	1:A:37:ALA:H	5	0.11
(1,1003)	1:A:59:GLN:H	1:A:37:ALA:H	17	0.11
(1,1003)	1:A:59:GLN:H	1:A:37:ALA:H	18	0.11

## 10 Dihedral-angle violation analysis

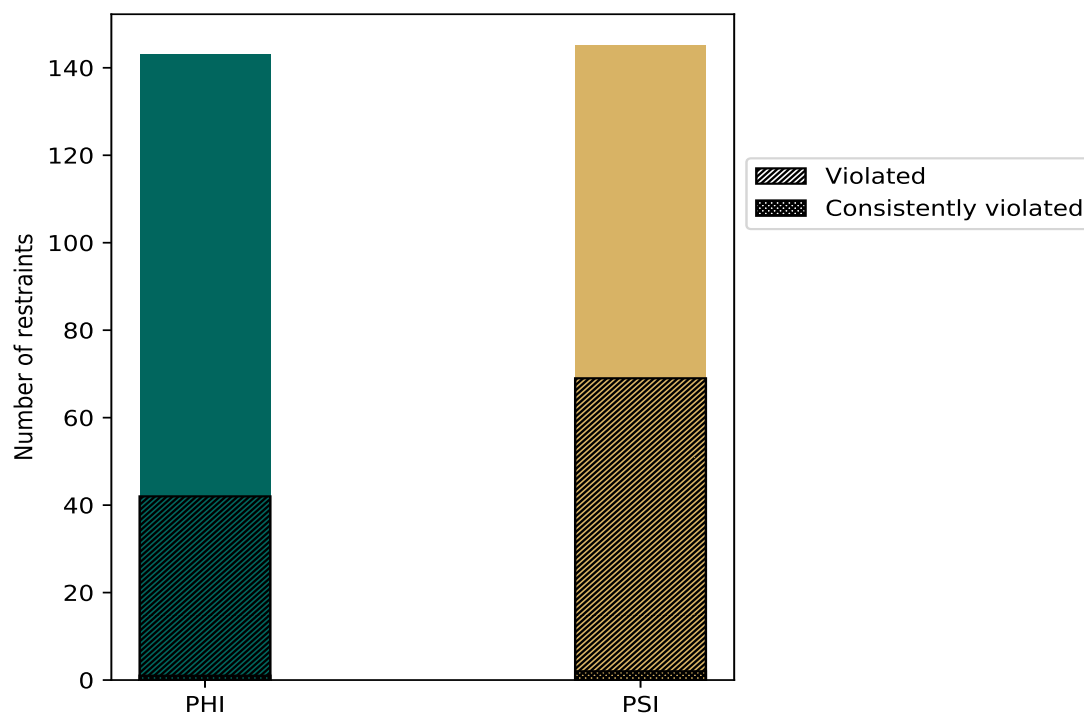
### 10.1 Summary of dihedral-angle violations

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	% <sup>1</sup>	Violated <sup>3</sup>			Consistently Violated <sup>4</sup>		
			Count	% <sup>2</sup>	% <sup>1</sup>	Count	% <sup>2</sup>	% <sup>1</sup>
PHI	143	49.7	42	29.4	14.6	1	0.7	0.3
PSI	145	50.3	69	47.6	24.0	2	1.4	0.7
Total	288	100.0	111	38.5	38.5	3	1.0	1.0

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

#### 10.1.1 Bar chart : Distribution of dihedral-angles and violations



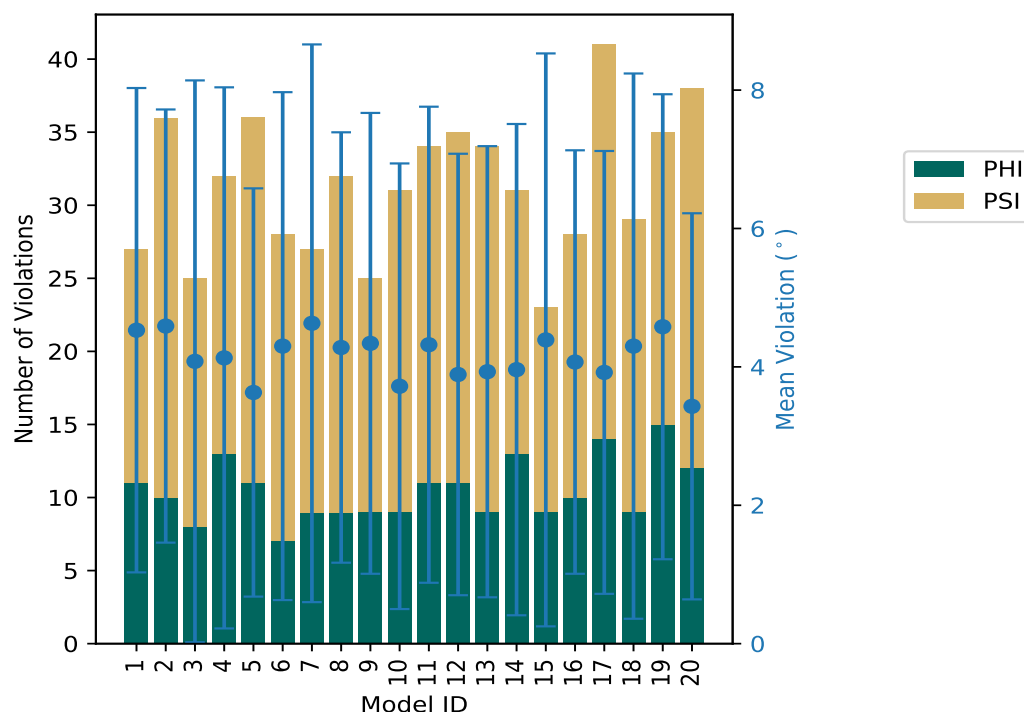
Violated and consistently violated restraints are shown using different hatch patterns in their respective categories

## 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 (°)
	PHI	PSI	Total			
1	11	16	27	4.53	17.9	3.5
2	10	26	36	4.59	14.4	3.13
3	8	17	25	4.08	19.3	4.06
4	13	19	32	4.13	21.9	3.91
5	11	25	36	3.63	17.1	2.95
6	7	21	28	4.3	18.2	3.67
7	9	18	27	4.63	19.2	4.03
8	9	23	32	4.28	17.4	3.11
9	9	16	25	4.34	15.5	3.33
10	9	22	31	3.72	16.7	3.22
11	11	23	34	4.32	17.0	3.44
12	11	24	35	3.89	18.6	3.19
13	9	25	34	3.93	18.0	3.26
14	13	18	31	3.96	17.4	3.55
15	9	14	23	4.39	19.8	4.14
16	10	18	28	4.07	16.4	3.06
17	14	27	41	3.92	18.0	3.2
18	9	20	29	4.3	18.5	3.94
19	15	20	35	4.58	14.7	3.36
20	12	26	38	3.43	14.7	2.79

### 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	
PHI	PSI	Total	Count <sup>1</sup>	%
13	12	25	1	5.0
4	8	12	2	10.0
7	3	10	3	15.0
5	7	12	4	20.0
2	8	10	5	25.0
1	8	9	6	30.0
0	4	4	7	35.0
1	3	4	8	40.0
0	4	4	9	45.0
1	1	2	10	50.0
2	2	4	11	55.0
3	0	3	12	60.0

*Continued on next page...*

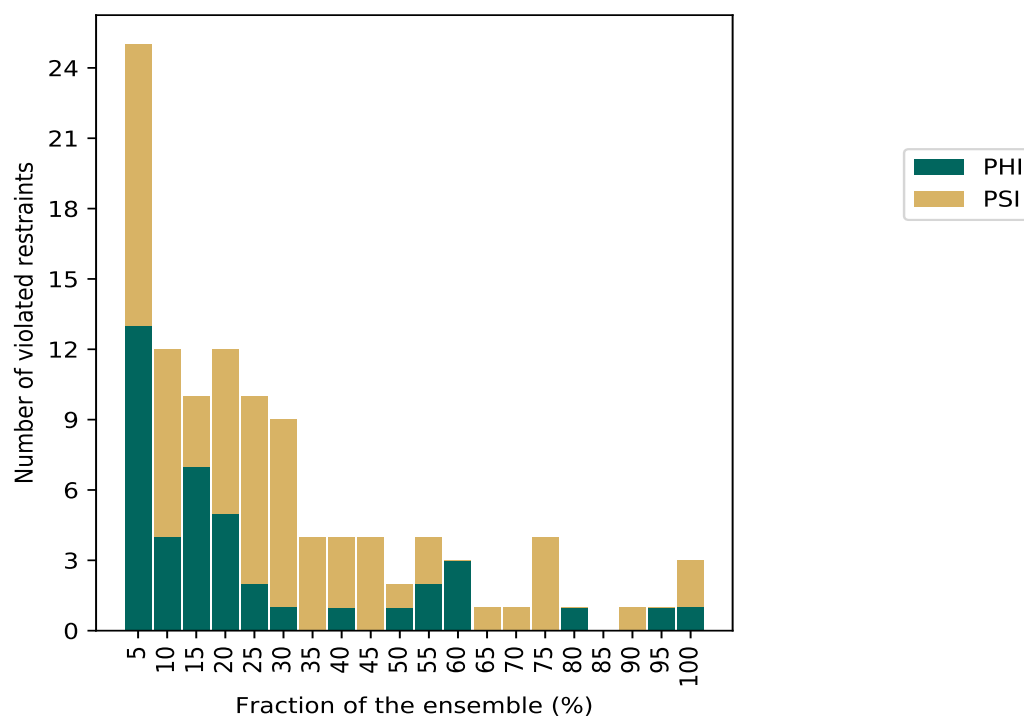


*Continued from previous page...*

Number of violated restraints			Fraction of the ensemble	
PHI	PSI	Total	Count <sup>1</sup>	%
0	1	1	13	65.0
0	1	1	14	70.0
0	4	4	15	75.0
1	0	1	16	80.0
0	0	0	17	85.0
0	1	1	18	90.0
1	0	1	19	95.0
1	2	3	20	100.0

<sup>1</sup> Number of models with violations

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

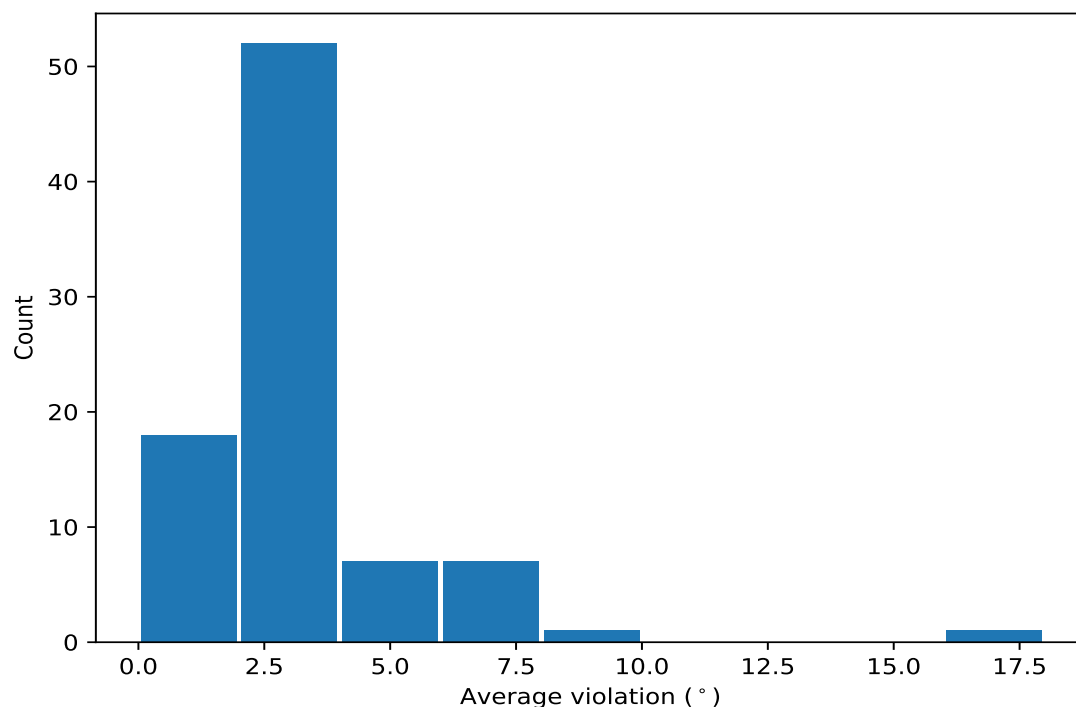


## 10.4 Most violated dihedral-angle restraints

### 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 <sup>1</sup>	Mean (°)	SD <sup>2</sup> (°)
(1,240)	1:A:163:LEU:N	1:A:163:LEU:CA	1:A:163:LEU:C	1:A:164:ASN:N	20	17.54	1.81
(1,116)	1:A:84:ASN:N	1:A:84:ASN:CA	1:A:84:ASN:C	1:A:85:LEU:N	15	8.79	3.41
(1,143)	1:A:102:PHE:N	1:A:102:PHE:CA	1:A:102:PHE:C	1:A:103:CYS:N	18	7.3	2.32
(1,147)	1:A:104:HIS:N	1:A:104:HIS:CA	1:A:104:HIS:C	1:A:105:LEU:N	20	6.89	1.87
(1,218)	1:A:149:LEU:N	1:A:149:LEU:CA	1:A:149:LEU:C	1:A:150:LEU:N	4	6.97	1.06
(1,145)	1:A:103:CYS:N	1:A:103:CYS:CA	1:A:103:CYS:C	1:A:104:HIS:N	9	3.34	2.27
(1,288)	1:A:195:LEU:N	1:A:195:LEU:CA	1:A:195:LEU:C	1:A:196:GLU:N	4	6.0	1.88
(1,2)	1:A:21:LEU:N	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:C	1:A:22:VAL:N	6	4.82	1.96
(1,114)	1:A:83:SER:N	1:A:83:SER:CA	1:A:83:SER:C	1:A:84:ASN:N	6	6.32	1.39
(1,284)	1:A:193:GLN:N	1:A:193:GLN:CA	1:A:193:GLN:C	1:A:194:LYS:N	15	5.33	2.3
(1,180)	1:A:123:PRO:N	1:A:123:PRO:CA	1:A:123:PRO:C	1:A:124:GLY:N	7	3.29	2.06
(1,194)	1:A:130:GLU:N	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:C	1:A:131:GLY:N	15	4.25	1.66
(1,198)	1:A:132:PHE:N	1:A:132:PHE:CA	1:A:132:PHE:C	1:A:133:ALA:N	7	4.01	1.56
(1,188)	1:A:127:PHE:N	1:A:127:PHE:CA	1:A:127:PHE:C	1:A:128:ILE:N	11	2.75	1.71
(1,173)	1:A:118:TYR:N	1:A:118:TYR:CA	1:A:118:TYR:C	1:A:119:GLN:N	11	3.35	1.42
(1,212)	1:A:141:THR:N	1:A:141:THR:CA	1:A:141:THR:C	1:A:142:GLY:N	4	3.52	1.8
(1,118)	1:A:85:LEU:N	1:A:85:LEU:CA	1:A:85:LEU:C	1:A:86:ALA:N	7	2.99	1.68
(1,268)	1:A:185:ALA:N	1:A:185:ALA:CA	1:A:185:ALA:C	1:A:186:ALA:N	15	3.43	1.19
(1,106)	1:A:79:THR:N	1:A:79:THR:CA	1:A:79:THR:C	1:A:80:THR:N	14	3.78	0.79
(1,18)	1:A:30:GLN:N	1:A:30:GLN:CA	1:A:30:GLN:C	1:A:31:GLY:N	13	2.7	1.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models <sup>1</sup>	Mean (°)	SD <sup>2</sup> (°)
(1,137)	1:A:99:VAL:N	1:A:99:VAL:CA	1:A:99:VAL:C	1:A:100:SER:N	3	3.73	1.18
(1,62)	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	1:A:58:ASP:N	6	3.07	1.26
(1,171)	1:A:117:VAL:N	1:A:117:VAL:CA	1:A:117:VAL:C	1:A:118:TYR:N	6	3.37	1.27
(1,20)	1:A:31:GLY:N	1:A:31:GLY:CA	1:A:31:GLY:C	1:A:32:LYS:N	4	2.77	1.47
(1,22)	1:A:32:LYS:N	1:A:32:LYS:CA	1:A:32:LYS:C	1:A:33:ILE:N	8	3.19	0.94
(1,260)	1:A:173:ARG:N	1:A:173:ARG:CA	1:A:173:ARG:C	1:A:174:ASN:N	6	2.97	1.32
(1,139)	1:A:100:SER:N	1:A:100:SER:CA	1:A:100:SER:C	1:A:101:ILE:N	5	2.54	1.34
(1,270)	1:A:186:ALA:N	1:A:186:ALA:CA	1:A:186:ALA:C	1:A:187:LEU:N	2	4.45	0.35
(1,258)	1:A:172:GLU:N	1:A:172:GLU:CA	1:A:172:GLU:C	1:A:173:ARG:N	6	3.1	1.08
(1,156)	1:A:109:LEU:N	1:A:109:LEU:CA	1:A:109:LEU:C	1:A:110:ARG:N	5	2.7	1.34
(1,54)	1:A:53:GLU:N	1:A:53:GLU:CA	1:A:53:GLU:C	1:A:54:VAL:N	8	2.98	0.72
(1,28)	1:A:35:CYS:N	1:A:35:CYS:CA	1:A:35:CYS:C	1:A:36:LEU:N	6	2.65	0.93
(1,202)	1:A:135:GLU:N	1:A:135:GLU:CA	1:A:135:GLU:C	1:A:136:GLN:N	5	2.24	1.04
(1,274)	1:A:188:ILE:N	1:A:188:ILE:CA	1:A:188:ILE:C	1:A:189:GLN:N	9	2.9	1.11
(1,169)	1:A:116:LYS:N	1:A:116:LYS:CA	1:A:116:LYS:C	1:A:117:VAL:N	5	2.0	1.01
(1,266)	1:A:184:LYS:N	1:A:184:LYS:CA	1:A:184:LYS:C	1:A:185:ALA:N	2	2.6	1.4
(1,122)	1:A:88:PHE:N	1:A:88:PHE:CA	1:A:88:PHE:C	1:A:89:ASP:N	2	2.7	1.2
(1,127)	1:A:92:ALA:N	1:A:92:ALA:CA	1:A:92:ALA:C	1:A:93:ASP:N	7	2.49	0.92
(1,264)	1:A:175:LEU:N	1:A:175:LEU:CA	1:A:175:LEU:C	1:A:176:ASP:N	8	2.77	0.91
(1,112)	1:A:82:GLN:N	1:A:82:GLN:CA	1:A:82:GLN:C	1:A:83:SER:N	2	2.4	1.2
(1,206)	1:A:137:LEU:N	1:A:137:LEU:CA	1:A:137:LEU:C	1:A:138:GLN:N	4	2.45	0.66
(1,182)	1:A:124:GLY:N	1:A:124:GLY:CA	1:A:124:GLY:C	1:A:125:GLY:N	9	2.17	0.84
(1,262)	1:A:174:ASN:N	1:A:174:ASN:CA	1:A:174:ASN:C	1:A:175:LEU:N	5	2.1	0.67
(1,190)	1:A:128:ILE:N	1:A:128:ILE:CA	1:A:128:ILE:C	1:A:129:LEU:N	10	2.04	0.46
(1,46)	1:A:49:SER:N	1:A:49:SER:CA	1:A:49:SER:C	1:A:50:LEU:N	4	2.08	0.64
(1,186)	1:A:126:VAL:N	1:A:126:VAL:CA	1:A:126:VAL:C	1:A:127:PHE:N	9	2.14	0.59
(1,6)	1:A:23:SER:N	1:A:23:SER:CA	1:A:23:SER:C	1:A:24:VAL:N	5	1.92	0.67
(1,226)	1:A:155:THR:N	1:A:155:THR:CA	1:A:155:THR:C	1:A:156:LEU:N	2	1.95	0.85
(1,175)	1:A:119:GLN:N	1:A:119:GLN:CA	1:A:119:GLN:C	1:A:120:GLY:N	6	1.87	0.38
(1,280)	1:A:191:LEU:N	1:A:191:LEU:CA	1:A:191:LEU:C	1:A:192:GLY:N	5	1.76	0.36
(1,90)	1:A:71:ALA:N	1:A:71:ALA:CA	1:A:71:ALA:C	1:A:72:GLN:N	3	1.63	0.42
(1,58)	1:A:55:THR:N	1:A:55:THR:CA	1:A:55:THR:C	1:A:56:ALA:N	3	1.67	0.4
(1,160)	1:A:111:GLN:N	1:A:111:GLN:CA	1:A:111:GLN:C	1:A:112:GLN:N	4	1.4	0.35
(1,100)	1:A:76:VAL:N	1:A:76:VAL:CA	1:A:76:VAL:C	1:A:77:LYS:N	2	1.95	0.05
(1,204)	1:A:136:GLN:N	1:A:136:GLN:CA	1:A:136:GLN:C	1:A:137:LEU:N	5	1.68	0.24
(1,70)	1:A:61:SER:N	1:A:61:SER:CA	1:A:61:SER:C	1:A:62:VAL:N	2	1.3	0.2
(1,154)	1:A:108:SER:N	1:A:108:SER:CA	1:A:108:SER:C	1:A:109:LEU:N	2	1.4	0.0
(1,201)	1:A:134:PRO:C	1:A:135:GLU:N	1:A:135:GLU:CA	1:A:135:GLU:C	5	4.94	4.64
(1,181)	1:A:123:PRO:C	1:A:124:GLY:N	1:A:124:GLY:CA	1:A:124:GLY:C	19	6.93	2.87
(1,19)	1:A:30:GLN:C	1:A:31:GLY:N	1:A:31:GLY:CA	1:A:31:GLY:C	20	6.71	2.04
(1,111)	1:A:81:VAL:C	1:A:82:GLN:N	1:A:82:GLN:CA	1:A:82:GLN:C	12	5.33	2.36
(1,283)	1:A:192:GLY:C	1:A:193:GLN:N	1:A:193:GLN:CA	1:A:193:GLN:C	11	2.95	1.39
(1,142)	1:A:101:ILE:C	1:A:102:PHE:N	1:A:102:PHE:CA	1:A:102:PHE:C	16	3.45	1.61
(1,211)	1:A:140:ASN:C	1:A:141:THR:N	1:A:141:THR:CA	1:A:141:THR:C	8	2.71	1.42
(1,115)	1:A:83:SER:C	1:A:84:ASN:N	1:A:84:ASN:CA	1:A:84:ASN:C	11	3.13	1.19
(1,285)	1:A:193:GLN:C	1:A:194:LYS:N	1:A:194:LYS:CA	1:A:194:LYS:C	12	3.53	1.13
(1,3)	1:A:21:LEU:C	1:A:22:VAL:N	1:A:22:VAL:CA	1:A:22:VAL:C	3	3.47	1.27
(1,185)	1:A:125:GLY:C	1:A:126:VAL:N	1:A:126:VAL:CA	1:A:126:VAL:C	12	2.3	0.99
(1,239)	1:A:162:SER:C	1:A:163:LEU:N	1:A:163:LEU:CA	1:A:163:LEU:C	3	2.8	1.36
(1,123)	1:A:88:PHE:C	1:A:89:ASP:N	1:A:89:ASP:CA	1:A:89:ASP:C	3	2.87	1.27
(1,189)	1:A:127:PHE:C	1:A:128:ILE:N	1:A:128:ILE:CA	1:A:128:ILE:C	4	3.2	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

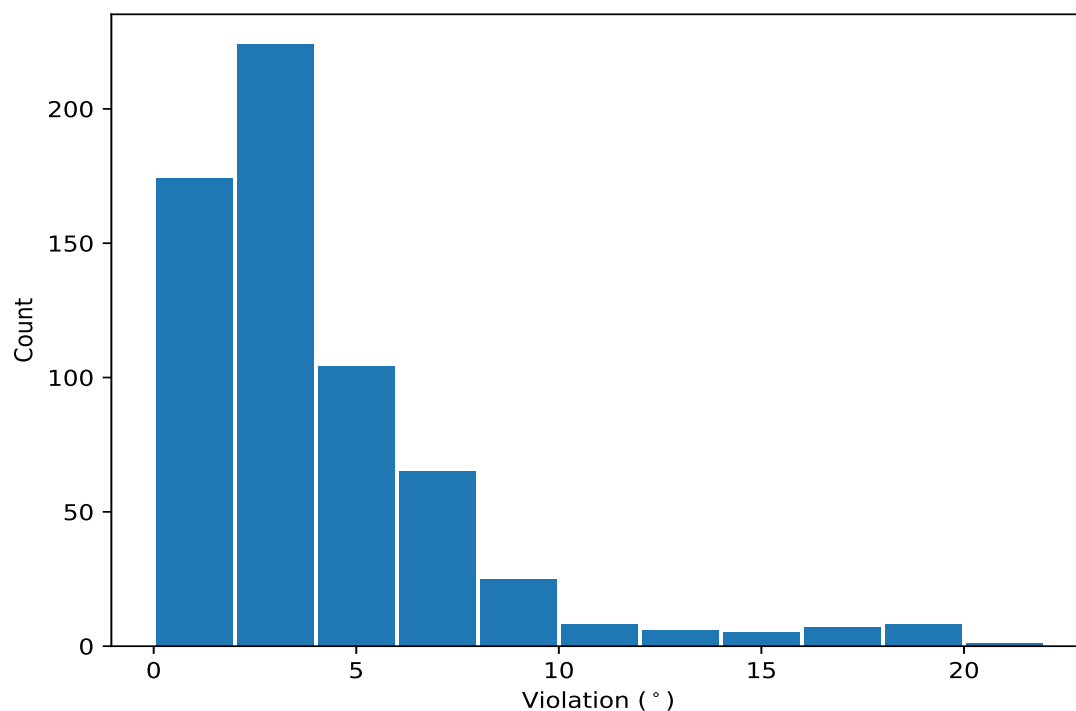
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models <sup>1</sup>	Mean (°)	SD <sup>2</sup> (°)
(1,170)	1:A:116:LYS:C	1:A:117:VAL:N	1:A:117:VAL:CA	1:A:117:VAL:C	4	2.4	1.01
(1,57)	1:A:54:VAL:C	1:A:55:THR:N	1:A:55:THR:CA	1:A:55:THR:C	10	2.07	0.69
(1,126)	1:A:91:VAL:C	1:A:92:ALA:N	1:A:92:ALA:CA	1:A:92:ALA:C	4	2.33	0.7
(1,237)	1:A:161:PRO:C	1:A:162:SER:N	1:A:162:SER:CA	1:A:162:SER:C	4	2.13	0.75
(1,193)	1:A:129:LEU:C	1:A:130:GLU:N	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:C	2	2.1	1.0
(1,117)	1:A:84:ASN:C	1:A:85:LEU:N	1:A:85:LEU:CA	1:A:85:LEU:C	3	2.13	0.7
(1,281)	1:A:191:LEU:C	1:A:192:GLY:N	1:A:192:GLY:CA	1:A:192:GLY:C	5	1.7	0.53
(1,109)	1:A:80:THR:C	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	2	2.35	0.35
(1,23)	1:A:32:LYS:C	1:A:33:ILE:N	1:A:33:ILE:CA	1:A:33:ILE:C	2	2.05	0.65
(1,69)	1:A:60:SER:C	1:A:61:SER:N	1:A:61:SER:CA	1:A:61:SER:C	3	1.87	0.57
(1,247)	1:A:166:LEU:C	1:A:167:ILE:N	1:A:167:ILE:CA	1:A:167:ILE:C	6	1.62	0.37
(1,259)	1:A:172:GLU:C	1:A:173:ARG:N	1:A:173:ARG:CA	1:A:173:ARG:C	3	1.83	0.38
(1,249)	1:A:167:ILE:C	1:A:168:ALA:N	1:A:168:ALA:CA	1:A:168:ALA:C	4	1.77	0.15
(1,176)	1:A:120:GLY:C	1:A:121:LEU:N	1:A:121:LEU:CA	1:A:121:LEU:C	2	1.6	0.2
(1,138)	1:A:99:VAL:C	1:A:100:SER:N	1:A:100:SER:CA	1:A:100:SER:C	3	1.27	0.09

<sup>1</sup> Number of violated models, <sup>2</sup>Standard 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 (°)
(1,240)	1:A:163:LEU:N	1:A:163:LEU:CA	1:A:163:LEU:C	1:A:164:ASN:N	4	21.9
(1,240)	1:A:163:LEU:N	1:A:163:LEU:CA	1:A:163:LEU:C	1:A:164:ASN:N	15	19.8
(1,240)	1:A:163:LEU:N	1:A:163:LEU:CA	1:A:163:LEU:C	1:A:164:ASN:N	3	19.3
(1,240)	1:A:163:LEU:N	1:A:163:LEU:CA	1:A:163:LEU:C	1:A:164:ASN:N	7	19.2
(1,240)	1:A:163:LEU:N	1:A:163:LEU:CA	1:A:163:LEU:C	1:A:164:ASN:N	12	18.6
(1,240)	1:A:163:LEU:N	1:A:163:LEU:CA	1:A:163:LEU:C	1:A:164:ASN:N	18	18.5
(1,240)	1:A:163:LEU:N	1:A:163:LEU:CA	1:A:163:LEU:C	1:A:164:ASN:N	6	18.2
(1,240)	1:A:163:LEU:N	1:A:163:LEU:CA	1:A:163:LEU:C	1:A:164:ASN:N	13	18.0
(1,240)	1:A:163:LEU:N	1:A:163:LEU:CA	1:A:163:LEU:C	1:A:164:ASN:N	17	18.0
(1,240)	1:A:163:LEU:N	1:A:163:LEU:CA	1:A:163:LEU:C	1:A:164:ASN:N	1	17.9
(1,240)	1:A:163:LEU:N	1:A:163:LEU:CA	1:A:163:LEU:C	1:A:164:ASN:N	8	17.4
(1,240)	1:A:163:LEU:N	1:A:163:LEU:CA	1:A:163:LEU:C	1:A:164:ASN:N	14	17.4
(1,240)	1:A:163:LEU:N	1:A:163:LEU:CA	1:A:163:LEU:C	1:A:164:ASN:N	5	17.1
(1,240)	1:A:163:LEU:N	1:A:163:LEU:CA	1:A:163:LEU:C	1:A:164:ASN:N	11	17.0
(1,240)	1:A:163:LEU:N	1:A:163:LEU:CA	1:A:163:LEU:C	1:A:164:ASN:N	10	16.7
(1,240)	1:A:163:LEU:N	1:A:163:LEU:CA	1:A:163:LEU:C	1:A:164:ASN:N	16	16.4
(1,240)	1:A:163:LEU:N	1:A:163:LEU:CA	1:A:163:LEU:C	1:A:164:ASN:N	9	15.5
(1,240)	1:A:163:LEU:N	1:A:163:LEU:CA	1:A:163:LEU:C	1:A:164:ASN:N	19	14.7
(1,240)	1:A:163:LEU:N	1:A:163:LEU:CA	1:A:163:LEU:C	1:A:164:ASN:N	20	14.7
(1,240)	1:A:163:LEU:N	1:A:163:LEU:CA	1:A:163:LEU:C	1:A:164:ASN:N	2	14.4
(1,116)	1:A:84:ASN:N	1:A:84:ASN:CA	1:A:84:ASN:C	1:A:85:LEU:N	7	14.1
(1,201)	1:A:134:PRO:C	1:A:135:GLU:N	1:A:135:GLU:CA	1:A:135:GLU:C	18	13.4
(1,181)	1:A:123:PRO:C	1:A:124:GLY:N	1:A:124:GLY:CA	1:A:124:GLY:C	17	13.3
(1,199)	1:A:132:PHE:C	1:A:133:ALA:N	1:A:133:ALA:CA	1:A:133:ALA:C	19	12.9
(1,116)	1:A:84:ASN:N	1:A:84:ASN:CA	1:A:84:ASN:C	1:A:85:LEU:N	15	12.5
(1,116)	1:A:84:ASN:N	1:A:84:ASN:CA	1:A:84:ASN:C	1:A:85:LEU:N	19	12.3
(1,143)	1:A:102:PHE:N	1:A:102:PHE:CA	1:A:102:PHE:C	1:A:103:CYS:N	11	12.0
(1,19)	1:A:30:GLN:C	1:A:31:GLY:N	1:A:31:GLY:CA	1:A:31:GLY:C	2	11.9
(1,116)	1:A:84:ASN:N	1:A:84:ASN:CA	1:A:84:ASN:C	1:A:85:LEU:N	3	11.7
(1,181)	1:A:123:PRO:C	1:A:124:GLY:N	1:A:124:GLY:CA	1:A:124:GLY:C	6	11.3
(1,147)	1:A:104:HIS:N	1:A:104:HIS:CA	1:A:104:HIS:C	1:A:105:LEU:N	2	11.3
(1,143)	1:A:102:PHE:N	1:A:102:PHE:CA	1:A:102:PHE:C	1:A:103:CYS:N	20	10.9
(1,116)	1:A:84:ASN:N	1:A:84:ASN:CA	1:A:84:ASN:C	1:A:85:LEU:N	4	10.6
(1,116)	1:A:84:ASN:N	1:A:84:ASN:CA	1:A:84:ASN:C	1:A:85:LEU:N	11	10.3
(1,116)	1:A:84:ASN:N	1:A:84:ASN:CA	1:A:84:ASN:C	1:A:85:LEU:N	2	10.2
(1,19)	1:A:30:GLN:C	1:A:31:GLY:N	1:A:31:GLY:CA	1:A:31:GLY:C	14	9.9
(1,116)	1:A:84:ASN:N	1:A:84:ASN:CA	1:A:84:ASN:C	1:A:85:LEU:N	13	9.7
(1,143)	1:A:102:PHE:N	1:A:102:PHE:CA	1:A:102:PHE:C	1:A:103:CYS:N	9	9.6
(1,181)	1:A:123:PRO:C	1:A:124:GLY:N	1:A:124:GLY:CA	1:A:124:GLY:C	18	9.5
(1,19)	1:A:30:GLN:C	1:A:31:GLY:N	1:A:31:GLY:CA	1:A:31:GLY:C	17	9.4
(1,111)	1:A:81:VAL:C	1:A:82:GLN:N	1:A:82:GLN:CA	1:A:82:GLN:C	14	9.3
(1,181)	1:A:123:PRO:C	1:A:124:GLY:N	1:A:124:GLY:CA	1:A:124:GLY:C	8	9.1
(1,181)	1:A:123:PRO:C	1:A:124:GLY:N	1:A:124:GLY:CA	1:A:124:GLY:C	14	8.9
(1,143)	1:A:102:PHE:N	1:A:102:PHE:CA	1:A:102:PHE:C	1:A:103:CYS:N	8	8.9
(1,147)	1:A:104:HIS:N	1:A:104:HIS:CA	1:A:104:HIS:C	1:A:105:LEU:N	5	8.8
(1,147)	1:A:104:HIS:N	1:A:104:HIS:CA	1:A:104:HIS:C	1:A:105:LEU:N	11	8.8
(1,218)	1:A:149:LEU:N	1:A:149:LEU:CA	1:A:149:LEU:C	1:A:150:LEU:N	6	8.7

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,147)	1:A:104:HIS:N	1:A:104:HIS:CA	1:A:104:HIS:C	1:A:105:LEU:N	10	8.6
(1,143)	1:A:102:PHE:N	1:A:102:PHE:CA	1:A:102:PHE:C	1:A:103:CYS:N	10	8.6
(1,143)	1:A:102:PHE:N	1:A:102:PHE:CA	1:A:102:PHE:C	1:A:103:CYS:N	14	8.6
(1,181)	1:A:123:PRO:C	1:A:124:GLY:N	1:A:124:GLY:CA	1:A:124:GLY:C	3	8.5
(1,145)	1:A:103:CYS:N	1:A:103:CYS:CA	1:A:103:CYS:C	1:A:104:HIS:N	16	8.5
(1,288)	1:A:195:LEU:N	1:A:195:LEU:CA	1:A:195:LEU:C	1:A:196:GLU:N	7	8.4
(1,19)	1:A:30:GLN:C	1:A:31:GLY:N	1:A:31:GLY:CA	1:A:31:GLY:C	9	8.4
(1,181)	1:A:123:PRO:C	1:A:124:GLY:N	1:A:124:GLY:CA	1:A:124:GLY:C	1	8.2
(1,116)	1:A:84:ASN:N	1:A:84:ASN:CA	1:A:84:ASN:C	1:A:85:LEU:N	12	8.2
(1,2)	1:A:21:LEU:N	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:C	1:A:22:VAL:N	1	8.1
(1,147)	1:A:104:HIS:N	1:A:104:HIS:CA	1:A:104:HIS:C	1:A:105:LEU:N	4	8.1
(1,114)	1:A:83:SER:N	1:A:83:SER:CA	1:A:83:SER:C	1:A:84:ASN:N	9	8.1
(1,143)	1:A:102:PHE:N	1:A:102:PHE:CA	1:A:102:PHE:C	1:A:103:CYS:N	18	8.0
(1,284)	1:A:193:GLN:N	1:A:193:GLN:CA	1:A:193:GLN:C	1:A:194:LYS:N	14	7.9
(1,181)	1:A:123:PRO:C	1:A:124:GLY:N	1:A:124:GLY:CA	1:A:124:GLY:C	15	7.9
(1,147)	1:A:104:HIS:N	1:A:104:HIS:CA	1:A:104:HIS:C	1:A:105:LEU:N	1	7.9
(1,116)	1:A:84:ASN:N	1:A:84:ASN:CA	1:A:84:ASN:C	1:A:85:LEU:N	5	7.9
(1,284)	1:A:193:GLN:N	1:A:193:GLN:CA	1:A:193:GLN:C	1:A:194:LYS:N	16	7.8
(1,19)	1:A:30:GLN:C	1:A:31:GLY:N	1:A:31:GLY:CA	1:A:31:GLY:C	16	7.8
(1,147)	1:A:104:HIS:N	1:A:104:HIS:CA	1:A:104:HIS:C	1:A:105:LEU:N	13	7.8
(1,143)	1:A:102:PHE:N	1:A:102:PHE:CA	1:A:102:PHE:C	1:A:103:CYS:N	6	7.8
(1,116)	1:A:84:ASN:N	1:A:84:ASN:CA	1:A:84:ASN:C	1:A:85:LEU:N	18	7.8
(1,114)	1:A:83:SER:N	1:A:83:SER:CA	1:A:83:SER:C	1:A:84:ASN:N	1	7.7
(1,111)	1:A:81:VAL:C	1:A:82:GLN:N	1:A:82:GLN:CA	1:A:82:GLN:C	11	7.7
(1,111)	1:A:81:VAL:C	1:A:82:GLN:N	1:A:82:GLN:CA	1:A:82:GLN:C	12	7.7
(1,284)	1:A:193:GLN:N	1:A:193:GLN:CA	1:A:193:GLN:C	1:A:194:LYS:N	1	7.6
(1,180)	1:A:123:PRO:N	1:A:123:PRO:CA	1:A:123:PRO:C	1:A:124:GLY:N	10	7.6
(1,181)	1:A:123:PRO:C	1:A:124:GLY:N	1:A:124:GLY:CA	1:A:124:GLY:C	4	7.5
(1,143)	1:A:102:PHE:N	1:A:102:PHE:CA	1:A:102:PHE:C	1:A:103:CYS:N	13	7.5
(1,147)	1:A:104:HIS:N	1:A:104:HIS:CA	1:A:104:HIS:C	1:A:105:LEU:N	3	7.4
(1,147)	1:A:104:HIS:N	1:A:104:HIS:CA	1:A:104:HIS:C	1:A:105:LEU:N	7	7.4
(1,147)	1:A:104:HIS:N	1:A:104:HIS:CA	1:A:104:HIS:C	1:A:105:LEU:N	8	7.4
(1,284)	1:A:193:GLN:N	1:A:193:GLN:CA	1:A:193:GLN:C	1:A:194:LYS:N	2	7.3
(1,284)	1:A:193:GLN:N	1:A:193:GLN:CA	1:A:193:GLN:C	1:A:194:LYS:N	11	7.2
(1,19)	1:A:30:GLN:C	1:A:31:GLY:N	1:A:31:GLY:CA	1:A:31:GLY:C	10	7.2
(1,181)	1:A:123:PRO:C	1:A:124:GLY:N	1:A:124:GLY:CA	1:A:124:GLY:C	9	7.2
(1,147)	1:A:104:HIS:N	1:A:104:HIS:CA	1:A:104:HIS:C	1:A:105:LEU:N	19	7.1
(1,288)	1:A:195:LEU:N	1:A:195:LEU:CA	1:A:195:LEU:C	1:A:196:GLU:N	19	7.0
(1,284)	1:A:193:GLN:N	1:A:193:GLN:CA	1:A:193:GLN:C	1:A:194:LYS:N	13	7.0
(1,19)	1:A:30:GLN:C	1:A:31:GLY:N	1:A:31:GLY:CA	1:A:31:GLY:C	4	7.0
(1,19)	1:A:30:GLN:C	1:A:31:GLY:N	1:A:31:GLY:CA	1:A:31:GLY:C	20	7.0
(1,143)	1:A:102:PHE:N	1:A:102:PHE:CA	1:A:102:PHE:C	1:A:103:CYS:N	7	7.0
(1,194)	1:A:130:GLU:N	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:C	1:A:131:GLY:N	2	6.9
(1,218)	1:A:149:LEU:N	1:A:149:LEU:CA	1:A:149:LEU:C	1:A:150:LEU:N	17	6.8
(1,19)	1:A:30:GLN:C	1:A:31:GLY:N	1:A:31:GLY:CA	1:A:31:GLY:C	1	6.8
(1,19)	1:A:30:GLN:C	1:A:31:GLY:N	1:A:31:GLY:CA	1:A:31:GLY:C	3	6.8
(1,19)	1:A:30:GLN:C	1:A:31:GLY:N	1:A:31:GLY:CA	1:A:31:GLY:C	8	6.8
(1,147)	1:A:104:HIS:N	1:A:104:HIS:CA	1:A:104:HIS:C	1:A:105:LEU:N	6	6.8
(1,147)	1:A:104:HIS:N	1:A:104:HIS:CA	1:A:104:HIS:C	1:A:105:LEU:N	12	6.8
(1,114)	1:A:83:SER:N	1:A:83:SER:CA	1:A:83:SER:C	1:A:84:ASN:N	20	6.8
(1,111)	1:A:81:VAL:C	1:A:82:GLN:N	1:A:82:GLN:CA	1:A:82:GLN:C	7	6.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,143)	1:A:102:PHE:N	1:A:102:PHE:CA	1:A:102:PHE:C	1:A:103:CYS:N	19	6.7
(1,111)	1:A:81:VAL:C	1:A:82:GLN:N	1:A:82:GLN:CA	1:A:82:GLN:C	6	6.7
(1,284)	1:A:193:GLN:N	1:A:193:GLN:CA	1:A:193:GLN:C	1:A:194:LYS:N	7	6.6
(1,283)	1:A:192:GLY:C	1:A:193:GLN:N	1:A:193:GLN:CA	1:A:193:GLN:C	19	6.6
(1,218)	1:A:149:LEU:N	1:A:149:LEU:CA	1:A:149:LEU:C	1:A:150:LEU:N	18	6.6
(1,201)	1:A:134:PRO:C	1:A:135:GLU:N	1:A:135:GLU:CA	1:A:135:GLU:C	19	6.5
(1,198)	1:A:132:PHE:N	1:A:132:PHE:CA	1:A:132:PHE:C	1:A:133:ALA:N	6	6.5
(1,143)	1:A:102:PHE:N	1:A:102:PHE:CA	1:A:102:PHE:C	1:A:103:CYS:N	12	6.5
(1,143)	1:A:102:PHE:N	1:A:102:PHE:CA	1:A:102:PHE:C	1:A:103:CYS:N	15	6.5
(1,116)	1:A:84:ASN:N	1:A:84:ASN:CA	1:A:84:ASN:C	1:A:85:LEU:N	6	6.5
(1,111)	1:A:81:VAL:C	1:A:82:GLN:N	1:A:82:GLN:CA	1:A:82:GLN:C	19	6.5
(1,195)	1:A:130:GLU:C	1:A:131:GLY:N	1:A:131:GLY:CA	1:A:131:GLY:C	19	6.4
(1,188)	1:A:127:PHE:N	1:A:127:PHE:CA	1:A:127:PHE:C	1:A:128:ILE:N	2	6.4
(1,142)	1:A:101:ILE:C	1:A:102:PHE:N	1:A:102:PHE:CA	1:A:102:PHE:C	9	6.4
(1,142)	1:A:101:ILE:C	1:A:102:PHE:N	1:A:102:PHE:CA	1:A:102:PHE:C	20	6.4
(1,196)	1:A:131:GLY:N	1:A:131:GLY:CA	1:A:131:GLY:C	1:A:132:PHE:N	19	6.3
(1,143)	1:A:102:PHE:N	1:A:102:PHE:CA	1:A:102:PHE:C	1:A:103:CYS:N	17	6.3
(1,284)	1:A:193:GLN:N	1:A:193:GLN:CA	1:A:193:GLN:C	1:A:194:LYS:N	19	6.2
(1,19)	1:A:30:GLN:C	1:A:31:GLY:N	1:A:31:GLY:CA	1:A:31:GLY:C	13	6.2
(1,181)	1:A:123:PRO:C	1:A:124:GLY:N	1:A:124:GLY:CA	1:A:124:GLY:C	11	6.2
(1,19)	1:A:30:GLN:C	1:A:31:GLY:N	1:A:31:GLY:CA	1:A:31:GLY:C	11	6.1
(1,19)	1:A:30:GLN:C	1:A:31:GLY:N	1:A:31:GLY:CA	1:A:31:GLY:C	12	6.1
(1,173)	1:A:118:TYR:N	1:A:118:TYR:CA	1:A:118:TYR:C	1:A:119:GLN:N	2	6.1
(1,284)	1:A:193:GLN:N	1:A:193:GLN:CA	1:A:193:GLN:C	1:A:194:LYS:N	12	6.0
(1,194)	1:A:130:GLU:N	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:C	1:A:131:GLY:N	13	6.0
(1,147)	1:A:104:HIS:N	1:A:104:HIS:CA	1:A:104:HIS:C	1:A:105:LEU:N	17	6.0
(1,114)	1:A:83:SER:N	1:A:83:SER:CA	1:A:83:SER:C	1:A:84:ASN:N	10	6.0
(1,268)	1:A:185:ALA:N	1:A:185:ALA:CA	1:A:185:ALA:C	1:A:186:ALA:N	18	5.9
(1,212)	1:A:141:THR:N	1:A:141:THR:CA	1:A:141:THR:C	1:A:142:GLY:N	5	5.9
(1,118)	1:A:85:LEU:N	1:A:85:LEU:CA	1:A:85:LEU:C	1:A:86:ALA:N	1	5.9
(1,218)	1:A:149:LEU:N	1:A:149:LEU:CA	1:A:149:LEU:C	1:A:150:LEU:N	8	5.8
(1,211)	1:A:140:ASN:C	1:A:141:THR:N	1:A:141:THR:CA	1:A:141:THR:C	9	5.8
(1,194)	1:A:130:GLU:N	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:C	1:A:131:GLY:N	10	5.8
(1,181)	1:A:123:PRO:C	1:A:124:GLY:N	1:A:124:GLY:CA	1:A:124:GLY:C	5	5.8
(1,147)	1:A:104:HIS:N	1:A:104:HIS:CA	1:A:104:HIS:C	1:A:105:LEU:N	20	5.8
(1,194)	1:A:130:GLU:N	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:C	1:A:131:GLY:N	15	5.7
(1,181)	1:A:123:PRO:C	1:A:124:GLY:N	1:A:124:GLY:CA	1:A:124:GLY:C	16	5.6
(1,145)	1:A:103:CYS:N	1:A:103:CYS:CA	1:A:103:CYS:C	1:A:104:HIS:N	2	5.6
(1,116)	1:A:84:ASN:N	1:A:84:ASN:CA	1:A:84:ASN:C	1:A:85:LEU:N	16	5.6
(1,115)	1:A:83:SER:C	1:A:84:ASN:N	1:A:84:ASN:CA	1:A:84:ASN:C	8	5.6
(1,285)	1:A:193:GLN:C	1:A:194:LYS:N	1:A:194:LYS:CA	1:A:194:LYS:C	13	5.5
(1,194)	1:A:130:GLU:N	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:C	1:A:131:GLY:N	1	5.5
(1,194)	1:A:130:GLU:N	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:C	1:A:131:GLY:N	3	5.5
(1,18)	1:A:30:GLN:N	1:A:30:GLN:CA	1:A:30:GLN:C	1:A:31:GLY:N	2	5.5
(1,106)	1:A:79:THR:N	1:A:79:THR:CA	1:A:79:THR:C	1:A:80:THR:N	11	5.5
(1,213)	1:A:142:GLY:C	1:A:143:GLY:N	1:A:143:GLY:CA	1:A:143:GLY:C	9	5.4
(1,2)	1:A:21:LEU:N	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:C	1:A:22:VAL:N	17	5.4
(1,19)	1:A:30:GLN:C	1:A:31:GLY:N	1:A:31:GLY:CA	1:A:31:GLY:C	19	5.4
(1,137)	1:A:99:VAL:N	1:A:99:VAL:CA	1:A:99:VAL:C	1:A:100:SER:N	17	5.4
(1,62)	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	1:A:58:ASP:N	20	5.3
(1,147)	1:A:104:HIS:N	1:A:104:HIS:CA	1:A:104:HIS:C	1:A:105:LEU:N	18	5.3

Continued on next page...



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,143)	1:A:102:PHE:N	1:A:102:PHE:CA	1:A:102:PHE:C	1:A:103:CYS:N	4	5.3
(1,288)	1:A:195:LEU:N	1:A:195:LEU:CA	1:A:195:LEU:C	1:A:196:GLU:N	4	5.2
(1,2)	1:A:21:LEU:N	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:C	1:A:22:VAL:N	12	5.2
(1,194)	1:A:130:GLU:N	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:C	1:A:131:GLY:N	4	5.2
(1,181)	1:A:123:PRO:C	1:A:124:GLY:N	1:A:124:GLY:CA	1:A:124:GLY:C	12	5.2
(1,173)	1:A:118:TYR:N	1:A:118:TYR:CA	1:A:118:TYR:C	1:A:119:GLN:N	8	5.2
(1,171)	1:A:117:VAL:N	1:A:117:VAL:CA	1:A:117:VAL:C	1:A:118:TYR:N	2	5.2
(1,114)	1:A:83:SER:N	1:A:83:SER:CA	1:A:83:SER:C	1:A:84:ASN:N	8	5.2
(1,3)	1:A:21:LEU:C	1:A:22:VAL:N	1:A:22:VAL:CA	1:A:22:VAL:C	16	5.1
(1,20)	1:A:31:GLY:N	1:A:31:GLY:CA	1:A:31:GLY:C	1:A:32:LYS:N	2	5.1
(1,2)	1:A:21:LEU:N	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:C	1:A:22:VAL:N	7	5.1
(1,198)	1:A:132:PHE:N	1:A:132:PHE:CA	1:A:132:PHE:C	1:A:133:ALA:N	8	5.1
(1,198)	1:A:132:PHE:N	1:A:132:PHE:CA	1:A:132:PHE:C	1:A:133:ALA:N	17	5.1
(1,194)	1:A:130:GLU:N	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:C	1:A:131:GLY:N	5	5.1
(1,19)	1:A:30:GLN:C	1:A:31:GLY:N	1:A:31:GLY:CA	1:A:31:GLY:C	5	5.1
(1,181)	1:A:123:PRO:C	1:A:124:GLY:N	1:A:124:GLY:CA	1:A:124:GLY:C	7	5.1
(1,142)	1:A:101:ILE:C	1:A:102:PHE:N	1:A:102:PHE:CA	1:A:102:PHE:C	19	5.1
(1,268)	1:A:185:ALA:N	1:A:185:ALA:CA	1:A:185:ALA:C	1:A:186:ALA:N	20	5.0
(1,22)	1:A:32:LYS:N	1:A:32:LYS:CA	1:A:32:LYS:C	1:A:33:ILE:N	1	5.0
(1,188)	1:A:127:PHE:N	1:A:127:PHE:CA	1:A:127:PHE:C	1:A:128:ILE:N	13	5.0
(1,185)	1:A:125:GLY:C	1:A:126:VAL:N	1:A:126:VAL:CA	1:A:126:VAL:C	7	5.0
(1,111)	1:A:81:VAL:C	1:A:82:GLN:N	1:A:82:GLN:CA	1:A:82:GLN:C	4	5.0
(1,260)	1:A:173:ARG:N	1:A:173:ARG:CA	1:A:173:ARG:C	1:A:174:ASN:N	19	4.9
(1,180)	1:A:123:PRO:N	1:A:123:PRO:CA	1:A:123:PRO:C	1:A:124:GLY:N	19	4.9
(1,270)	1:A:186:ALA:N	1:A:186:ALA:CA	1:A:186:ALA:C	1:A:187:LEU:N	12	4.8
(1,268)	1:A:185:ALA:N	1:A:185:ALA:CA	1:A:185:ALA:C	1:A:186:ALA:N	2	4.8
(1,171)	1:A:117:VAL:N	1:A:117:VAL:CA	1:A:117:VAL:C	1:A:118:TYR:N	5	4.8
(1,142)	1:A:101:ILE:C	1:A:102:PHE:N	1:A:102:PHE:CA	1:A:102:PHE:C	2	4.8
(1,139)	1:A:100:SER:N	1:A:100:SER:CA	1:A:100:SER:C	1:A:101:ILE:N	11	4.8
(1,118)	1:A:85:LEU:N	1:A:85:LEU:CA	1:A:85:LEU:C	1:A:86:ALA:N	3	4.8
(1,285)	1:A:193:GLN:C	1:A:194:LYS:N	1:A:194:LYS:CA	1:A:194:LYS:C	11	4.7
(1,284)	1:A:193:GLN:N	1:A:193:GLN:CA	1:A:193:GLN:C	1:A:194:LYS:N	4	4.7
(1,268)	1:A:185:ALA:N	1:A:185:ALA:CA	1:A:185:ALA:C	1:A:186:ALA:N	13	4.7
(1,258)	1:A:172:GLU:N	1:A:172:GLU:CA	1:A:172:GLU:C	1:A:173:ARG:N	17	4.7
(1,188)	1:A:127:PHE:N	1:A:127:PHE:CA	1:A:127:PHE:C	1:A:128:ILE:N	8	4.7
(1,181)	1:A:123:PRO:C	1:A:124:GLY:N	1:A:124:GLY:CA	1:A:124:GLY:C	20	4.7
(1,173)	1:A:118:TYR:N	1:A:118:TYR:CA	1:A:118:TYR:C	1:A:119:GLN:N	5	4.7
(1,143)	1:A:102:PHE:N	1:A:102:PHE:CA	1:A:102:PHE:C	1:A:103:CYS:N	2	4.7
(1,119)	1:A:85:LEU:C	1:A:86:ALA:N	1:A:86:ALA:CA	1:A:86:ALA:C	12	4.7
(1,106)	1:A:79:THR:N	1:A:79:THR:CA	1:A:79:THR:C	1:A:80:THR:N	12	4.7
(1,285)	1:A:193:GLN:C	1:A:194:LYS:N	1:A:194:LYS:CA	1:A:194:LYS:C	4	4.6
(1,239)	1:A:162:SER:C	1:A:163:LEU:N	1:A:163:LEU:CA	1:A:163:LEU:C	17	4.6
(1,212)	1:A:141:THR:N	1:A:141:THR:CA	1:A:141:THR:C	1:A:142:GLY:N	11	4.6
(1,19)	1:A:30:GLN:C	1:A:31:GLY:N	1:A:31:GLY:CA	1:A:31:GLY:C	15	4.6
(1,123)	1:A:88:PHE:C	1:A:89:ASP:N	1:A:89:ASP:CA	1:A:89:ASP:C	17	4.6
(1,115)	1:A:83:SER:C	1:A:84:ASN:N	1:A:84:ASN:CA	1:A:84:ASN:C	14	4.6
(1,173)	1:A:118:TYR:N	1:A:118:TYR:CA	1:A:118:TYR:C	1:A:119:GLN:N	1	4.5
(1,156)	1:A:109:LEU:N	1:A:109:LEU:CA	1:A:109:LEU:C	1:A:110:ARG:N	18	4.5
(1,143)	1:A:102:PHE:N	1:A:102:PHE:CA	1:A:102:PHE:C	1:A:103:CYS:N	5	4.5
(1,142)	1:A:101:ILE:C	1:A:102:PHE:N	1:A:102:PHE:CA	1:A:102:PHE:C	13	4.4
(1,106)	1:A:79:THR:N	1:A:79:THR:CA	1:A:79:THR:C	1:A:80:THR:N	4	4.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,106)	1:A:79:THR:N	1:A:79:THR:CA	1:A:79:THR:C	1:A:80:THR:N	20	4.4
(1,54)	1:A:53:GLU:N	1:A:53:GLU:CA	1:A:53:GLU:C	1:A:54:VAL:N	18	4.3
(1,28)	1:A:35:CYS:N	1:A:35:CYS:CA	1:A:35:CYS:C	1:A:36:LEU:N	5	4.3
(1,22)	1:A:32:LYS:N	1:A:32:LYS:CA	1:A:32:LYS:C	1:A:33:ILE:N	2	4.3
(1,147)	1:A:104:HIS:N	1:A:104:HIS:CA	1:A:104:HIS:C	1:A:105:LEU:N	9	4.3
(1,147)	1:A:104:HIS:N	1:A:104:HIS:CA	1:A:104:HIS:C	1:A:105:LEU:N	16	4.3
(1,142)	1:A:101:ILE:C	1:A:102:PHE:N	1:A:102:PHE:CA	1:A:102:PHE:C	5	4.3
(1,202)	1:A:135:GLU:N	1:A:135:GLU:CA	1:A:135:GLU:C	1:A:136:GLN:N	19	4.2
(1,19)	1:A:30:GLN:C	1:A:31:GLY:N	1:A:31:GLY:CA	1:A:31:GLY:C	7	4.2
(1,19)	1:A:30:GLN:C	1:A:31:GLY:N	1:A:31:GLY:CA	1:A:31:GLY:C	18	4.2
(1,145)	1:A:103:CYS:N	1:A:103:CYS:CA	1:A:103:CYS:C	1:A:104:HIS:N	10	4.2
(1,142)	1:A:101:ILE:C	1:A:102:PHE:N	1:A:102:PHE:CA	1:A:102:PHE:C	14	4.2
(1,115)	1:A:83:SER:C	1:A:84:ASN:N	1:A:84:ASN:CA	1:A:84:ASN:C	9	4.2
(1,285)	1:A:193:GLN:C	1:A:194:LYS:N	1:A:194:LYS:CA	1:A:194:LYS:C	1	4.1
(1,274)	1:A:188:ILE:N	1:A:188:ILE:CA	1:A:188:ILE:C	1:A:189:GLN:N	2	4.1
(1,270)	1:A:186:ALA:N	1:A:186:ALA:CA	1:A:186:ALA:C	1:A:187:LEU:N	8	4.1
(1,181)	1:A:123:PRO:C	1:A:124:GLY:N	1:A:124:GLY:CA	1:A:124:GLY:C	2	4.1
(1,156)	1:A:109:LEU:N	1:A:109:LEU:CA	1:A:109:LEU:C	1:A:110:ARG:N	15	4.1
(1,114)	1:A:83:SER:N	1:A:83:SER:CA	1:A:83:SER:C	1:A:84:ASN:N	14	4.1
(1,106)	1:A:79:THR:N	1:A:79:THR:CA	1:A:79:THR:C	1:A:80:THR:N	5	4.1
(1,106)	1:A:79:THR:N	1:A:79:THR:CA	1:A:79:THR:C	1:A:80:THR:N	7	4.1
(1,285)	1:A:193:GLN:C	1:A:194:LYS:N	1:A:194:LYS:CA	1:A:194:LYS:C	14	4.0
(1,285)	1:A:193:GLN:C	1:A:194:LYS:N	1:A:194:LYS:CA	1:A:194:LYS:C	18	4.0
(1,283)	1:A:192:GLY:C	1:A:193:GLN:N	1:A:193:GLN:CA	1:A:193:GLN:C	20	4.0
(1,268)	1:A:185:ALA:N	1:A:185:ALA:CA	1:A:185:ALA:C	1:A:186:ALA:N	15	4.0
(1,266)	1:A:184:LYS:N	1:A:184:LYS:CA	1:A:184:LYS:C	1:A:185:ALA:N	17	4.0
(1,198)	1:A:132:PHE:N	1:A:132:PHE:CA	1:A:132:PHE:C	1:A:133:ALA:N	16	4.0
(1,169)	1:A:116:LYS:N	1:A:116:LYS:CA	1:A:116:LYS:C	1:A:117:VAL:N	16	4.0
(1,106)	1:A:79:THR:N	1:A:79:THR:CA	1:A:79:THR:C	1:A:80:THR:N	19	4.0
(1,274)	1:A:188:ILE:N	1:A:188:ILE:CA	1:A:188:ILE:C	1:A:189:GLN:N	5	3.9
(1,268)	1:A:185:ALA:N	1:A:185:ALA:CA	1:A:185:ALA:C	1:A:186:ALA:N	10	3.9
(1,264)	1:A:175:LEU:N	1:A:175:LEU:CA	1:A:175:LEU:C	1:A:176:ASP:N	8	3.9
(1,211)	1:A:140:ASN:C	1:A:141:THR:N	1:A:141:THR:CA	1:A:141:THR:C	15	3.9
(1,189)	1:A:127:PHE:C	1:A:128:ILE:N	1:A:128:ILE:CA	1:A:128:ILE:C	5	3.9
(1,18)	1:A:30:GLN:N	1:A:30:GLN:CA	1:A:30:GLN:C	1:A:31:GLY:N	7	3.9
(1,147)	1:A:104:HIS:N	1:A:104:HIS:CA	1:A:104:HIS:C	1:A:105:LEU:N	14	3.9
(1,147)	1:A:104:HIS:N	1:A:104:HIS:CA	1:A:104:HIS:C	1:A:105:LEU:N	15	3.9
(1,127)	1:A:92:ALA:N	1:A:92:ALA:CA	1:A:92:ALA:C	1:A:93:ASP:N	2	3.9
(1,122)	1:A:88:PHE:N	1:A:88:PHE:CA	1:A:88:PHE:C	1:A:89:ASP:N	12	3.9
(1,274)	1:A:188:ILE:N	1:A:188:ILE:CA	1:A:188:ILE:C	1:A:189:GLN:N	4	3.8
(1,264)	1:A:175:LEU:N	1:A:175:LEU:CA	1:A:175:LEU:C	1:A:176:ASP:N	11	3.8
(1,18)	1:A:30:GLN:N	1:A:30:GLN:CA	1:A:30:GLN:C	1:A:31:GLY:N	9	3.8
(1,170)	1:A:116:LYS:C	1:A:117:VAL:N	1:A:117:VAL:CA	1:A:117:VAL:C	8	3.8
(1,285)	1:A:193:GLN:C	1:A:194:LYS:N	1:A:194:LYS:CA	1:A:194:LYS:C	16	3.7
(1,283)	1:A:192:GLY:C	1:A:193:GLN:N	1:A:193:GLN:CA	1:A:193:GLN:C	1	3.7
(1,274)	1:A:188:ILE:N	1:A:188:ILE:CA	1:A:188:ILE:C	1:A:189:GLN:N	17	3.7
(1,260)	1:A:173:ARG:N	1:A:173:ARG:CA	1:A:173:ARG:C	1:A:174:ASN:N	13	3.7
(1,258)	1:A:172:GLU:N	1:A:172:GLU:CA	1:A:172:GLU:C	1:A:173:ARG:N	2	3.7
(1,194)	1:A:130:GLU:N	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:C	1:A:131:GLY:N	11	3.7
(1,127)	1:A:92:ALA:N	1:A:92:ALA:CA	1:A:92:ALA:C	1:A:93:ASP:N	16	3.7
(1,54)	1:A:53:GLU:N	1:A:53:GLU:CA	1:A:53:GLU:C	1:A:54:VAL:N	5	3.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,268)	1:A:185:ALA:N	1:A:185:ALA:CA	1:A:185:ALA:C	1:A:186:ALA:N	17	3.6
(1,258)	1:A:172:GLU:N	1:A:172:GLU:CA	1:A:172:GLU:C	1:A:173:ARG:N	18	3.6
(1,189)	1:A:127:PHE:C	1:A:128:ILE:N	1:A:128:ILE:CA	1:A:128:ILE:C	1	3.6
(1,112)	1:A:82:GLN:N	1:A:82:GLN:CA	1:A:82:GLN:C	1:A:83:SER:N	20	3.6
(1,111)	1:A:81:VAL:C	1:A:82:GLN:N	1:A:82:GLN:CA	1:A:82:GLN:C	13	3.6
(1,62)	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	1:A:58:ASP:N	3	3.5
(1,62)	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	1:A:58:ASP:N	9	3.5
(1,54)	1:A:53:GLU:N	1:A:53:GLU:CA	1:A:53:GLU:C	1:A:54:VAL:N	8	3.5
(1,274)	1:A:188:ILE:N	1:A:188:ILE:CA	1:A:188:ILE:C	1:A:189:GLN:N	11	3.5
(1,206)	1:A:137:LEU:N	1:A:137:LEU:CA	1:A:137:LEU:C	1:A:138:GLN:N	9	3.5
(1,174)	1:A:118:TYR:C	1:A:119:GLN:N	1:A:119:GLN:CA	1:A:119:GLN:C	10	3.5
(1,171)	1:A:117:VAL:N	1:A:117:VAL:CA	1:A:117:VAL:C	1:A:118:TYR:N	13	3.5
(1,115)	1:A:83:SER:C	1:A:84:ASN:N	1:A:84:ASN:CA	1:A:84:ASN:C	11	3.5
(1,111)	1:A:81:VAL:C	1:A:82:GLN:N	1:A:82:GLN:CA	1:A:82:GLN:C	15	3.5
(1,106)	1:A:79:THR:N	1:A:79:THR:CA	1:A:79:THR:C	1:A:80:THR:N	6	3.5
(1,106)	1:A:79:THR:N	1:A:79:THR:CA	1:A:79:THR:C	1:A:80:THR:N	15	3.5
(1,57)	1:A:54:VAL:C	1:A:55:THR:N	1:A:55:THR:CA	1:A:55:THR:C	12	3.4
(1,288)	1:A:195:LEU:N	1:A:195:LEU:CA	1:A:195:LEU:C	1:A:196:GLU:N	10	3.4
(1,284)	1:A:193:GLN:N	1:A:193:GLN:CA	1:A:193:GLN:C	1:A:194:LYS:N	8	3.4
(1,283)	1:A:192:GLY:C	1:A:193:GLN:N	1:A:193:GLN:CA	1:A:193:GLN:C	2	3.4
(1,28)	1:A:35:CYS:N	1:A:35:CYS:CA	1:A:35:CYS:C	1:A:36:LEU:N	17	3.4
(1,260)	1:A:173:ARG:N	1:A:173:ARG:CA	1:A:173:ARG:C	1:A:174:ASN:N	3	3.4
(1,2)	1:A:21:LEU:N	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:C	1:A:22:VAL:N	13	3.4
(1,182)	1:A:124:GLY:N	1:A:124:GLY:CA	1:A:124:GLY:C	1:A:125:GLY:N	10	3.4
(1,182)	1:A:124:GLY:N	1:A:124:GLY:CA	1:A:124:GLY:C	1:A:125:GLY:N	16	3.4
(1,18)	1:A:30:GLN:N	1:A:30:GLN:CA	1:A:30:GLN:C	1:A:31:GLY:N	4	3.4
(1,126)	1:A:91:VAL:C	1:A:92:ALA:N	1:A:92:ALA:CA	1:A:92:ALA:C	20	3.4
(1,111)	1:A:81:VAL:C	1:A:82:GLN:N	1:A:82:GLN:CA	1:A:82:GLN:C	16	3.4
(1,3)	1:A:21:LEU:C	1:A:22:VAL:N	1:A:22:VAL:CA	1:A:22:VAL:C	13	3.3
(1,262)	1:A:174:ASN:N	1:A:174:ASN:CA	1:A:174:ASN:C	1:A:175:LEU:N	10	3.3
(1,260)	1:A:173:ARG:N	1:A:173:ARG:CA	1:A:173:ARG:C	1:A:174:ASN:N	2	3.3
(1,198)	1:A:132:PHE:N	1:A:132:PHE:CA	1:A:132:PHE:C	1:A:133:ALA:N	20	3.3
(1,139)	1:A:100:SER:N	1:A:100:SER:CA	1:A:100:SER:C	1:A:101:ILE:N	8	3.3
(1,118)	1:A:85:LEU:N	1:A:85:LEU:CA	1:A:85:LEU:C	1:A:86:ALA:N	9	3.3
(1,115)	1:A:83:SER:C	1:A:84:ASN:N	1:A:84:ASN:CA	1:A:84:ASN:C	2	3.3
(1,22)	1:A:32:LYS:N	1:A:32:LYS:CA	1:A:32:LYS:C	1:A:33:ILE:N	8	3.2
(1,19)	1:A:30:GLN:C	1:A:31:GLY:N	1:A:31:GLY:CA	1:A:31:GLY:C	6	3.2
(1,189)	1:A:127:PHE:C	1:A:128:ILE:N	1:A:128:ILE:CA	1:A:128:ILE:C	12	3.2
(1,185)	1:A:125:GLY:C	1:A:126:VAL:N	1:A:126:VAL:CA	1:A:126:VAL:C	12	3.2
(1,18)	1:A:30:GLN:N	1:A:30:GLN:CA	1:A:30:GLN:C	1:A:31:GLY:N	3	3.2
(1,106)	1:A:79:THR:N	1:A:79:THR:CA	1:A:79:THR:C	1:A:80:THR:N	16	3.2
(1,264)	1:A:175:LEU:N	1:A:175:LEU:CA	1:A:175:LEU:C	1:A:176:ASP:N	4	3.1
(1,264)	1:A:175:LEU:N	1:A:175:LEU:CA	1:A:175:LEU:C	1:A:176:ASP:N	20	3.1
(1,237)	1:A:161:PRO:C	1:A:162:SER:N	1:A:162:SER:CA	1:A:162:SER:C	6	3.1
(1,22)	1:A:32:LYS:N	1:A:32:LYS:CA	1:A:32:LYS:C	1:A:33:ILE:N	12	3.1
(1,194)	1:A:130:GLU:N	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:C	1:A:131:GLY:N	17	3.1
(1,193)	1:A:129:LEU:C	1:A:130:GLU:N	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:C	19	3.1
(1,179)	1:A:122:LYS:N	1:A:122:LYS:CA	1:A:122:LYS:C	1:A:123:PRO:N	6	3.1
(1,106)	1:A:79:THR:N	1:A:79:THR:CA	1:A:79:THR:C	1:A:80:THR:N	14	3.1
(1,57)	1:A:54:VAL:C	1:A:55:THR:N	1:A:55:THR:CA	1:A:55:THR:C	18	3.0
(1,284)	1:A:193:GLN:N	1:A:193:GLN:CA	1:A:193:GLN:C	1:A:194:LYS:N	20	3.0

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,268)	1:A:185:ALA:N	1:A:185:ALA:CA	1:A:185:ALA:C	1:A:186:ALA:N	3	3.0
(1,190)	1:A:128:ILE:N	1:A:128:ILE:CA	1:A:128:ILE:C	1:A:129:LEU:N	14	3.0
(1,180)	1:A:123:PRO:N	1:A:123:PRO:CA	1:A:123:PRO:C	1:A:124:GLY:N	2	3.0
(1,173)	1:A:118:TYR:N	1:A:118:TYR:CA	1:A:118:TYR:C	1:A:119:GLN:N	15	3.0
(1,137)	1:A:99:VAL:N	1:A:99:VAL:CA	1:A:99:VAL:C	1:A:100:SER:N	6	3.0
(1,106)	1:A:79:THR:N	1:A:79:THR:CA	1:A:79:THR:C	1:A:80:THR:N	8	3.0
(1,54)	1:A:53:GLU:N	1:A:53:GLU:CA	1:A:53:GLU:C	1:A:54:VAL:N	6	2.9
(1,46)	1:A:49:SER:N	1:A:49:SER:CA	1:A:49:SER:C	1:A:50:LEU:N	11	2.9
(1,285)	1:A:193:GLN:C	1:A:194:LYS:N	1:A:194:LYS:CA	1:A:194:LYS:C	12	2.9
(1,285)	1:A:193:GLN:C	1:A:194:LYS:N	1:A:194:LYS:CA	1:A:194:LYS:C	17	2.9
(1,274)	1:A:188:ILE:N	1:A:188:ILE:CA	1:A:188:ILE:C	1:A:189:GLN:N	16	2.9
(1,264)	1:A:175:LEU:N	1:A:175:LEU:CA	1:A:175:LEU:C	1:A:176:ASP:N	2	2.9
(1,258)	1:A:172:GLU:N	1:A:172:GLU:CA	1:A:172:GLU:C	1:A:173:ARG:N	19	2.9
(1,20)	1:A:31:GLY:N	1:A:31:GLY:CA	1:A:31:GLY:C	1:A:32:LYS:N	5	2.9
(1,186)	1:A:126:VAL:N	1:A:126:VAL:CA	1:A:126:VAL:C	1:A:127:PHE:N	13	2.9
(1,142)	1:A:101:ILE:C	1:A:102:PHE:N	1:A:102:PHE:CA	1:A:102:PHE:C	11	2.9
(1,117)	1:A:84:ASN:C	1:A:85:LEU:N	1:A:85:LEU:CA	1:A:85:LEU:C	17	2.9
(1,62)	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	1:A:58:ASP:N	13	2.8
(1,6)	1:A:23:SER:N	1:A:23:SER:CA	1:A:23:SER:C	1:A:24:VAL:N	3	2.8
(1,283)	1:A:192:GLY:C	1:A:193:GLN:N	1:A:193:GLN:CA	1:A:193:GLN:C	16	2.8
(1,234)	1:A:159:GLU:N	1:A:159:GLU:CA	1:A:159:GLU:C	1:A:160:LEU:N	11	2.8
(1,226)	1:A:155:THR:N	1:A:155:THR:CA	1:A:155:THR:C	1:A:156:LEU:N	13	2.8
(1,22)	1:A:32:LYS:N	1:A:32:LYS:CA	1:A:32:LYS:C	1:A:33:ILE:N	6	2.8
(1,22)	1:A:32:LYS:N	1:A:32:LYS:CA	1:A:32:LYS:C	1:A:33:ILE:N	17	2.8
(1,188)	1:A:127:PHE:N	1:A:127:PHE:CA	1:A:127:PHE:C	1:A:128:ILE:N	14	2.8
(1,186)	1:A:126:VAL:N	1:A:126:VAL:CA	1:A:126:VAL:C	1:A:127:PHE:N	7	2.8
(1,186)	1:A:126:VAL:N	1:A:126:VAL:CA	1:A:126:VAL:C	1:A:127:PHE:N	19	2.8
(1,182)	1:A:124:GLY:N	1:A:124:GLY:CA	1:A:124:GLY:C	1:A:125:GLY:N	12	2.8
(1,170)	1:A:116:LYS:C	1:A:117:VAL:N	1:A:117:VAL:CA	1:A:117:VAL:C	2	2.8
(1,145)	1:A:103:CYS:N	1:A:103:CYS:CA	1:A:103:CYS:C	1:A:104:HIS:N	8	2.8
(1,145)	1:A:103:CYS:N	1:A:103:CYS:CA	1:A:103:CYS:C	1:A:104:HIS:N	11	2.8
(1,137)	1:A:99:VAL:N	1:A:99:VAL:CA	1:A:99:VAL:C	1:A:100:SER:N	11	2.8
(1,106)	1:A:79:THR:N	1:A:79:THR:CA	1:A:79:THR:C	1:A:80:THR:N	9	2.8
(1,54)	1:A:53:GLU:N	1:A:53:GLU:CA	1:A:53:GLU:C	1:A:54:VAL:N	15	2.7
(1,281)	1:A:191:LEU:C	1:A:192:GLY:N	1:A:192:GLY:CA	1:A:192:GLY:C	17	2.7
(1,268)	1:A:185:ALA:N	1:A:185:ALA:CA	1:A:185:ALA:C	1:A:186:ALA:N	16	2.7
(1,264)	1:A:175:LEU:N	1:A:175:LEU:CA	1:A:175:LEU:C	1:A:176:ASP:N	16	2.7
(1,23)	1:A:32:LYS:C	1:A:33:ILE:N	1:A:33:ILE:CA	1:A:33:ILE:C	4	2.7
(1,205)	1:A:136:GLN:C	1:A:137:LEU:N	1:A:137:LEU:CA	1:A:137:LEU:C	20	2.7
(1,194)	1:A:130:GLU:N	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:C	1:A:131:GLY:N	8	2.7
(1,190)	1:A:128:ILE:N	1:A:128:ILE:CA	1:A:128:ILE:C	1:A:129:LEU:N	2	2.7
(1,185)	1:A:125:GLY:C	1:A:126:VAL:N	1:A:126:VAL:CA	1:A:126:VAL:C	6	2.7
(1,173)	1:A:118:TYR:N	1:A:118:TYR:CA	1:A:118:TYR:C	1:A:119:GLN:N	14	2.7
(1,142)	1:A:101:ILE:C	1:A:102:PHE:N	1:A:102:PHE:CA	1:A:102:PHE:C	6	2.7
(1,142)	1:A:101:ILE:C	1:A:102:PHE:N	1:A:102:PHE:CA	1:A:102:PHE:C	8	2.7
(1,127)	1:A:92:ALA:N	1:A:92:ALA:CA	1:A:92:ALA:C	1:A:93:ASP:N	7	2.7
(1,118)	1:A:85:LEU:N	1:A:85:LEU:CA	1:A:85:LEU:C	1:A:86:ALA:N	12	2.7
(1,116)	1:A:84:ASN:N	1:A:84:ASN:CA	1:A:84:ASN:C	1:A:85:LEU:N	17	2.7
(1,109)	1:A:80:THR:C	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	18	2.7
(1,107)	1:A:79:THR:C	1:A:80:THR:N	1:A:80:THR:CA	1:A:80:THR:C	17	2.7
(1,69)	1:A:60:SER:C	1:A:61:SER:N	1:A:61:SER:CA	1:A:61:SER:C	8	2.6

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,54)	1:A:53:GLU:N	1:A:53:GLU:CA	1:A:53:GLU:C	1:A:54:VAL:N	11	2.6
(1,283)	1:A:192:GLY:C	1:A:193:GLN:N	1:A:193:GLN:CA	1:A:193:GLN:C	12	2.6
(1,268)	1:A:185:ALA:N	1:A:185:ALA:CA	1:A:185:ALA:C	1:A:186:ALA:N	1	2.6
(1,268)	1:A:185:ALA:N	1:A:185:ALA:CA	1:A:185:ALA:C	1:A:186:ALA:N	4	2.6
(1,24)	1:A:33:ILE:N	1:A:33:ILE:CA	1:A:33:ILE:C	1:A:34:LEU:N	17	2.6
(1,237)	1:A:161:PRO:C	1:A:162:SER:N	1:A:162:SER:CA	1:A:162:SER:C	12	2.6
(1,186)	1:A:126:VAL:N	1:A:126:VAL:CA	1:A:126:VAL:C	1:A:127:PHE:N	14	2.6
(1,185)	1:A:125:GLY:C	1:A:126:VAL:N	1:A:126:VAL:CA	1:A:126:VAL:C	17	2.6
(1,182)	1:A:124:GLY:N	1:A:124:GLY:CA	1:A:124:GLY:C	1:A:125:GLY:N	4	2.6
(1,18)	1:A:30:GLN:N	1:A:30:GLN:CA	1:A:30:GLN:C	1:A:31:GLY:N	10	2.6
(1,175)	1:A:119:GLN:N	1:A:119:GLN:CA	1:A:119:GLN:C	1:A:120:GLY:N	5	2.6
(1,171)	1:A:117:VAL:N	1:A:117:VAL:CA	1:A:117:VAL:C	1:A:118:TYR:N	8	2.6
(1,115)	1:A:83:SER:C	1:A:84:ASN:N	1:A:84:ASN:CA	1:A:84:ASN:C	5	2.6
(1,111)	1:A:81:VAL:C	1:A:82:GLN:N	1:A:82:GLN:CA	1:A:82:GLN:C	2	2.6
(1,106)	1:A:79:THR:N	1:A:79:THR:CA	1:A:79:THR:C	1:A:80:THR:N	10	2.6
(1,57)	1:A:54:VAL:C	1:A:55:THR:N	1:A:55:THR:CA	1:A:55:THR:C	7	2.5
(1,46)	1:A:49:SER:N	1:A:49:SER:CA	1:A:49:SER:C	1:A:50:LEU:N	17	2.5
(1,239)	1:A:162:SER:C	1:A:163:LEU:N	1:A:163:LEU:CA	1:A:163:LEU:C	14	2.5
(1,211)	1:A:140:ASN:C	1:A:141:THR:N	1:A:141:THR:CA	1:A:141:THR:C	3	2.5
(1,211)	1:A:140:ASN:C	1:A:141:THR:N	1:A:141:THR:CA	1:A:141:THR:C	20	2.5
(1,206)	1:A:137:LEU:N	1:A:137:LEU:CA	1:A:137:LEU:C	1:A:138:GLN:N	7	2.5
(1,194)	1:A:130:GLU:N	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:C	1:A:131:GLY:N	6	2.5
(1,142)	1:A:101:ILE:C	1:A:102:PHE:N	1:A:102:PHE:CA	1:A:102:PHE:C	17	2.5
(1,115)	1:A:83:SER:C	1:A:84:ASN:N	1:A:84:ASN:CA	1:A:84:ASN:C	1	2.5
(1,6)	1:A:23:SER:N	1:A:23:SER:CA	1:A:23:SER:C	1:A:24:VAL:N	17	2.4
(1,57)	1:A:54:VAL:C	1:A:55:THR:N	1:A:55:THR:CA	1:A:55:THR:C	10	2.4
(1,31)	1:A:41:GLY:C	1:A:42:ARG:N	1:A:42:ARG:CA	1:A:42:ARG:C	19	2.4
(1,285)	1:A:193:GLN:C	1:A:194:LYS:N	1:A:194:LYS:CA	1:A:194:LYS:C	20	2.4
(1,284)	1:A:193:GLN:N	1:A:193:GLN:CA	1:A:193:GLN:C	1:A:194:LYS:N	6	2.4
(1,280)	1:A:191:LEU:N	1:A:191:LEU:CA	1:A:191:LEU:C	1:A:192:GLY:N	12	2.4
(1,28)	1:A:35:CYS:N	1:A:35:CYS:CA	1:A:35:CYS:C	1:A:36:LEU:N	4	2.4
(1,268)	1:A:185:ALA:N	1:A:185:ALA:CA	1:A:185:ALA:C	1:A:186:ALA:N	14	2.4
(1,258)	1:A:172:GLU:N	1:A:172:GLU:CA	1:A:172:GLU:C	1:A:173:ARG:N	7	2.4
(1,247)	1:A:166:LEU:C	1:A:167:ILE:N	1:A:167:ILE:CA	1:A:167:ILE:C	3	2.4
(1,211)	1:A:140:ASN:C	1:A:141:THR:N	1:A:141:THR:CA	1:A:141:THR:C	8	2.4
(1,198)	1:A:132:PHE:N	1:A:132:PHE:CA	1:A:132:PHE:C	1:A:133:ALA:N	18	2.4
(1,18)	1:A:30:GLN:N	1:A:30:GLN:CA	1:A:30:GLN:C	1:A:31:GLY:N	1	2.4
(1,18)	1:A:30:GLN:N	1:A:30:GLN:CA	1:A:30:GLN:C	1:A:31:GLY:N	6	2.4
(1,173)	1:A:118:TYR:N	1:A:118:TYR:CA	1:A:118:TYR:C	1:A:119:GLN:N	18	2.4
(1,171)	1:A:117:VAL:N	1:A:117:VAL:CA	1:A:117:VAL:C	1:A:118:TYR:N	1	2.4
(1,126)	1:A:91:VAL:C	1:A:92:ALA:N	1:A:92:ALA:CA	1:A:92:ALA:C	17	2.4
(1,123)	1:A:88:PHE:C	1:A:89:ASP:N	1:A:89:ASP:CA	1:A:89:ASP:C	16	2.4
(1,28)	1:A:35:CYS:N	1:A:35:CYS:CA	1:A:35:CYS:C	1:A:36:LEU:N	20	2.3
(1,22)	1:A:32:LYS:N	1:A:32:LYS:CA	1:A:32:LYS:C	1:A:33:ILE:N	5	2.3
(1,211)	1:A:140:ASN:C	1:A:141:THR:N	1:A:141:THR:CA	1:A:141:THR:C	4	2.3
(1,202)	1:A:135:GLU:N	1:A:135:GLU:CA	1:A:135:GLU:C	1:A:136:GLN:N	3	2.3
(1,190)	1:A:128:ILE:N	1:A:128:ILE:CA	1:A:128:ILE:C	1:A:129:LEU:N	4	2.3
(1,185)	1:A:125:GLY:C	1:A:126:VAL:N	1:A:126:VAL:CA	1:A:126:VAL:C	14	2.3
(1,185)	1:A:125:GLY:C	1:A:126:VAL:N	1:A:126:VAL:CA	1:A:126:VAL:C	19	2.3
(1,180)	1:A:123:PRO:N	1:A:123:PRO:CA	1:A:123:PRO:C	1:A:124:GLY:N	17	2.3
(1,18)	1:A:30:GLN:N	1:A:30:GLN:CA	1:A:30:GLN:C	1:A:31:GLY:N	14	2.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,173)	1:A:118:TYR:N	1:A:118:TYR:CA	1:A:118:TYR:C	1:A:119:GLN:N	13	2.3
(1,117)	1:A:84:ASN:C	1:A:85:LEU:N	1:A:85:LEU:CA	1:A:85:LEU:C	16	2.3
(1,115)	1:A:83:SER:C	1:A:84:ASN:N	1:A:84:ASN:CA	1:A:84:ASN:C	15	2.3
(1,115)	1:A:83:SER:C	1:A:84:ASN:N	1:A:84:ASN:CA	1:A:84:ASN:C	20	2.3
(1,90)	1:A:71:ALA:N	1:A:71:ALA:CA	1:A:71:ALA:C	1:A:72:GLN:N	8	2.2
(1,54)	1:A:53:GLU:N	1:A:53:GLU:CA	1:A:53:GLU:C	1:A:54:VAL:N	10	2.2
(1,268)	1:A:185:ALA:N	1:A:185:ALA:CA	1:A:185:ALA:C	1:A:186:ALA:N	11	2.2
(1,262)	1:A:174:ASN:N	1:A:174:ASN:CA	1:A:174:ASN:C	1:A:175:LEU:N	13	2.2
(1,214)	1:A:143:GLY:N	1:A:143:GLY:CA	1:A:143:GLY:C	1:A:144:PRO:N	17	2.2
(1,21)	1:A:31:GLY:C	1:A:32:LYS:N	1:A:32:LYS:CA	1:A:32:LYS:C	4	2.2
(1,194)	1:A:130:GLU:N	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:C	1:A:131:GLY:N	7	2.2
(1,188)	1:A:127:PHE:N	1:A:127:PHE:CA	1:A:127:PHE:C	1:A:128:ILE:N	10	2.2
(1,173)	1:A:118:TYR:N	1:A:118:TYR:CA	1:A:118:TYR:C	1:A:119:GLN:N	10	2.2
(1,150)	1:A:106:PRO:N	1:A:106:PRO:CA	1:A:106:PRO:C	1:A:107:SER:N	9	2.2
(1,148)	1:A:104:HIS:C	1:A:105:LEU:N	1:A:105:LEU:CA	1:A:105:LEU:C	16	2.2
(1,142)	1:A:101:ILE:C	1:A:102:PHE:N	1:A:102:PHE:CA	1:A:102:PHE:C	4	2.2
(1,6)	1:A:23:SER:N	1:A:23:SER:CA	1:A:23:SER:C	1:A:24:VAL:N	11	2.1
(1,268)	1:A:185:ALA:N	1:A:185:ALA:CA	1:A:185:ALA:C	1:A:186:ALA:N	6	2.1
(1,267)	1:A:184:LYS:C	1:A:185:ALA:N	1:A:185:ALA:CA	1:A:185:ALA:C	17	2.1
(1,259)	1:A:172:GLU:C	1:A:173:ARG:N	1:A:173:ARG:CA	1:A:173:ARG:C	10	2.1
(1,259)	1:A:172:GLU:C	1:A:173:ARG:N	1:A:173:ARG:CA	1:A:173:ARG:C	19	2.1
(1,212)	1:A:141:THR:N	1:A:141:THR:CA	1:A:141:THR:C	1:A:142:GLY:N	1	2.1
(1,189)	1:A:127:PHE:C	1:A:128:ILE:N	1:A:128:ILE:CA	1:A:128:ILE:C	7	2.1
(1,188)	1:A:127:PHE:N	1:A:127:PHE:CA	1:A:127:PHE:C	1:A:128:ILE:N	17	2.1
(1,173)	1:A:118:TYR:N	1:A:118:TYR:CA	1:A:118:TYR:C	1:A:119:GLN:N	16	2.1
(1,156)	1:A:109:LEU:N	1:A:109:LEU:CA	1:A:109:LEU:C	1:A:110:ARG:N	6	2.1
(1,145)	1:A:103:CYS:N	1:A:103:CYS:CA	1:A:103:CYS:C	1:A:104:HIS:N	13	2.1
(1,58)	1:A:55:THR:N	1:A:55:THR:CA	1:A:55:THR:C	1:A:56:ALA:N	6	2.0
(1,54)	1:A:53:GLU:N	1:A:53:GLU:CA	1:A:53:GLU:C	1:A:54:VAL:N	3	2.0
(1,3)	1:A:21:LEU:C	1:A:22:VAL:N	1:A:22:VAL:CA	1:A:22:VAL:C	1	2.0
(1,283)	1:A:192:GLY:C	1:A:193:GLN:N	1:A:193:GLN:CA	1:A:193:GLN:C	11	2.0
(1,268)	1:A:185:ALA:N	1:A:185:ALA:CA	1:A:185:ALA:C	1:A:186:ALA:N	5	2.0
(1,249)	1:A:167:ILE:C	1:A:168:ALA:N	1:A:168:ALA:CA	1:A:168:ALA:C	13	2.0
(1,22)	1:A:32:LYS:N	1:A:32:LYS:CA	1:A:32:LYS:C	1:A:33:ILE:N	20	2.0
(1,206)	1:A:137:LEU:N	1:A:137:LEU:CA	1:A:137:LEU:C	1:A:138:GLN:N	18	2.0
(1,194)	1:A:130:GLU:N	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:C	1:A:131:GLY:N	9	2.0
(1,190)	1:A:128:ILE:N	1:A:128:ILE:CA	1:A:128:ILE:C	1:A:129:LEU:N	17	2.0
(1,186)	1:A:126:VAL:N	1:A:126:VAL:CA	1:A:126:VAL:C	1:A:127:PHE:N	10	2.0
(1,185)	1:A:125:GLY:C	1:A:126:VAL:N	1:A:126:VAL:CA	1:A:126:VAL:C	1	2.0
(1,180)	1:A:123:PRO:N	1:A:123:PRO:CA	1:A:123:PRO:C	1:A:124:GLY:N	13	2.0
(1,175)	1:A:119:GLN:N	1:A:119:GLN:CA	1:A:119:GLN:C	1:A:120:GLY:N	8	2.0
(1,160)	1:A:111:GLN:N	1:A:111:GLN:CA	1:A:111:GLN:C	1:A:112:GLN:N	9	2.0
(1,143)	1:A:102:PHE:N	1:A:102:PHE:CA	1:A:102:PHE:C	1:A:103:CYS:N	3	2.0
(1,142)	1:A:101:ILE:C	1:A:102:PHE:N	1:A:102:PHE:CA	1:A:102:PHE:C	15	2.0
(1,127)	1:A:92:ALA:N	1:A:92:ALA:CA	1:A:92:ALA:C	1:A:93:ASP:N	5	2.0
(1,127)	1:A:92:ALA:N	1:A:92:ALA:CA	1:A:92:ALA:C	1:A:93:ASP:N	13	2.0
(1,126)	1:A:91:VAL:C	1:A:92:ALA:N	1:A:92:ALA:CA	1:A:92:ALA:C	11	2.0
(1,109)	1:A:80:THR:C	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	17	2.0
(1,100)	1:A:76:VAL:N	1:A:76:VAL:CA	1:A:76:VAL:C	1:A:77:LYS:N	5	2.0
(1,58)	1:A:55:THR:N	1:A:55:THR:CA	1:A:55:THR:C	1:A:56:ALA:N	15	1.9
(1,283)	1:A:192:GLY:C	1:A:193:GLN:N	1:A:193:GLN:CA	1:A:193:GLN:C	9	1.9

Continued on next page...



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,283)	1:A:192:GLY:C	1:A:193:GLN:N	1:A:193:GLN:CA	1:A:193:GLN:C	10	1.9
(1,280)	1:A:191:LEU:N	1:A:191:LEU:CA	1:A:191:LEU:C	1:A:192:GLY:N	7	1.9
(1,28)	1:A:35:CYS:N	1:A:35:CYS:CA	1:A:35:CYS:C	1:A:36:LEU:N	19	1.9
(1,262)	1:A:174:ASN:N	1:A:174:ASN:CA	1:A:174:ASN:C	1:A:175:LEU:N	14	1.9
(1,204)	1:A:136:GLN:N	1:A:136:GLN:CA	1:A:136:GLN:C	1:A:137:LEU:N	10	1.9
(1,204)	1:A:136:GLN:N	1:A:136:GLN:CA	1:A:136:GLN:C	1:A:137:LEU:N	19	1.9
(1,202)	1:A:135:GLU:N	1:A:135:GLU:CA	1:A:135:GLU:C	1:A:136:GLN:N	18	1.9
(1,201)	1:A:134:PRO:C	1:A:135:GLU:N	1:A:135:GLU:CA	1:A:135:GLU:C	1	1.9
(1,20)	1:A:31:GLY:N	1:A:31:GLY:CA	1:A:31:GLY:C	1:A:32:LYS:N	12	1.9
(1,194)	1:A:130:GLU:N	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:C	1:A:131:GLY:N	12	1.9
(1,190)	1:A:128:ILE:N	1:A:128:ILE:CA	1:A:128:ILE:C	1:A:129:LEU:N	5	1.9
(1,190)	1:A:128:ILE:N	1:A:128:ILE:CA	1:A:128:ILE:C	1:A:129:LEU:N	6	1.9
(1,175)	1:A:119:GLN:N	1:A:119:GLN:CA	1:A:119:GLN:C	1:A:120:GLY:N	13	1.9
(1,170)	1:A:116:LYS:C	1:A:117:VAL:N	1:A:117:VAL:CA	1:A:117:VAL:C	20	1.9
(1,142)	1:A:101:ILE:C	1:A:102:PHE:N	1:A:102:PHE:CA	1:A:102:PHE:C	7	1.9
(1,139)	1:A:100:SER:N	1:A:100:SER:CA	1:A:100:SER:C	1:A:101:ILE:N	18	1.9
(1,127)	1:A:92:ALA:N	1:A:92:ALA:CA	1:A:92:ALA:C	1:A:93:ASP:N	14	1.9
(1,115)	1:A:83:SER:C	1:A:84:ASN:N	1:A:84:ASN:CA	1:A:84:ASN:C	18	1.9
(1,100)	1:A:76:VAL:N	1:A:76:VAL:CA	1:A:76:VAL:C	1:A:77:LYS:N	20	1.9
(1,69)	1:A:60:SER:C	1:A:61:SER:N	1:A:61:SER:CA	1:A:61:SER:C	18	1.8
(1,62)	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	1:A:58:ASP:N	12	1.8
(1,57)	1:A:54:VAL:C	1:A:55:THR:N	1:A:55:THR:CA	1:A:55:THR:C	11	1.8
(1,57)	1:A:54:VAL:C	1:A:55:THR:N	1:A:55:THR:CA	1:A:55:THR:C	17	1.8
(1,285)	1:A:193:GLN:C	1:A:194:LYS:N	1:A:194:LYS:CA	1:A:194:LYS:C	3	1.8
(1,285)	1:A:193:GLN:C	1:A:194:LYS:N	1:A:194:LYS:CA	1:A:194:LYS:C	8	1.8
(1,283)	1:A:192:GLY:C	1:A:193:GLN:N	1:A:193:GLN:CA	1:A:193:GLN:C	5	1.8
(1,281)	1:A:191:LEU:C	1:A:192:GLY:N	1:A:192:GLY:CA	1:A:192:GLY:C	5	1.8
(1,262)	1:A:174:ASN:N	1:A:174:ASN:CA	1:A:174:ASN:C	1:A:175:LEU:N	5	1.8
(1,249)	1:A:167:ILE:C	1:A:168:ALA:N	1:A:168:ALA:CA	1:A:168:ALA:C	4	1.8
(1,206)	1:A:137:LEU:N	1:A:137:LEU:CA	1:A:137:LEU:C	1:A:138:GLN:N	20	1.8
(1,204)	1:A:136:GLN:N	1:A:136:GLN:CA	1:A:136:GLN:C	1:A:137:LEU:N	7	1.8
(1,190)	1:A:128:ILE:N	1:A:128:ILE:CA	1:A:128:ILE:C	1:A:129:LEU:N	1	1.8
(1,188)	1:A:127:PHE:N	1:A:127:PHE:CA	1:A:127:PHE:C	1:A:128:ILE:N	5	1.8
(1,182)	1:A:124:GLY:N	1:A:124:GLY:CA	1:A:124:GLY:C	1:A:125:GLY:N	20	1.8
(1,181)	1:A:123:PRO:C	1:A:124:GLY:N	1:A:124:GLY:CA	1:A:124:GLY:C	13	1.8
(1,18)	1:A:30:GLN:N	1:A:30:GLN:CA	1:A:30:GLN:C	1:A:31:GLY:N	11	1.8
(1,176)	1:A:120:GLY:C	1:A:121:LEU:N	1:A:121:LEU:CA	1:A:121:LEU:C	15	1.8
(1,169)	1:A:116:LYS:N	1:A:116:LYS:CA	1:A:116:LYS:C	1:A:117:VAL:N	17	1.8
(1,116)	1:A:84:ASN:N	1:A:84:ASN:CA	1:A:84:ASN:C	1:A:85:LEU:N	14	1.8
(1,57)	1:A:54:VAL:C	1:A:55:THR:N	1:A:55:THR:CA	1:A:55:THR:C	2	1.7
(1,283)	1:A:192:GLY:C	1:A:193:GLN:N	1:A:193:GLN:CA	1:A:193:GLN:C	7	1.7
(1,249)	1:A:167:ILE:C	1:A:168:ALA:N	1:A:168:ALA:CA	1:A:168:ALA:C	2	1.7
(1,201)	1:A:134:PRO:C	1:A:135:GLU:N	1:A:135:GLU:CA	1:A:135:GLU:C	4	1.7
(1,2)	1:A:21:LEU:N	1:A:21:LEU:CA	1:A:21:LEU:C	1:A:22:VAL:N	16	1.7
(1,198)	1:A:132:PHE:N	1:A:132:PHE:CA	1:A:132:PHE:C	1:A:133:ALA:N	12	1.7
(1,197)	1:A:131:GLY:C	1:A:132:PHE:N	1:A:132:PHE:CA	1:A:132:PHE:C	19	1.7
(1,190)	1:A:128:ILE:N	1:A:128:ILE:CA	1:A:128:ILE:C	1:A:129:LEU:N	8	1.7
(1,186)	1:A:126:VAL:N	1:A:126:VAL:CA	1:A:126:VAL:C	1:A:127:PHE:N	15	1.7
(1,185)	1:A:125:GLY:C	1:A:126:VAL:N	1:A:126:VAL:CA	1:A:126:VAL:C	20	1.7
(1,181)	1:A:123:PRO:C	1:A:124:GLY:N	1:A:124:GLY:CA	1:A:124:GLY:C	19	1.7
(1,175)	1:A:119:GLN:N	1:A:119:GLN:CA	1:A:119:GLN:C	1:A:120:GLY:N	4	1.7

Continued on next page...



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,173)	1:A:118:TYR:N	1:A:118:TYR:CA	1:A:118:TYR:C	1:A:119:GLN:N	12	1.7
(1,171)	1:A:117:VAL:N	1:A:117:VAL:CA	1:A:117:VAL:C	1:A:118:TYR:N	12	1.7
(1,118)	1:A:85:LEU:N	1:A:85:LEU:CA	1:A:85:LEU:C	1:A:86:ALA:N	10	1.7
(1,88)	1:A:70:LEU:N	1:A:70:LEU:CA	1:A:70:LEU:C	1:A:71:ALA:N	6	1.6
(1,284)	1:A:193:GLN:N	1:A:193:GLN:CA	1:A:193:GLN:C	1:A:194:LYS:N	18	1.6
(1,28)	1:A:35:CYS:N	1:A:35:CYS:CA	1:A:35:CYS:C	1:A:36:LEU:N	12	1.6
(1,249)	1:A:167:ILE:C	1:A:168:ALA:N	1:A:168:ALA:CA	1:A:168:ALA:C	14	1.6
(1,247)	1:A:166:LEU:C	1:A:167:ILE:N	1:A:167:ILE:CA	1:A:167:ILE:C	1	1.6
(1,247)	1:A:166:LEU:C	1:A:167:ILE:N	1:A:167:ILE:CA	1:A:167:ILE:C	11	1.6
(1,190)	1:A:128:ILE:N	1:A:128:ILE:CA	1:A:128:ILE:C	1:A:129:LEU:N	20	1.6
(1,188)	1:A:127:PHE:N	1:A:127:PHE:CA	1:A:127:PHE:C	1:A:128:ILE:N	19	1.6
(1,185)	1:A:125:GLY:C	1:A:126:VAL:N	1:A:126:VAL:CA	1:A:126:VAL:C	5	1.6
(1,182)	1:A:124:GLY:N	1:A:124:GLY:CA	1:A:124:GLY:C	1:A:125:GLY:N	5	1.6
(1,180)	1:A:123:PRO:N	1:A:123:PRO:CA	1:A:123:PRO:C	1:A:124:GLY:N	11	1.6
(1,180)	1:A:123:PRO:N	1:A:123:PRO:CA	1:A:123:PRO:C	1:A:124:GLY:N	20	1.6
(1,175)	1:A:119:GLN:N	1:A:119:GLN:CA	1:A:119:GLN:C	1:A:120:GLY:N	1	1.6
(1,156)	1:A:109:LEU:N	1:A:109:LEU:CA	1:A:109:LEU:C	1:A:110:ARG:N	5	1.6
(1,142)	1:A:101:ILE:C	1:A:102:PHE:N	1:A:102:PHE:CA	1:A:102:PHE:C	1	1.6
(1,123)	1:A:88:PHE:C	1:A:89:ASP:N	1:A:89:ASP:CA	1:A:89:ASP:C	14	1.6
(1,115)	1:A:83:SER:C	1:A:84:ASN:N	1:A:84:ASN:CA	1:A:84:ASN:C	13	1.6
(1,90)	1:A:71:ALA:N	1:A:71:ALA:CA	1:A:71:ALA:C	1:A:72:GLN:N	16	1.5
(1,70)	1:A:61:SER:N	1:A:61:SER:CA	1:A:61:SER:C	1:A:62:VAL:N	9	1.5
(1,62)	1:A:57:VAL:N	1:A:57:VAL:CA	1:A:57:VAL:C	1:A:58:ASP:N	19	1.5
(1,57)	1:A:54:VAL:C	1:A:55:THR:N	1:A:55:THR:CA	1:A:55:THR:C	15	1.5
(1,46)	1:A:49:SER:N	1:A:49:SER:CA	1:A:49:SER:C	1:A:50:LEU:N	19	1.5
(1,280)	1:A:191:LEU:N	1:A:191:LEU:CA	1:A:191:LEU:C	1:A:192:GLY:N	13	1.5
(1,280)	1:A:191:LEU:N	1:A:191:LEU:CA	1:A:191:LEU:C	1:A:192:GLY:N	15	1.5
(1,280)	1:A:191:LEU:N	1:A:191:LEU:CA	1:A:191:LEU:C	1:A:192:GLY:N	16	1.5
(1,274)	1:A:188:ILE:N	1:A:188:ILE:CA	1:A:188:ILE:C	1:A:189:GLN:N	14	1.5
(1,247)	1:A:166:LEU:C	1:A:167:ILE:N	1:A:167:ILE:CA	1:A:167:ILE:C	5	1.5
(1,237)	1:A:161:PRO:C	1:A:162:SER:N	1:A:162:SER:CA	1:A:162:SER:C	8	1.5
(1,212)	1:A:141:THR:N	1:A:141:THR:CA	1:A:141:THR:C	1:A:142:GLY:N	13	1.5
(1,204)	1:A:136:GLN:N	1:A:136:GLN:CA	1:A:136:GLN:C	1:A:137:LEU:N	11	1.5
(1,190)	1:A:128:ILE:N	1:A:128:ILE:CA	1:A:128:ILE:C	1:A:129:LEU:N	10	1.5
(1,187)	1:A:126:VAL:C	1:A:127:PHE:N	1:A:127:PHE:CA	1:A:127:PHE:C	4	1.5
(1,186)	1:A:126:VAL:N	1:A:126:VAL:CA	1:A:126:VAL:C	1:A:127:PHE:N	2	1.5
(1,186)	1:A:126:VAL:N	1:A:126:VAL:CA	1:A:126:VAL:C	1:A:127:PHE:N	5	1.5
(1,186)	1:A:126:VAL:N	1:A:126:VAL:CA	1:A:126:VAL:C	1:A:127:PHE:N	18	1.5
(1,182)	1:A:124:GLY:N	1:A:124:GLY:CA	1:A:124:GLY:C	1:A:125:GLY:N	9	1.5
(1,169)	1:A:116:LYS:N	1:A:116:LYS:CA	1:A:116:LYS:C	1:A:117:VAL:N	20	1.5
(1,164)	1:A:113:LEU:N	1:A:113:LEU:CA	1:A:113:LEU:C	1:A:114:TYR:N	9	1.5
(1,145)	1:A:103:CYS:N	1:A:103:CYS:CA	1:A:103:CYS:C	1:A:104:HIS:N	20	1.5
(1,139)	1:A:100:SER:N	1:A:100:SER:CA	1:A:100:SER:C	1:A:101:ILE:N	20	1.5
(1,126)	1:A:91:VAL:C	1:A:92:ALA:N	1:A:92:ALA:CA	1:A:92:ALA:C	19	1.5
(1,122)	1:A:88:PHE:N	1:A:88:PHE:CA	1:A:88:PHE:C	1:A:89:ASP:N	17	1.5
(1,104)	1:A:78:ILE:N	1:A:78:ILE:CA	1:A:78:ILE:C	1:A:79:THR:N	3	1.5
(1,57)	1:A:54:VAL:C	1:A:55:THR:N	1:A:55:THR:CA	1:A:55:THR:C	4	1.4
(1,46)	1:A:49:SER:N	1:A:49:SER:CA	1:A:49:SER:C	1:A:50:LEU:N	13	1.4
(1,38)	1:A:45:CYS:N	1:A:45:CYS:CA	1:A:45:CYS:C	1:A:46:PHE:N	13	1.4
(1,281)	1:A:191:LEU:C	1:A:192:GLY:N	1:A:192:GLY:CA	1:A:192:GLY:C	6	1.4
(1,274)	1:A:188:ILE:N	1:A:188:ILE:CA	1:A:188:ILE:C	1:A:189:GLN:N	20	1.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,264)	1:A:175:LEU:N	1:A:175:LEU:CA	1:A:175:LEU:C	1:A:176:ASP:N	12	1.4
(1,23)	1:A:32:LYS:C	1:A:33:ILE:N	1:A:33:ILE:CA	1:A:33:ILE:C	19	1.4
(1,202)	1:A:135:GLU:N	1:A:135:GLU:CA	1:A:135:GLU:C	1:A:136:GLN:N	10	1.4
(1,202)	1:A:135:GLU:N	1:A:135:GLU:CA	1:A:135:GLU:C	1:A:136:GLN:N	12	1.4
(1,185)	1:A:125:GLY:C	1:A:126:VAL:N	1:A:126:VAL:CA	1:A:126:VAL:C	9	1.4
(1,185)	1:A:125:GLY:C	1:A:126:VAL:N	1:A:126:VAL:CA	1:A:126:VAL:C	10	1.4
(1,185)	1:A:125:GLY:C	1:A:126:VAL:N	1:A:126:VAL:CA	1:A:126:VAL:C	11	1.4
(1,18)	1:A:30:GLN:N	1:A:30:GLN:CA	1:A:30:GLN:C	1:A:31:GLY:N	12	1.4
(1,176)	1:A:120:GLY:C	1:A:121:LEU:N	1:A:121:LEU:CA	1:A:121:LEU:C	10	1.4
(1,175)	1:A:119:GLN:N	1:A:119:GLN:CA	1:A:119:GLN:C	1:A:120:GLY:N	18	1.4
(1,169)	1:A:116:LYS:N	1:A:116:LYS:CA	1:A:116:LYS:C	1:A:117:VAL:N	3	1.4
(1,154)	1:A:108:SER:N	1:A:108:SER:CA	1:A:108:SER:C	1:A:109:LEU:N	1	1.4
(1,154)	1:A:108:SER:N	1:A:108:SER:CA	1:A:108:SER:C	1:A:109:LEU:N	16	1.4
(1,138)	1:A:99:VAL:C	1:A:100:SER:N	1:A:100:SER:CA	1:A:100:SER:C	2	1.4
(1,118)	1:A:85:LEU:N	1:A:85:LEU:CA	1:A:85:LEU:C	1:A:86:ALA:N	20	1.4
(1,284)	1:A:193:GLN:N	1:A:193:GLN:CA	1:A:193:GLN:C	1:A:194:LYS:N	9	1.3
(1,281)	1:A:191:LEU:C	1:A:192:GLY:N	1:A:192:GLY:CA	1:A:192:GLY:C	3	1.3
(1,281)	1:A:191:LEU:C	1:A:192:GLY:N	1:A:192:GLY:CA	1:A:192:GLY:C	9	1.3
(1,274)	1:A:188:ILE:N	1:A:188:ILE:CA	1:A:188:ILE:C	1:A:189:GLN:N	6	1.3
(1,264)	1:A:175:LEU:N	1:A:175:LEU:CA	1:A:175:LEU:C	1:A:176:ASP:N	3	1.3
(1,262)	1:A:174:ASN:N	1:A:174:ASN:CA	1:A:174:ASN:C	1:A:175:LEU:N	20	1.3
(1,260)	1:A:173:ARG:N	1:A:173:ARG:CA	1:A:173:ARG:C	1:A:174:ASN:N	14	1.3
(1,259)	1:A:172:GLU:C	1:A:173:ARG:N	1:A:173:ARG:CA	1:A:173:ARG:C	7	1.3
(1,258)	1:A:172:GLU:N	1:A:172:GLU:CA	1:A:172:GLU:C	1:A:173:ARG:N	14	1.3
(1,247)	1:A:166:LEU:C	1:A:167:ILE:N	1:A:167:ILE:CA	1:A:167:ILE:C	10	1.3
(1,247)	1:A:166:LEU:C	1:A:167:ILE:N	1:A:167:ILE:CA	1:A:167:ILE:C	15	1.3
(1,239)	1:A:162:SER:C	1:A:163:LEU:N	1:A:163:LEU:CA	1:A:163:LEU:C	20	1.3
(1,237)	1:A:161:PRO:C	1:A:162:SER:N	1:A:162:SER:CA	1:A:162:SER:C	3	1.3
(1,204)	1:A:136:GLN:N	1:A:136:GLN:CA	1:A:136:GLN:C	1:A:137:LEU:N	20	1.3
(1,188)	1:A:127:PHE:N	1:A:127:PHE:CA	1:A:127:PHE:C	1:A:128:ILE:N	11	1.3
(1,188)	1:A:127:PHE:N	1:A:127:PHE:CA	1:A:127:PHE:C	1:A:128:ILE:N	15	1.3
(1,182)	1:A:124:GLY:N	1:A:124:GLY:CA	1:A:124:GLY:C	1:A:125:GLY:N	11	1.3
(1,18)	1:A:30:GLN:N	1:A:30:GLN:CA	1:A:30:GLN:C	1:A:31:GLY:N	18	1.3
(1,169)	1:A:116:LYS:N	1:A:116:LYS:CA	1:A:116:LYS:C	1:A:117:VAL:N	7	1.3
(1,160)	1:A:111:GLN:N	1:A:111:GLN:CA	1:A:111:GLN:C	1:A:112:GLN:N	19	1.3
(1,145)	1:A:103:CYS:N	1:A:103:CYS:CA	1:A:103:CYS:C	1:A:104:HIS:N	4	1.3
(1,145)	1:A:103:CYS:N	1:A:103:CYS:CA	1:A:103:CYS:C	1:A:104:HIS:N	17	1.3
(1,90)	1:A:71:ALA:N	1:A:71:ALA:CA	1:A:71:ALA:C	1:A:72:GLN:N	2	1.2
(1,69)	1:A:60:SER:C	1:A:61:SER:N	1:A:61:SER:CA	1:A:61:SER:C	4	1.2
(1,6)	1:A:23:SER:N	1:A:23:SER:CA	1:A:23:SER:C	1:A:24:VAL:N	10	1.2
(1,57)	1:A:54:VAL:C	1:A:55:THR:N	1:A:55:THR:CA	1:A:55:THR:C	5	1.2
(1,266)	1:A:184:LYS:N	1:A:184:LYS:CA	1:A:184:LYS:C	1:A:185:ALA:N	2	1.2
(1,260)	1:A:173:ARG:N	1:A:173:ARG:CA	1:A:173:ARG:C	1:A:174:ASN:N	18	1.2
(1,211)	1:A:140:ASN:C	1:A:141:THR:N	1:A:141:THR:CA	1:A:141:THR:C	5	1.2
(1,201)	1:A:134:PRO:C	1:A:135:GLU:N	1:A:135:GLU:CA	1:A:135:GLU:C	12	1.2
(1,20)	1:A:31:GLY:N	1:A:31:GLY:CA	1:A:31:GLY:C	1:A:32:LYS:N	20	1.2
(1,160)	1:A:111:GLN:N	1:A:111:GLN:CA	1:A:111:GLN:C	1:A:112:GLN:N	4	1.2
(1,156)	1:A:109:LEU:N	1:A:109:LEU:CA	1:A:109:LEU:C	1:A:110:ARG:N	17	1.2
(1,139)	1:A:100:SER:N	1:A:100:SER:CA	1:A:100:SER:C	1:A:101:ILE:N	17	1.2
(1,138)	1:A:99:VAL:C	1:A:100:SER:N	1:A:100:SER:CA	1:A:100:SER:C	14	1.2
(1,138)	1:A:99:VAL:C	1:A:100:SER:N	1:A:100:SER:CA	1:A:100:SER:C	16	1.2

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,127)	1:A:92:ALA:N	1:A:92:ALA:CA	1:A:92:ALA:C	1:A:93:ASP:N	8	1.2
(1,117)	1:A:84:ASN:C	1:A:85:LEU:N	1:A:85:LEU:CA	1:A:85:LEU:C	14	1.2
(1,112)	1:A:82:GLN:N	1:A:82:GLN:CA	1:A:82:GLN:C	1:A:83:SER:N	8	1.2
(1,111)	1:A:81:VAL:C	1:A:82:GLN:N	1:A:82:GLN:CA	1:A:82:GLN:C	3	1.2
(1,70)	1:A:61:SER:N	1:A:61:SER:CA	1:A:61:SER:C	1:A:62:VAL:N	13	1.1
(1,6)	1:A:23:SER:N	1:A:23:SER:CA	1:A:23:SER:C	1:A:24:VAL:N	2	1.1
(1,58)	1:A:55:THR:N	1:A:55:THR:CA	1:A:55:THR:C	1:A:56:ALA:N	12	1.1
(1,272)	1:A:187:LEU:N	1:A:187:LEU:CA	1:A:187:LEU:C	1:A:188:ILE:N	6	1.1
(1,226)	1:A:155:THR:N	1:A:155:THR:CA	1:A:155:THR:C	1:A:156:LEU:N	2	1.1
(1,211)	1:A:140:ASN:C	1:A:141:THR:N	1:A:141:THR:CA	1:A:141:THR:C	14	1.1
(1,193)	1:A:129:LEU:C	1:A:130:GLU:N	1:A:130:GLU:CA	1:A:130:GLU:C	10	1.1
(1,192)	1:A:129:LEU:N	1:A:129:LEU:CA	1:A:129:LEU:C	1:A:130:GLU:N	3	1.1
(1,188)	1:A:127:PHE:N	1:A:127:PHE:CA	1:A:127:PHE:C	1:A:128:ILE:N	4	1.1
(1,182)	1:A:124:GLY:N	1:A:124:GLY:CA	1:A:124:GLY:C	1:A:125:GLY:N	7	1.1
(1,18)	1:A:30:GLN:N	1:A:30:GLN:CA	1:A:30:GLN:C	1:A:31:GLY:N	19	1.1
(1,170)	1:A:116:LYS:C	1:A:117:VAL:N	1:A:117:VAL:CA	1:A:117:VAL:C	13	1.1
(1,160)	1:A:111:GLN:N	1:A:111:GLN:CA	1:A:111:GLN:C	1:A:112:GLN:N	18	1.1
(1,142)	1:A:101:ILE:C	1:A:102:PHE:N	1:A:102:PHE:CA	1:A:102:PHE:C	18	1.1
(1,118)	1:A:85:LEU:N	1:A:85:LEU:CA	1:A:85:LEU:C	1:A:86:ALA:N	5	1.1