



# wwPDB NMR Structure Validation Summary Report ⓘ

Apr 2, 2020 – 11:15 AM CDT

PDB ID : 2KPU  
Title : NMR Structure of YbbR family protein Dhaf\_0833 (residues 32-118) from Desulfitobacterium hafniense DCB-2: Northeast Structural Genomics Consortium target DhR29B  
Authors : Cort, J.R.; Ramelot, T.A.; Yang, Y.; Belote, R.L.; Ciccocanti, C.; Haleema, J.; Acton, T.B.; Xiao, R.; Everett, J.K.; Montelione, G.T.; Kennedy, M.A.; Northeast Structural Genomics Consortium (NESG)  
Deposited on : 2009-10-20

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

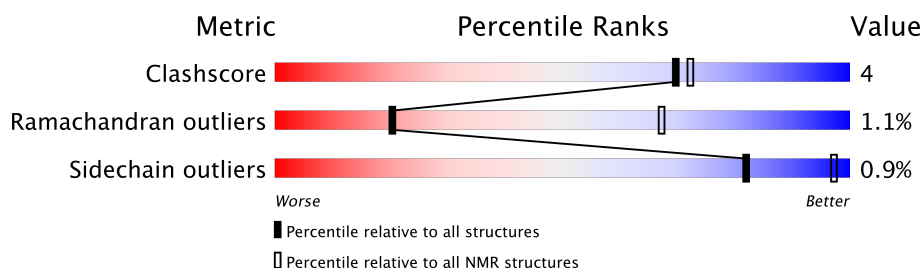
# 1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

*SOLUTION NMR*

The overall completeness of chemical shifts assignment is 64%.

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	96	 85% <span style="margin-left: 100px;">•</span> 11%

## 2 Ensemble composition and analysis

This entry contains 20 models. Model 3 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *no criteria*.

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:8-A:92 (85)	0.51	3

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 2 clusters and 5 single-model clusters were found.

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

### 3 Entry composition

There is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 1522 atoms, of which 763 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called YbbR family protein.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
1	A	96	Total	C	H	N	O	S	0
			1522	477	763	132	148	2	

There are 9 discrepancies between the modelled and reference sequences:

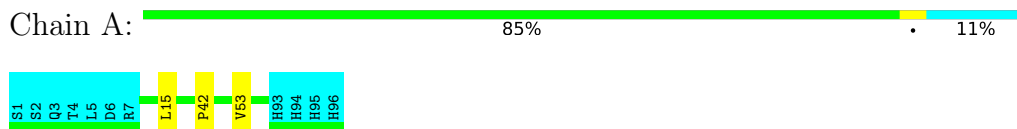
Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	1	SER	-	EXPRESSION TAG	UNP B8FX10
A	89	LEU	-	EXPRESSION TAG	UNP B8FX10
A	90	GLU	-	EXPRESSION TAG	UNP B8FX10
A	91	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP B8FX10
A	92	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP B8FX10
A	93	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP B8FX10
A	94	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP B8FX10
A	95	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP B8FX10
A	96	HIS	-	EXPRESSION TAG	UNP B8FX10

## 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.

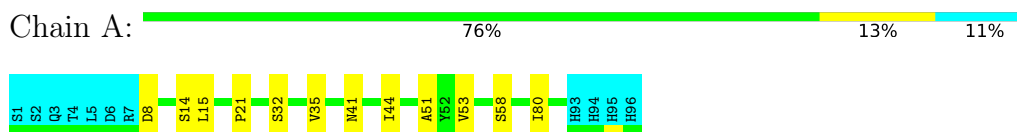
- Molecule 1: YbbR family protein



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

The representative model is number 3. Colouring as in section 4.1 above.

- Molecule 1: YbbR family protein



## 5 Refinement protocol and experimental data overview

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

Of the 40 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *low energy, few restraint violations, favorable geometry*.

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

Software name	Classification	Version
AutoStructure	structure solution	
CNS	refinement	
X-PLOR NIH	structure solution	
PSVS	refinement	

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

Chemical shift file(s)	2kpu_nmr.cif
Number of chemical shift lists	1
Total number of shifts	1166
Number of shifts mapped to atoms	720
Number of unparsed shifts	125
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	321
Assignment completeness (well-defined parts)	64%

No validations of the models with respect to experimental NMR restraints is performed at this time.

## 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	663	676	673	5±2
All	All	13260	13520	13460	108

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:62:GLU:HG2	1:A:88:GLN:HG2	0.80	1.52	12	2
1:A:15:LEU:HD11	1:A:53:VAL:HG13	0.68	1.65	8	17
1:A:62:GLU:HG2	1:A:88:GLN:HB2	0.67	1.64	16	2
1:A:19:ASN:HB2	1:A:54:ASP:HA	0.66	1.66	11	1
1:A:80:ILE:HG23	1:A:83:ARG:HG2	0.65	1.68	7	2

### 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	85/96 (89%)	79±2 (92±2%)	6±1 (6±2%)	1±1 (1±1%)	20	67
All	All	1700/1920 (89%)	1571 (92%)	110 (6%)	19 (1%)	20	67

5 of 6 unique Ramachandran outliers are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	42	PRO	10
1	A	31	PRO	4
1	A	44	ILE	2
1	A	58	SER	1
1	A	20	THR	1

### 6.3.2 Protein sidechains ⓘ

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles	
1	A	79/90 (88%)	78±1 (99±1%)	1±1 (1±1%)	82	97
All	All	1580/1800 (88%)	1566 (99%)	14 (1%)	82	97

5 of 6 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	90	GLU	4
1	A	41	ASN	3
1	A	8	ASP	3
1	A	38	GLU	2
1	A	23	ASN	1

### 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 64% for the well-defined parts and 60% for the entire structure.

### 7.1 Chemical shift list 1

File name: 2kpu\_nmr.cif

Chemical shift list name: *nef\_chemical\_shift\_list\_2kpu.mr*

#### 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	1166
Number of shifts mapped to atoms	720
Number of unparsed shifts	125
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	321
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 125) occurrences are reported below.

Shift ID	Chain	Res	Type	Atom	Shift Data		
					Value	Uncertainty	Ambiguity
34	A	4	THR	HG2%	1.150	0.020	1
35	A	4	THR	HG2%	1.150	0.020	1
46	A	5	LEU	HD1%	0.850	0.020	1
47	A	5	LEU	HD1%	0.850	0.020	1
49	A	5	LEU	HD2%	0.810	0.020	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 321) occurrences are reported below.

Chain	Res	Type	Atom	Shift Data		
				Value	Uncertainty	Ambiguity
A	68	LYS	HEx	2.97	0.02	2
A	34	ARG	HBx	1.68	0.02	2

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Chain	Res	Type	Atom	Shift Data		
				Value	Uncertainty	Ambiguity
A	70	GLU	HGy	2.4	0.02	2
A	7	ARG	HDy	3.1	0.02	2
A	86	THR	HG2%	1.06	0.02	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
$^{13}\text{C}_\alpha$	92	$0.20 \pm 0.15$	None needed ( $< 0.5$ ppm)
$^{13}\text{C}_\beta$	89	$-0.04 \pm 0.20$	None needed ( $< 0.5$ ppm)
$^{13}\text{C}'$	83	$0.34 \pm 0.11$	None needed ( $< 0.5$ ppm)
$^{15}\text{N}$	83	$-0.16 \pm 0.20$	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 64%, i.e. 658 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1036. 17 out of 17 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	$^1\text{H}$	$^{13}\text{C}$	$^{15}\text{N}$
Backbone	397/409 (97%)	159/162 (98%)	161/170 (95%)	77/77 (100%)
Sidechain	243/570 (43%)	32/333 (10%)	202/219 (92%)	9/18 (50%)
Aromatic	18/57 (32%)	9/29 (31%)	9/22 (41%)	0/6 (0%)
Overall	658/1036 (64%)	200/524 (38%)	372/411 (91%)	86/101 (85%)

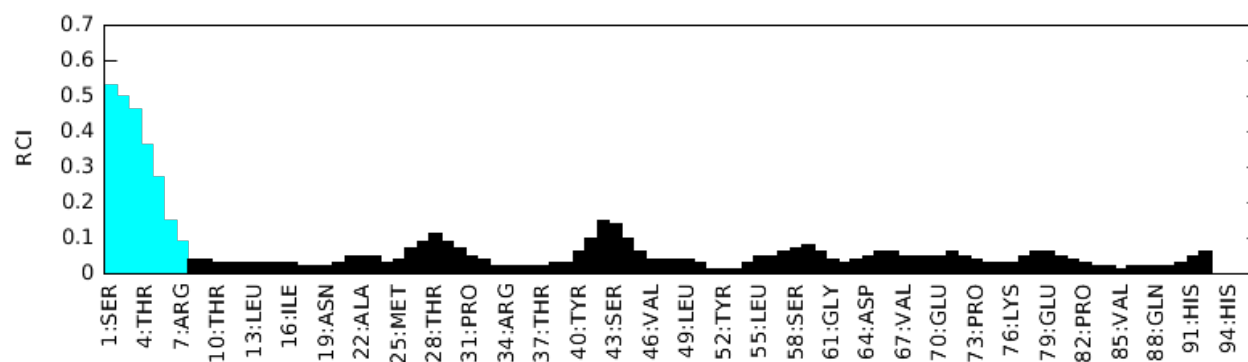
### 7.1.4 Statistically unusual chemical shifts [i](#)

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 Distance restraints analysis

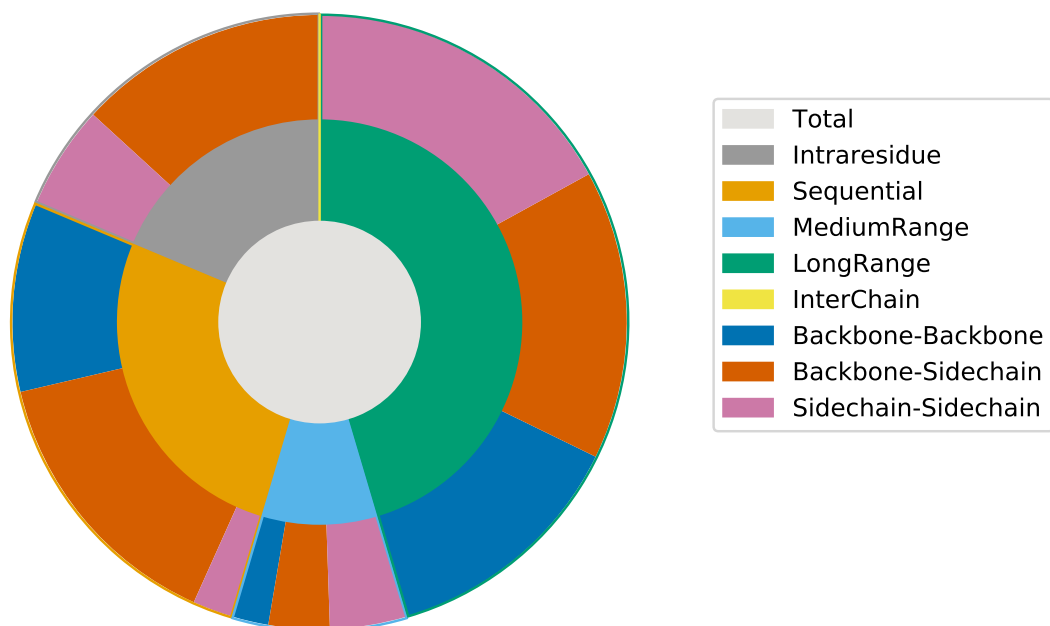
### 8.1 Distance restraints summary

Restraints are counted in different categories based on the atoms involved in each restraint.

Restraints type	B-B <sup>1</sup> (H <sup>4</sup> )	B-S <sup>2</sup> (H <sup>4</sup> )	S-S <sup>3</sup> (H <sup>4</sup> )	Total		
				Total(H <sup>4</sup> )	RR <sup>5</sup>	% <sup>6</sup>
Intraresidue ( $ i-j =0$ )	0(0)	111(0)	46(0)	157(0)	1.3	18.7
Sequential ( $ i-j =1$ )	84(0)	123(0)	18(0)	225(0)	1.9	26.8
Medium range ( $ i-j >1$ and $ i-j <5$ )	16(2)	27(0)	34(0)	77(2)	0.7	9.2
Long range ( $ i-j \geq 5$ )	111(46)	128(0)	143(0)	382(46)	3.2	45.4
Inter chain	0(0)	0(0)	0(0)	0(0)	0.0	0.0
Total	211(48)	389(0)	241(0)	841(48)	7.1	100.0

<sup>1</sup>number of backbone to backbone restraints, <sup>2</sup>number of backbone to sidechain restraints, <sup>3</sup>number of sidechain to sidechain restraints, <sup>4</sup>number of hydrogen bonds in that category, <sup>5</sup>number of restraints per residue, <sup>6</sup>percentage of restraints in that category. There are 0 unmapped restraints

#### 8.1.1 Pie chart : Distance restraints summary



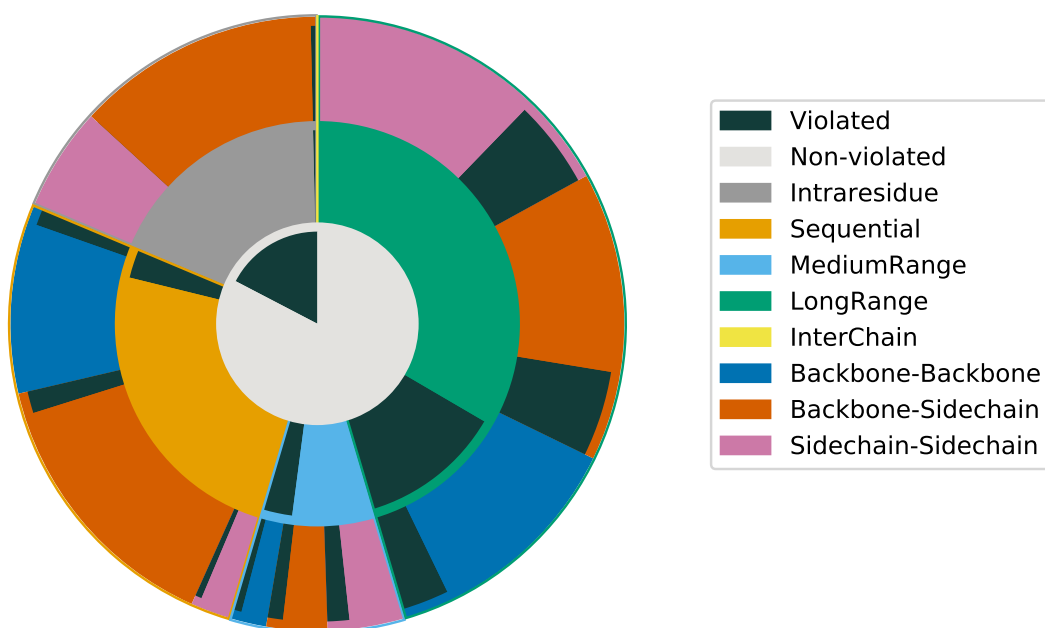
## 8.2 Distance violations summary

The following table provides the summary of violated restraints. Restraints that are violated at least in one model are counted as violated.

Restrains type	B-B <sup>1</sup> (% <sup>4</sup> )	B-S <sup>2</sup> (% <sup>4</sup> )	S-S <sup>3</sup> (% <sup>4</sup> )	Total		
				Total(% <sup>4</sup> )	RR <sup>5</sup>	% <sup>6</sup>
Intraresidue ( $ i-j =0$ )	0(0.0)	3(2.7)	0(0.0)	3(1.9)	0.0	2.1
Sequential ( $ i-j =1$ )	8(9.5)	10(8.1)	3(16.7)	21(9.3)	0.2	14.4
Medium range ( $ i-j >1$ and $ i-j <5$ )	4(25.0)	7(25.9)	10(29.4)	21(27.3)	0.2	14.4
Long range ( $ i-j \geq 5$ )	22(19.8)	39(30.5)	40(28.0)	101(26.4)	0.9	69.2
Inter chain	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0.0	0.0
Total	34(16.1)	59(15.2)	53(22.0)	146(17.4)	1.2	100.0

<sup>1</sup>number of backbone to backbone restraints, <sup>2</sup>number of backbone to sidechain restraints, <sup>3</sup>number of sidechain to sidechain restraints, <sup>4</sup>percentage of violations with respect to total restrains in that category, <sup>5</sup>number of restraints per residue, <sup>6</sup>percentage of violation with respect to total violations.

### 8.2.1 Pie-chart : Distance violations summary



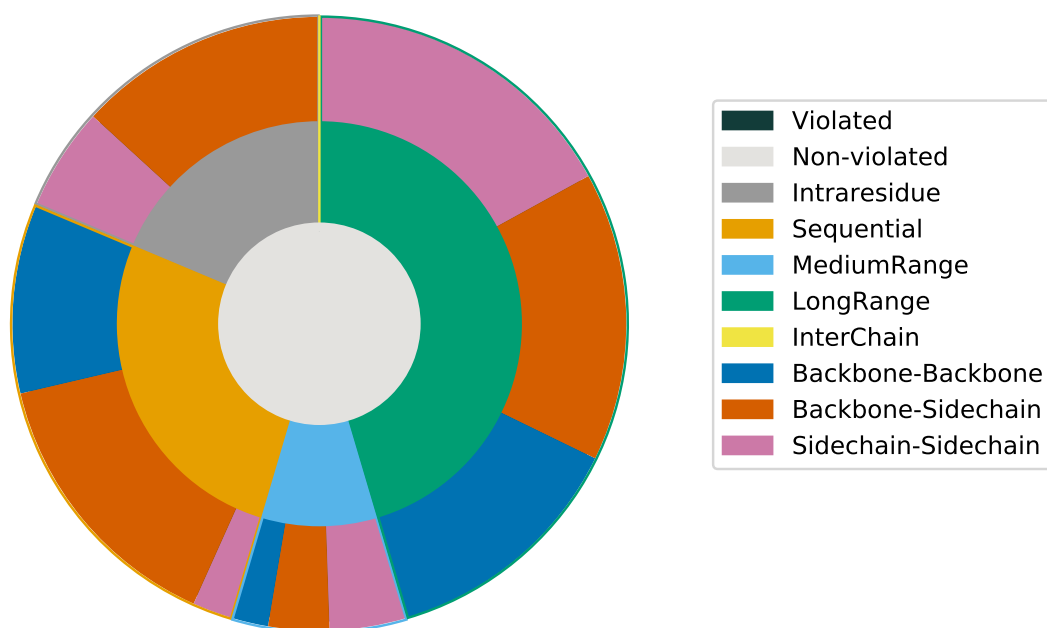
### 8.3 Consistent distance violations summary

The following table provides the summary of consistently violated restraints. Restraints that are violated in all models are counted as consistently violated.

Restrains type	B-B <sup>1</sup> (% <sup>4</sup> )	B-S <sup>2</sup> (% <sup>4</sup> )	S-S <sup>3</sup> (% <sup>4</sup> )	Total		
				Total(% <sup>4</sup> )	RR <sup>5</sup>	% <sup>6</sup>
Intraresidue ( $ i-j =0$ )	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0.0	0.0
Sequential ( $ i-j =1$ )	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0.0	0.0
Medium range ( $ i-j >1$ and $ i-j <5$ )	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0.0	0.0
Long range ( $ i-j \geq 5$ )	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0.0	0.0
Inter chain	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0.0	0.0
Total	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0(0.0)	0.0	0.0

<sup>1</sup>number of backbone to backbone restraints, <sup>2</sup>number of backbone to sidechain restraints, <sup>3</sup>number of sidechain to sidechain restraints, <sup>4</sup>percentage of violations with respect to total restrains in that category, <sup>5</sup>number of restraints per residue, <sup>6</sup>percentage of violation with respect to total violations

#### 8.3.1 Pie-chart : Consistent distance violations



## 8.4 Residual distance violations

Violation are counted in different bin sizes and listed below

Range (Å)	Avg. No. of violated restraints per model	Max violation (Å)
0-0.2	30.8	0.12
0.2-0.5	None	None
0.5-1.0	None	None
1.0-2.0	None	None
2.0-5.0	None	None
5.0<	None	None

## 8.5 Distance violations in ensemble

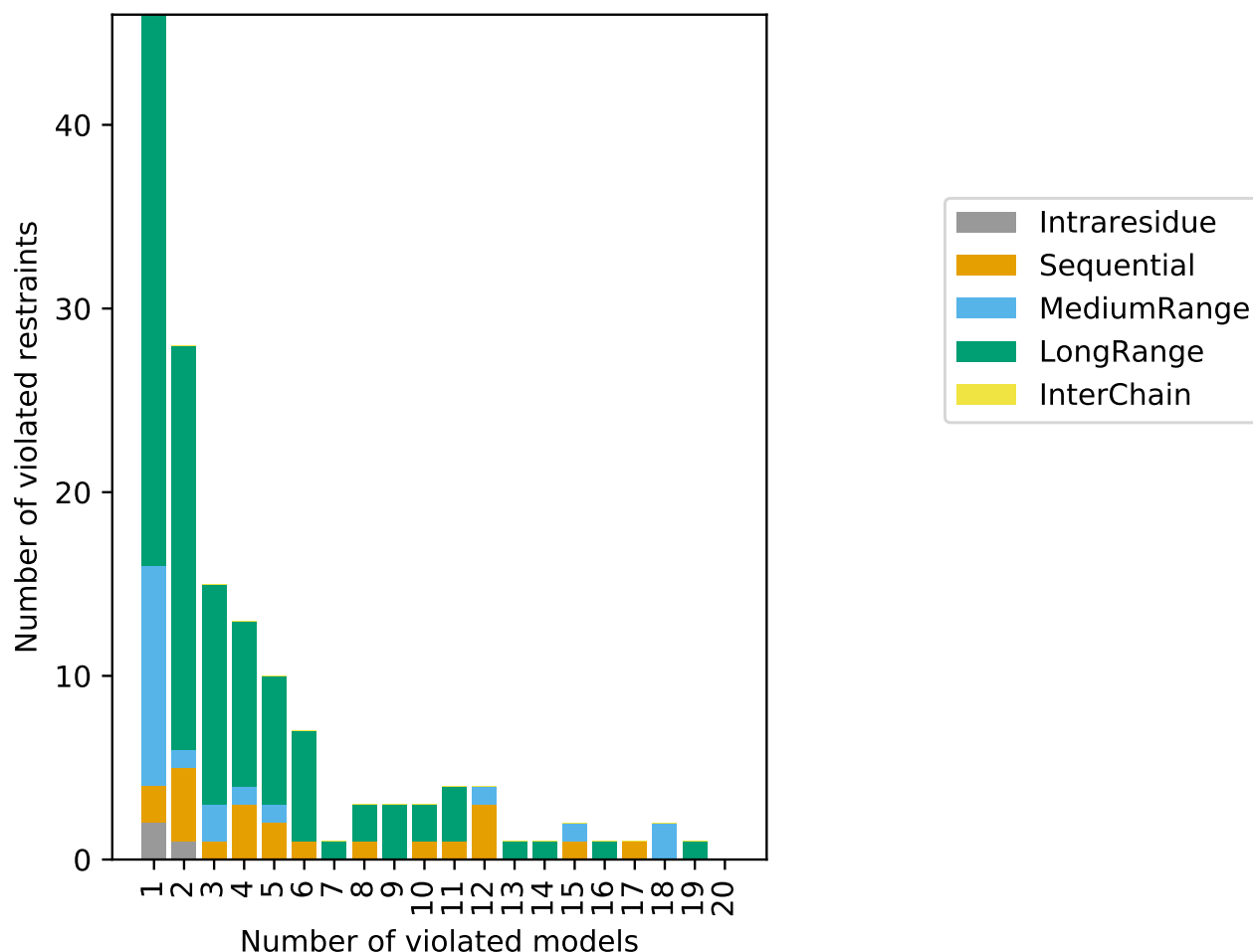
The restraints are grouped based on the number of violated models and listed here.

No. of violated restraints						No. of violated models
IR <sup>1</sup>	SQ <sup>2</sup>	MR <sup>3</sup>	LR <sup>4</sup>	IC <sup>5</sup>	Total	
2	2	12	30	0	46	1
1	4	1	22	0	28	2
0	1	2	12	0	15	3
0	3	1	9	0	13	4
0	2	1	7	0	10	5
0	1	0	6	0	7	6
0	0	0	1	0	1	7
0	1	0	2	0	3	8
0	0	0	3	0	3	9
0	1	0	2	0	3	10
0	1	0	3	0	4	11
0	3	1	0	0	4	12
0	0	0	1	0	1	13
0	0	0	1	0	1	14
0	1	1	0	0	2	15
0	0	0	1	0	1	16
0	1	0	0	0	1	17
0	0	2	0	0	2	18
0	0	0	1	0	1	19
0	0	0	0	0	0	20

<sup>1</sup>intraresidue restraints, <sup>2</sup>sequential restraints, <sup>3</sup>medium range restraints, <sup>4</sup>long range restraints, <sup>5</sup>inter chain restraints



### 8.5.1 Bar graph : No. of models vs No. of violations



154 intraresidue restraints, 204 sequential restraints, 56 medium range restraints, 281 long range restraints and 0 inter chain restraints are not violated. In total, 695 restraints are not violated in any of the models

## 8.6 Violations in each model

The following table lists the violation count in each model in the ensemble

Model ID	No. of violations					Total	Mean (Å)	Max (Å)
	IR <sup>1</sup>	SQ <sup>2</sup>	MR <sup>3</sup>	LR <sup>4</sup>	IC <sup>5</sup>			
1	0	9	5	18	0	32	0.02	0.06
2	0	9	5	10	0	24	0.03	0.06
3	0	7	5	22	0	34	0.02	0.07
4	1	5	5	26	0	37	0.02	0.06
5	0	6	1	23	0	30	0.03	0.07

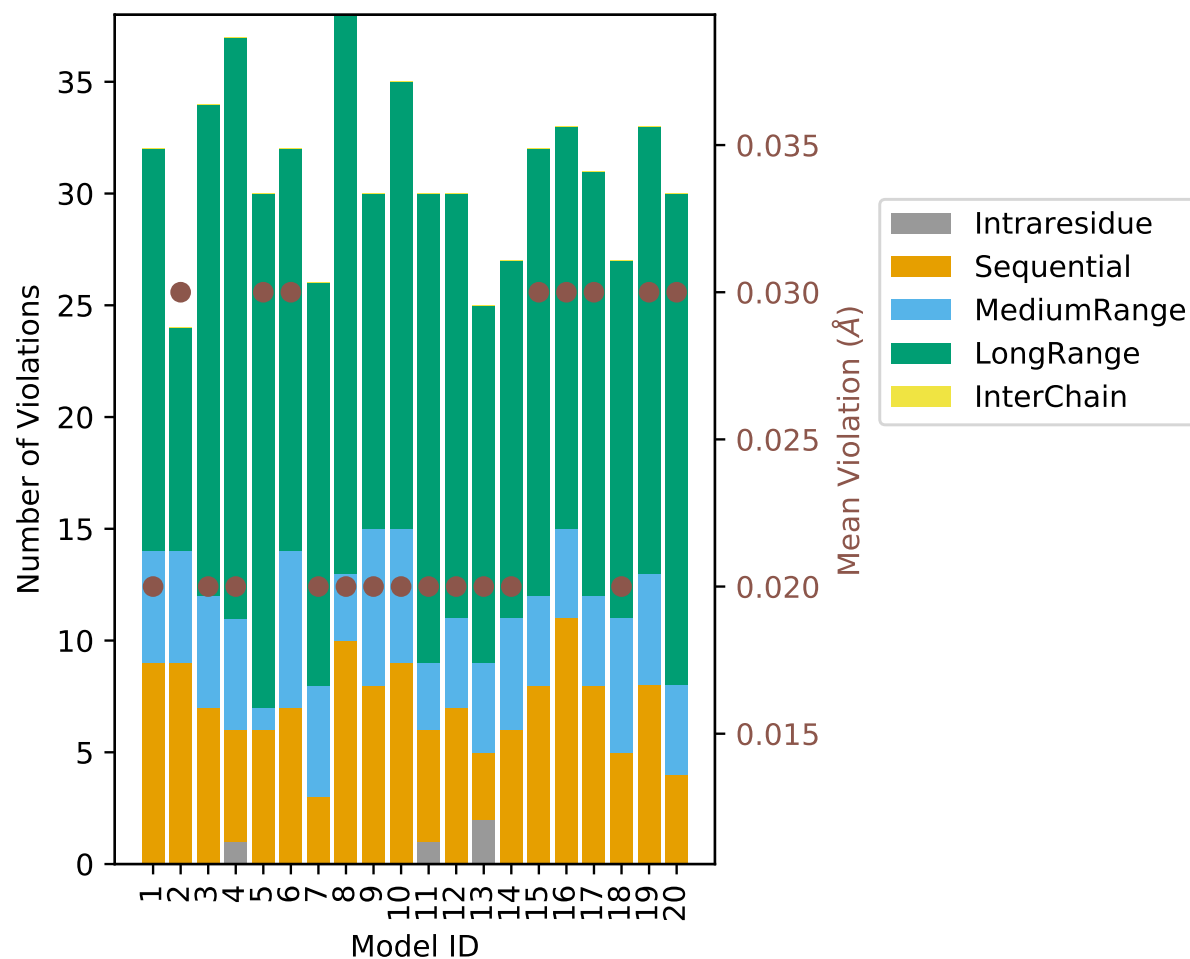
*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Model ID	No. of violations						Mean (Å)	Max (Å)
	IR <sup>1</sup>	SQ <sup>2</sup>	MR <sup>3</sup>	LR <sup>4</sup>	IC <sup>5</sup>	Total		
6	0	7	7	18	0	32	0.03	0.12
7	0	3	5	18	0	26	0.02	0.06
8	0	10	3	25	0	38	0.02	0.06
9	0	8	7	15	0	30	0.02	0.08
10	0	9	6	20	0	35	0.02	0.09
11	1	5	3	21	0	30	0.02	0.05
12	0	7	4	19	0	30	0.02	0.06
13	2	3	4	16	0	25	0.02	0.06
14	0	6	5	16	0	27	0.02	0.12
15	0	8	4	20	0	32	0.03	0.11
16	0	11	4	18	0	33	0.03	0.1
17	0	8	4	19	0	31	0.03	0.11
18	0	5	6	16	0	27	0.02	0.07
19	0	8	5	20	0	33	0.03	0.11
20	0	4	4	22	0	30	0.03	0.12

<sup>1</sup>intraresidue restraints, <sup>2</sup>iequential restraints, <sup>3</sup>iedium range restraints, <sup>4</sup>long range restraints,  
<sup>5</sup>inter chain restraints

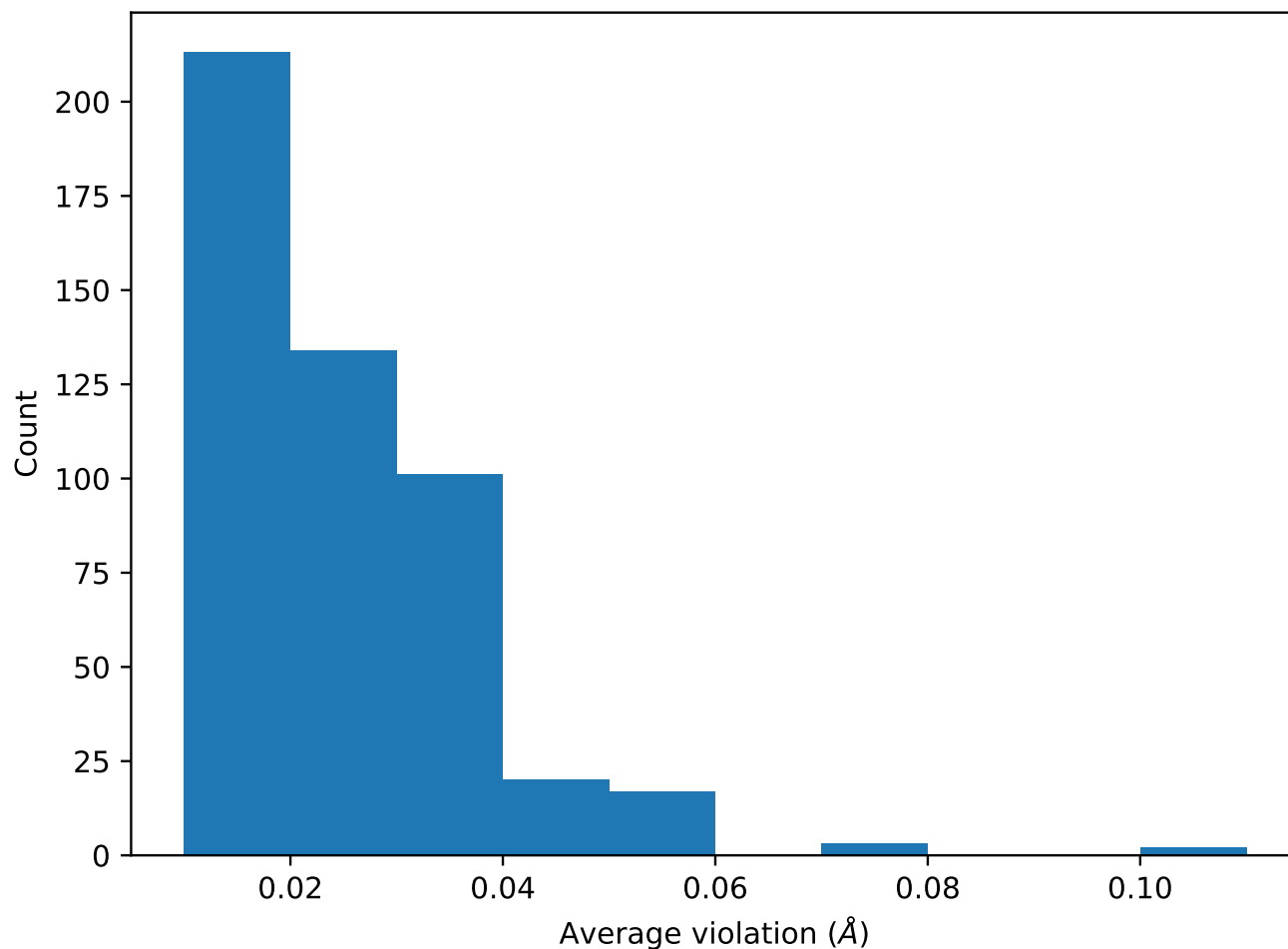
## 8.6.1 Bar graph : Violations in each model



## 8.7 Most violated distance restraints

### 8.7.1 Histogram : Distribution of mean distance violations

The following histogram shows the distribution of average violations of each restraint.



### 8.7.2 Table: Most violated distance restraints

The following table lists the average violation of each restraint sorted by number of violated models

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,330)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG21	19	0.04	0.11
(1,330)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG22	19	0.04	0.11
(1,330)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG23	19	0.04	0.11
(1,204)	1:A:17:ALA:HA	1:A:20:THR:HB	18	0.04	0.12
(1,196)	1:A:77:ILE:HG21	1:A:79:GLU:H	18	0.03	0.05
(1,196)	1:A:77:ILE:HG22	1:A:79:GLU:H	18	0.03	0.05

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,196)	1:A:77:ILE:HG23	1:A:79:GLU:H	18	0.03	0.05
(1,179)	1:A:24:SER:H	1:A:25:MET:HB2	17	0.04	0.07
(1,179)	1:A:24:SER:H	1:A:25:MET:HB3	17	0.04	0.07
(1,383)	1:A:35:VAL:HG11	1:A:80:ILE:HA	16	0.02	0.04
(1,383)	1:A:35:VAL:HG12	1:A:80:ILE:HA	16	0.02	0.04
(1,383)	1:A:35:VAL:HG13	1:A:80:ILE:HA	16	0.02	0.04
(1,818)	1:A:45:ASN:O	1:A:49:LEU:H	15	0.04	0.08
(1,174)	1:A:89:LEU:HG	1:A:90:GLU:H	15	0.03	0.06
(1,329)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG11	14	0.03	0.07
(1,329)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG12	14	0.03	0.07
(1,329)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG13	14	0.03	0.07
(1,539)	1:A:52:TYR:HB2	1:A:68:LYS:HD2	13	0.05	0.12
(1,539)	1:A:52:TYR:HB2	1:A:68:LYS:HD3	13	0.05	0.12
(1,539)	1:A:52:TYR:HB3	1:A:68:LYS:HD2	13	0.05	0.12
(1,539)	1:A:52:TYR:HB3	1:A:68:LYS:HD3	13	0.05	0.12
(1,781)	1:A:82:PRO:HA	1:A:83:ARG:HE	12	0.03	0.06
(1,779)	1:A:81:SER:HA	1:A:82:PRO:HA	12	0.04	0.07
(1,451)	1:A:16:ILE:HD11	1:A:18:LYS:HE2	12	0.02	0.04
(1,451)	1:A:16:ILE:HD11	1:A:18:LYS:HE3	12	0.02	0.04
(1,451)	1:A:16:ILE:HD12	1:A:18:LYS:HE2	12	0.02	0.04
(1,451)	1:A:16:ILE:HD12	1:A:18:LYS:HE3	12	0.02	0.04
(1,451)	1:A:16:ILE:HD13	1:A:18:LYS:HE2	12	0.02	0.04
(1,451)	1:A:16:ILE:HD13	1:A:18:LYS:HE3	12	0.02	0.04
(1,144)	1:A:49:LEU:HD11	1:A:50:PHE:H	12	0.02	0.04
(1,144)	1:A:49:LEU:HD12	1:A:50:PHE:H	12	0.02	0.04
(1,144)	1:A:49:LEU:HD13	1:A:50:PHE:H	12	0.02	0.04
(1,384)	1:A:37:THR:HA	1:A:78:VAL:HG11	11	0.03	0.05
(1,384)	1:A:37:THR:HA	1:A:78:VAL:HG12	11	0.03	0.05
(1,384)	1:A:37:THR:HA	1:A:78:VAL:HG13	11	0.03	0.05
(1,382)	1:A:33:VAL:HG11	1:A:51:ALA:HA	11	0.02	0.04
(1,382)	1:A:33:VAL:HG12	1:A:51:ALA:HA	11	0.02	0.04
(1,382)	1:A:33:VAL:HG13	1:A:51:ALA:HA	11	0.02	0.04
(1,227)	1:A:14:SER:HA	1:A:32:SER:H	11	0.02	0.04
(1,113)	1:A:11:LEU:HG	1:A:12:THR:H	11	0.04	0.06
(1,828)	1:A:50:PHE:O	1:A:70:GLU:H	10	0.03	0.04
(1,323)	1:A:25:MET:H	1:A:89:LEU:HD11	10	0.02	0.03
(1,323)	1:A:25:MET:H	1:A:89:LEU:HD12	10	0.02	0.03
(1,323)	1:A:25:MET:H	1:A:89:LEU:HD13	10	0.02	0.03
(1,159)	1:A:76:LYS:HD2	1:A:77:ILE:H	10	0.03	0.07
(1,159)	1:A:76:LYS:HD3	1:A:77:ILE:H	10	0.03	0.07
(1,830)	1:A:38:GLU:O	1:A:76:LYS:H	9	0.02	0.05
(1,281)	1:A:13:LEU:HD21	1:A:51:ALA:H	9	0.01	0.02

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,281)	1:A:13:LEU:HD22	1:A:51:ALA:H	9	0.01	0.02
(1,281)	1:A:13:LEU:HD23	1:A:51:ALA:H	9	0.01	0.02
(1,219)	1:A:54:ASP:H	1:A:66:GLU:H	9	0.02	0.04
(1,832)	1:A:36:LYS:O	1:A:79:GLU:H	8	0.02	0.06
(1,58)	1:A:56:SER:HA	1:A:57:GLY:H	8	0.03	0.03
(1,293)	1:A:26:ILE:HG12	1:A:90:GLU:H	8	0.02	0.04
(1,293)	1:A:26:ILE:HG13	1:A:90:GLU:H	8	0.02	0.04
(1,363)	1:A:17:ALA:HA	1:A:87:LEU:HD11	7	0.02	0.03
(1,363)	1:A:17:ALA:HA	1:A:87:LEU:HD12	7	0.02	0.03
(1,363)	1:A:17:ALA:HA	1:A:87:LEU:HD13	7	0.02	0.03
(1,520)	1:A:38:GLU:HG2	1:A:78:VAL:HG11	6	0.02	0.03
(1,520)	1:A:38:GLU:HG2	1:A:78:VAL:HG12	6	0.02	0.03
(1,520)	1:A:38:GLU:HG2	1:A:78:VAL:HG13	6	0.02	0.03
(1,520)	1:A:38:GLU:HG3	1:A:78:VAL:HG11	6	0.02	0.03
(1,520)	1:A:38:GLU:HG3	1:A:78:VAL:HG12	6	0.02	0.03
(1,520)	1:A:38:GLU:HG3	1:A:78:VAL:HG13	6	0.02	0.03
(1,505)	1:A:35:VAL:HG11	1:A:79:GLU:HB2	6	0.02	0.04
(1,505)	1:A:35:VAL:HG11	1:A:79:GLU:HB3	6	0.02	0.04
(1,505)	1:A:35:VAL:HG12	1:A:79:GLU:HB2	6	0.02	0.04
(1,505)	1:A:35:VAL:HG12	1:A:79:GLU:HB3	6	0.02	0.04
(1,505)	1:A:35:VAL:HG13	1:A:79:GLU:HB2	6	0.02	0.04
(1,505)	1:A:35:VAL:HG13	1:A:79:GLU:HB3	6	0.02	0.04
(1,362)	1:A:17:ALA:HA	1:A:55:LEU:HD21	6	0.01	0.02
(1,362)	1:A:17:ALA:HA	1:A:55:LEU:HD22	6	0.01	0.02
(1,362)	1:A:17:ALA:HA	1:A:55:LEU:HD23	6	0.01	0.02
(1,341)	1:A:61:GLY:H	1:A:89:LEU:HG	6	0.02	0.04
(1,314)	1:A:13:LEU:H	1:A:33:VAL:HB	6	0.02	0.02
(1,311)	1:A:11:LEU:H	1:A:35:VAL:HB	6	0.01	0.02
(1,175)	1:A:89:LEU:HD11	1:A:90:GLU:H	6	0.03	0.06
(1,175)	1:A:89:LEU:HD12	1:A:90:GLU:H	6	0.03	0.06
(1,175)	1:A:89:LEU:HD13	1:A:90:GLU:H	6	0.03	0.06
(1,802)	1:A:53:VAL:O	1:A:18:LYS:H	5	0.02	0.05
(1,798)	1:A:31:PRO:O	1:A:15:LEU:H	5	0.01	0.02
(1,533)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:49:LEU:HD11	5	0.03	0.04
(1,533)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:49:LEU:HD12	5	0.03	0.04
(1,533)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:49:LEU:HD13	5	0.03	0.04
(1,533)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:49:LEU:HD11	5	0.03	0.04
(1,533)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:49:LEU:HD12	5	0.03	0.04
(1,533)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:49:LEU:HD13	5	0.03	0.04
(1,533)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:49:LEU:HD11	5	0.03	0.04
(1,533)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:49:LEU:HD12	5	0.03	0.04
(1,533)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:49:LEU:HD13	5	0.03	0.04

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,523)	1:A:41:ASN:HB2	1:A:75:ILE:HG12	5	0.03	0.04
(1,523)	1:A:41:ASN:HB2	1:A:75:ILE:HG13	5	0.03	0.04
(1,523)	1:A:41:ASN:HB3	1:A:75:ILE:HG12	5	0.03	0.04
(1,523)	1:A:41:ASN:HB3	1:A:75:ILE:HG13	5	0.03	0.04
(1,369)	1:A:20:THR:HA	1:A:55:LEU:HD21	5	0.01	0.02
(1,369)	1:A:20:THR:HA	1:A:55:LEU:HD22	5	0.01	0.02
(1,369)	1:A:20:THR:HA	1:A:55:LEU:HD23	5	0.01	0.02
(1,34)	1:A:18:LYS:HA	1:A:19:ASN:H	5	0.03	0.04
(1,334)	1:A:40:TYR:H	1:A:75:ILE:HG12	5	0.01	0.01
(1,334)	1:A:40:TYR:H	1:A:75:ILE:HG13	5	0.01	0.01
(1,242)	1:A:11:LEU:H	1:A:34:ARG:HA	5	0.02	0.03
(1,224)	1:A:10:THR:HA	1:A:35:VAL:H	5	0.01	0.02
(1,1)	1:A:19:ASN:H	1:A:20:THR:H	5	0.06	0.12
(1,814)	1:A:14:SER:O	1:A:51:ALA:H	4	0.02	0.04
(1,71)	1:A:73:PRO:HA	1:A:74:ASN:H	4	0.1	0.12
(1,7)	1:A:43:SER:H	1:A:44:ILE:H	4	0.02	0.03
(1,557)	1:A:64:ASP:HB2	1:A:84:VAL:HG11	4	0.02	0.03
(1,557)	1:A:64:ASP:HB2	1:A:84:VAL:HG12	4	0.02	0.03
(1,557)	1:A:64:ASP:HB2	1:A:84:VAL:HG13	4	0.02	0.03
(1,557)	1:A:64:ASP:HB3	1:A:84:VAL:HG11	4	0.02	0.03
(1,557)	1:A:64:ASP:HB3	1:A:84:VAL:HG12	4	0.02	0.03
(1,557)	1:A:64:ASP:HB3	1:A:84:VAL:HG13	4	0.02	0.03
(1,490)	1:A:27:MET:HG2	1:A:90:GLU:HB2	4	0.02	0.03
(1,490)	1:A:27:MET:HG2	1:A:90:GLU:HB3	4	0.02	0.03
(1,490)	1:A:27:MET:HG3	1:A:90:GLU:HB2	4	0.02	0.03
(1,490)	1:A:27:MET:HG3	1:A:90:GLU:HB3	4	0.02	0.03
(1,462)	1:A:17:ALA:HB1	1:A:89:LEU:HD21	4	0.01	0.02
(1,462)	1:A:17:ALA:HB1	1:A:89:LEU:HD22	4	0.01	0.02
(1,462)	1:A:17:ALA:HB1	1:A:89:LEU:HD23	4	0.01	0.02
(1,462)	1:A:17:ALA:HB2	1:A:89:LEU:HD21	4	0.01	0.02
(1,462)	1:A:17:ALA:HB2	1:A:89:LEU:HD22	4	0.01	0.02
(1,462)	1:A:17:ALA:HB2	1:A:89:LEU:HD23	4	0.01	0.02
(1,462)	1:A:17:ALA:HB3	1:A:89:LEU:HD21	4	0.01	0.02
(1,462)	1:A:17:ALA:HB3	1:A:89:LEU:HD22	4	0.01	0.02
(1,462)	1:A:17:ALA:HB3	1:A:89:LEU:HD23	4	0.01	0.02
(1,410)	1:A:9:PRO:HD2	1:A:75:ILE:HD11	4	0.03	0.04
(1,410)	1:A:9:PRO:HD2	1:A:75:ILE:HD12	4	0.03	0.04
(1,410)	1:A:9:PRO:HD2	1:A:75:ILE:HD13	4	0.03	0.04
(1,410)	1:A:9:PRO:HD3	1:A:75:ILE:HD11	4	0.03	0.04
(1,410)	1:A:9:PRO:HD3	1:A:75:ILE:HD12	4	0.03	0.04
(1,410)	1:A:9:PRO:HD3	1:A:75:ILE:HD13	4	0.03	0.04
(1,409)	1:A:9:PRO:HD2	1:A:41:ASN:HD21	4	0.03	0.04

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,409)	1:A:9:PRO:HD2	1:A:41:ASN:HD22	4	0.03	0.04
(1,409)	1:A:9:PRO:HD3	1:A:41:ASN:HD21	4	0.03	0.04
(1,409)	1:A:9:PRO:HD3	1:A:41:ASN:HD22	4	0.03	0.04
(1,396)	1:A:60:PRO:HA	1:A:89:LEU:HD21	4	0.02	0.03
(1,396)	1:A:60:PRO:HA	1:A:89:LEU:HD22	4	0.02	0.03
(1,396)	1:A:60:PRO:HA	1:A:89:LEU:HD23	4	0.02	0.03
(1,263)	1:A:10:THR:HA	1:A:36:LYS:HA	4	0.02	0.04
(1,238)	1:A:63:HIS:HA	1:A:87:LEU:H	4	0.01	0.02
(1,192)	1:A:10:THR:HG21	1:A:12:THR:H	4	0.01	0.01
(1,192)	1:A:10:THR:HG22	1:A:12:THR:H	4	0.01	0.01
(1,192)	1:A:10:THR:HG23	1:A:12:THR:H	4	0.01	0.01
(1,157)	1:A:75:ILE:HD11	1:A:76:LYS:H	4	0.01	0.02
(1,157)	1:A:75:ILE:HD12	1:A:76:LYS:H	4	0.01	0.02
(1,157)	1:A:75:ILE:HD13	1:A:76:LYS:H	4	0.01	0.02
(1,820)	1:A:16:ILE:O	1:A:53:VAL:H	3	0.01	0.02
(1,759)	1:A:33:VAL:HG21	1:A:34:ARG:HB2	3	0.02	0.03
(1,759)	1:A:33:VAL:HG21	1:A:34:ARG:HB3	3	0.02	0.03
(1,759)	1:A:33:VAL:HG22	1:A:34:ARG:HB2	3	0.02	0.03
(1,759)	1:A:33:VAL:HG22	1:A:34:ARG:HB3	3	0.02	0.03
(1,759)	1:A:33:VAL:HG23	1:A:34:ARG:HB2	3	0.02	0.03
(1,759)	1:A:33:VAL:HG23	1:A:34:ARG:HB3	3	0.02	0.03
(1,569)	1:A:69:VAL:HG21	1:A:77:ILE:HG12	3	0.02	0.03
(1,569)	1:A:69:VAL:HG21	1:A:77:ILE:HG13	3	0.02	0.03
(1,569)	1:A:69:VAL:HG22	1:A:77:ILE:HG12	3	0.02	0.03
(1,569)	1:A:69:VAL:HG22	1:A:77:ILE:HG13	3	0.02	0.03
(1,569)	1:A:69:VAL:HG23	1:A:77:ILE:HG12	3	0.02	0.03
(1,569)	1:A:69:VAL:HG23	1:A:77:ILE:HG13	3	0.02	0.03
(1,552)	1:A:58:SER:HB2	1:A:89:LEU:HD11	3	0.02	0.04
(1,552)	1:A:58:SER:HB2	1:A:89:LEU:HD12	3	0.02	0.04
(1,552)	1:A:58:SER:HB2	1:A:89:LEU:HD13	3	0.02	0.04
(1,552)	1:A:58:SER:HB3	1:A:89:LEU:HD11	3	0.02	0.04
(1,552)	1:A:58:SER:HB3	1:A:89:LEU:HD12	3	0.02	0.04
(1,552)	1:A:58:SER:HB3	1:A:89:LEU:HD13	3	0.02	0.04
(1,548)	1:A:55:LEU:HD11	1:A:89:LEU:HG	3	0.02	0.04
(1,548)	1:A:55:LEU:HD12	1:A:89:LEU:HG	3	0.02	0.04
(1,548)	1:A:55:LEU:HD13	1:A:89:LEU:HG	3	0.02	0.04
(1,543)	1:A:53:VAL:HG11	1:A:55:LEU:HD11	3	0.01	0.01
(1,543)	1:A:53:VAL:HG11	1:A:55:LEU:HD12	3	0.01	0.01
(1,543)	1:A:53:VAL:HG11	1:A:55:LEU:HD13	3	0.01	0.01
(1,543)	1:A:53:VAL:HG12	1:A:55:LEU:HD11	3	0.01	0.01
(1,543)	1:A:53:VAL:HG12	1:A:55:LEU:HD12	3	0.01	0.01
(1,543)	1:A:53:VAL:HG12	1:A:55:LEU:HD13	3	0.01	0.01

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,543)	1:A:53:VAL:HG13	1:A:55:LEU:HD11	3	0.01	0.01
(1,543)	1:A:53:VAL:HG13	1:A:55:LEU:HD12	3	0.01	0.01
(1,543)	1:A:53:VAL:HG13	1:A:55:LEU:HD13	3	0.01	0.01
(1,531)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:49:LEU:HG	3	0.02	0.03
(1,531)	1:A:46:VAL:HG12	1:A:49:LEU:HG	3	0.02	0.03
(1,531)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:49:LEU:HG	3	0.02	0.03
(1,512)	1:A:37:THR:HB	1:A:75:ILE:HG21	3	0.01	0.02
(1,512)	1:A:37:THR:HB	1:A:75:ILE:HG22	3	0.01	0.02
(1,512)	1:A:37:THR:HB	1:A:75:ILE:HG23	3	0.01	0.02
(1,496)	1:A:31:PRO:HG2	1:A:85:VAL:HG21	3	0.01	0.02
(1,496)	1:A:31:PRO:HG2	1:A:85:VAL:HG22	3	0.01	0.02
(1,496)	1:A:31:PRO:HG2	1:A:85:VAL:HG23	3	0.01	0.02
(1,496)	1:A:31:PRO:HG3	1:A:85:VAL:HG21	3	0.01	0.02
(1,496)	1:A:31:PRO:HG3	1:A:85:VAL:HG22	3	0.01	0.02
(1,496)	1:A:31:PRO:HG3	1:A:85:VAL:HG23	3	0.01	0.02
(1,470)	1:A:20:THR:HG21	1:A:89:LEU:HD11	3	0.03	0.04
(1,470)	1:A:20:THR:HG21	1:A:89:LEU:HD12	3	0.03	0.04
(1,470)	1:A:20:THR:HG21	1:A:89:LEU:HD13	3	0.03	0.04
(1,470)	1:A:20:THR:HG22	1:A:89:LEU:HD11	3	0.03	0.04
(1,470)	1:A:20:THR:HG22	1:A:89:LEU:HD12	3	0.03	0.04
(1,470)	1:A:20:THR:HG22	1:A:89:LEU:HD13	3	0.03	0.04
(1,470)	1:A:20:THR:HG23	1:A:89:LEU:HD11	3	0.03	0.04
(1,470)	1:A:20:THR:HG23	1:A:89:LEU:HD12	3	0.03	0.04
(1,470)	1:A:20:THR:HG23	1:A:89:LEU:HD13	3	0.03	0.04
(1,435)	1:A:15:LEU:HB2	1:A:33:VAL:HG21	3	0.02	0.04
(1,435)	1:A:15:LEU:HB2	1:A:33:VAL:HG22	3	0.02	0.04
(1,435)	1:A:15:LEU:HB2	1:A:33:VAL:HG23	3	0.02	0.04
(1,435)	1:A:15:LEU:HB3	1:A:33:VAL:HG21	3	0.02	0.04
(1,435)	1:A:15:LEU:HB3	1:A:33:VAL:HG22	3	0.02	0.04
(1,435)	1:A:15:LEU:HB3	1:A:33:VAL:HG23	3	0.02	0.04
(1,386)	1:A:37:THR:HG21	1:A:77:ILE:HA	3	0.01	0.01
(1,386)	1:A:37:THR:HG22	1:A:77:ILE:HA	3	0.01	0.01
(1,386)	1:A:37:THR:HG23	1:A:77:ILE:HA	3	0.01	0.01
(1,347)	1:A:40:TYR:HD1	1:A:7:ARG:HA	3	0.02	0.03
(1,347)	1:A:40:TYR:HD2	1:A:7:ARG:HA	3	0.02	0.03
(1,317)	1:A:17:ALA:H	1:A:30:LEU:HD21	3	0.01	0.01
(1,317)	1:A:17:ALA:H	1:A:30:LEU:HD22	3	0.01	0.01
(1,317)	1:A:17:ALA:H	1:A:30:LEU:HD23	3	0.01	0.01
(1,253)	1:A:40:TYR:H	1:A:75:ILE:HA	3	0.03	0.05
(1,829)	1:A:50:PHE:O	1:A:70:GLU:N	2	0.01	0.01
(1,750)	1:A:22:ALA:HB1	1:A:23:ASN:HD21	2	0.05	0.06
(1,750)	1:A:22:ALA:HB1	1:A:23:ASN:HD22	2	0.05	0.06

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,750)	1:A:22:ALA:HB2	1:A:23:ASN:HD21	2	0.05	0.06
(1,750)	1:A:22:ALA:HB2	1:A:23:ASN:HD22	2	0.05	0.06
(1,750)	1:A:22:ALA:HB3	1:A:23:ASN:HD21	2	0.05	0.06
(1,750)	1:A:22:ALA:HB3	1:A:23:ASN:HD22	2	0.05	0.06
(1,650)	1:A:44:ILE:H	1:A:44:ILE:HB	2	0.03	0.03
(1,527)	1:A:44:ILE:HG12	1:A:75:ILE:HG12	2	0.01	0.02
(1,527)	1:A:44:ILE:HG12	1:A:75:ILE:HG13	2	0.01	0.02
(1,527)	1:A:44:ILE:HG13	1:A:75:ILE:HG12	2	0.01	0.02
(1,527)	1:A:44:ILE:HG13	1:A:75:ILE:HG13	2	0.01	0.02
(1,524)	1:A:41:ASN:HB2	1:A:75:ILE:HD11	2	0.01	0.02
(1,524)	1:A:41:ASN:HB2	1:A:75:ILE:HD12	2	0.01	0.02
(1,524)	1:A:41:ASN:HB2	1:A:75:ILE:HD13	2	0.01	0.02
(1,524)	1:A:41:ASN:HB3	1:A:75:ILE:HD11	2	0.01	0.02
(1,524)	1:A:41:ASN:HB3	1:A:75:ILE:HD12	2	0.01	0.02
(1,524)	1:A:41:ASN:HB3	1:A:75:ILE:HD13	2	0.01	0.02
(1,519)	1:A:38:GLU:HG2	1:A:78:VAL:HG21	2	0.01	0.02
(1,519)	1:A:38:GLU:HG2	1:A:78:VAL:HG22	2	0.01	0.02
(1,519)	1:A:38:GLU:HG2	1:A:78:VAL:HG23	2	0.01	0.02
(1,519)	1:A:38:GLU:HG3	1:A:78:VAL:HG21	2	0.01	0.02
(1,519)	1:A:38:GLU:HG3	1:A:78:VAL:HG22	2	0.01	0.02
(1,519)	1:A:38:GLU:HG3	1:A:78:VAL:HG23	2	0.01	0.02
(1,506)	1:A:36:LYS:HB2	1:A:78:VAL:HB	2	0.02	0.03
(1,506)	1:A:36:LYS:HB3	1:A:78:VAL:HB	2	0.02	0.03
(1,494)	1:A:30:LEU:HD11	1:A:53:VAL:HG11	2	0.01	0.02
(1,494)	1:A:30:LEU:HD11	1:A:53:VAL:HG12	2	0.01	0.02
(1,494)	1:A:30:LEU:HD11	1:A:53:VAL:HG13	2	0.01	0.02
(1,494)	1:A:30:LEU:HD12	1:A:53:VAL:HG11	2	0.01	0.02
(1,494)	1:A:30:LEU:HD12	1:A:53:VAL:HG12	2	0.01	0.02
(1,494)	1:A:30:LEU:HD12	1:A:53:VAL:HG13	2	0.01	0.02
(1,494)	1:A:30:LEU:HD13	1:A:53:VAL:HG11	2	0.01	0.02
(1,494)	1:A:30:LEU:HD13	1:A:53:VAL:HG12	2	0.01	0.02
(1,494)	1:A:30:LEU:HD13	1:A:53:VAL:HG13	2	0.01	0.02
(1,469)	1:A:20:THR:HG21	1:A:55:LEU:HD21	2	0.03	0.06
(1,469)	1:A:20:THR:HG21	1:A:55:LEU:HD22	2	0.03	0.06
(1,469)	1:A:20:THR:HG21	1:A:55:LEU:HD23	2	0.03	0.06
(1,469)	1:A:20:THR:HG22	1:A:55:LEU:HD21	2	0.03	0.06
(1,469)	1:A:20:THR:HG22	1:A:55:LEU:HD22	2	0.03	0.06
(1,469)	1:A:20:THR:HG22	1:A:55:LEU:HD23	2	0.03	0.06
(1,469)	1:A:20:THR:HG23	1:A:55:LEU:HD21	2	0.03	0.06
(1,469)	1:A:20:THR:HG23	1:A:55:LEU:HD22	2	0.03	0.06
(1,469)	1:A:20:THR:HG23	1:A:55:LEU:HD23	2	0.03	0.06
(1,468)	1:A:20:THR:HG21	1:A:55:LEU:HD11	2	0.01	0.01

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,468)	1:A:20:THR:HG21	1:A:55:LEU:HD12	2	0.01	0.01
(1,468)	1:A:20:THR:HG21	1:A:55:LEU:HD13	2	0.01	0.01
(1,468)	1:A:20:THR:HG22	1:A:55:LEU:HD11	2	0.01	0.01
(1,468)	1:A:20:THR:HG22	1:A:55:LEU:HD12	2	0.01	0.01
(1,468)	1:A:20:THR:HG22	1:A:55:LEU:HD13	2	0.01	0.01
(1,468)	1:A:20:THR:HG23	1:A:55:LEU:HD11	2	0.01	0.01
(1,468)	1:A:20:THR:HG23	1:A:55:LEU:HD12	2	0.01	0.01
(1,468)	1:A:20:THR:HG23	1:A:55:LEU:HD13	2	0.01	0.01
(1,419)	1:A:11:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HB	2	0.02	0.02
(1,419)	1:A:11:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HB	2	0.02	0.02
(1,419)	1:A:11:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HB	2	0.02	0.02
(1,416)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:35:VAL:HG21	2	0.03	0.06
(1,416)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:35:VAL:HG22	2	0.03	0.06
(1,416)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:35:VAL:HG23	2	0.03	0.06
(1,416)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:35:VAL:HG21	2	0.03	0.06
(1,416)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:35:VAL:HG22	2	0.03	0.06
(1,416)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:35:VAL:HG23	2	0.03	0.06
(1,405)	1:A:71:PRO:HA	1:A:77:ILE:HD11	2	0.01	0.02
(1,405)	1:A:71:PRO:HA	1:A:77:ILE:HD12	2	0.01	0.02
(1,405)	1:A:71:PRO:HA	1:A:77:ILE:HD13	2	0.01	0.02
(1,404)	1:A:71:PRO:HA	1:A:77:ILE:HG21	2	0.01	0.01
(1,404)	1:A:71:PRO:HA	1:A:77:ILE:HG22	2	0.01	0.01
(1,404)	1:A:71:PRO:HA	1:A:77:ILE:HG23	2	0.01	0.01
(1,395)	1:A:60:PRO:HA	1:A:89:LEU:HB2	2	0.02	0.02
(1,395)	1:A:60:PRO:HA	1:A:89:LEU:HB3	2	0.02	0.02
(1,394)	1:A:58:SER:HA	1:A:89:LEU:HD11	2	0.01	0.01
(1,394)	1:A:58:SER:HA	1:A:89:LEU:HD12	2	0.01	0.01
(1,394)	1:A:58:SER:HA	1:A:89:LEU:HD13	2	0.01	0.01
(1,380)	1:A:33:VAL:HA	1:A:67:VAL:HG11	2	0.03	0.03
(1,380)	1:A:33:VAL:HA	1:A:67:VAL:HG12	2	0.03	0.03
(1,380)	1:A:33:VAL:HA	1:A:67:VAL:HG13	2	0.03	0.03
(1,374)	1:A:26:ILE:HA	1:A:89:LEU:HG	2	0.03	0.04
(1,371)	1:A:21:PRO:HG2	1:A:56:SER:HA	2	0.01	0.02
(1,371)	1:A:21:PRO:HG3	1:A:56:SER:HA	2	0.01	0.02
(1,36)	1:A:23:ASN:HA	1:A:24:SER:H	2	0.01	0.01
(1,340)	1:A:61:GLY:H	1:A:89:LEU:HB2	2	0.03	0.03
(1,340)	1:A:61:GLY:H	1:A:89:LEU:HB3	2	0.03	0.03
(1,297)	1:A:35:VAL:HG11	1:A:79:GLU:H	2	0.01	0.01
(1,297)	1:A:35:VAL:HG12	1:A:79:GLU:H	2	0.01	0.01
(1,297)	1:A:35:VAL:HG13	1:A:79:GLU:H	2	0.01	0.01
(1,289)	1:A:21:PRO:HG2	1:A:58:SER:H	2	0.02	0.03
(1,289)	1:A:21:PRO:HG3	1:A:58:SER:H	2	0.02	0.03

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,275)	1:A:10:THR:HG21	1:A:37:THR:H	2	0.01	0.01
(1,275)	1:A:10:THR:HG22	1:A:37:THR:H	2	0.01	0.01
(1,275)	1:A:10:THR:HG23	1:A:37:THR:H	2	0.01	0.01
(1,271)	1:A:64:ASP:HA	1:A:86:THR:HA	2	0.01	0.02
(1,193)	1:A:26:ILE:HG21	1:A:28:THR:H	2	0.01	0.02
(1,193)	1:A:26:ILE:HG22	1:A:28:THR:H	2	0.01	0.02
(1,193)	1:A:26:ILE:HG23	1:A:28:THR:H	2	0.01	0.02
(1,184)	1:A:48:GLU:H	1:A:49:LEU:HD21	2	0.01	0.01
(1,184)	1:A:48:GLU:H	1:A:49:LEU:HD22	2	0.01	0.01
(1,184)	1:A:48:GLU:H	1:A:49:LEU:HD23	2	0.01	0.01
(1,18)	1:A:74:ASN:H	1:A:75:ILE:H	2	0.04	0.04
(1,92)	1:A:73:PRO:HA	1:A:75:ILE:H	1	0.02	0.02
(1,91)	1:A:54:ASP:HA	1:A:56:SER:H	1	0.04	0.04
(1,85)	1:A:18:LYS:HA	1:A:20:THR:H	1	0.11	0.11
(1,838)	1:A:61:GLY:O	1:A:89:LEU:H	1	0.02	0.02
(1,826)	1:A:52:TYR:O	1:A:68:LYS:H	1	0.02	0.02
(1,756)	1:A:30:LEU:HD21	1:A:31:PRO:HD2	1	0.01	0.01
(1,756)	1:A:30:LEU:HD22	1:A:31:PRO:HD2	1	0.01	0.01
(1,756)	1:A:30:LEU:HD23	1:A:31:PRO:HD2	1	0.01	0.01
(1,682)	1:A:59:GLU:H	1:A:59:GLU:HG2	1	0.02	0.02
(1,682)	1:A:59:GLU:H	1:A:59:GLU:HG3	1	0.02	0.02
(1,628)	1:A:28:THR:H	1:A:28:THR:HB	1	0.03	0.03
(1,578)	1:A:82:PRO:HG2	1:A:85:VAL:HG11	1	0.01	0.01
(1,578)	1:A:82:PRO:HG2	1:A:85:VAL:HG12	1	0.01	0.01
(1,578)	1:A:82:PRO:HG2	1:A:85:VAL:HG13	1	0.01	0.01
(1,578)	1:A:82:PRO:HG3	1:A:85:VAL:HG11	1	0.01	0.01
(1,578)	1:A:82:PRO:HG3	1:A:85:VAL:HG12	1	0.01	0.01
(1,578)	1:A:82:PRO:HG3	1:A:85:VAL:HG13	1	0.01	0.01
(1,576)	1:A:76:LYS:HD2	1:A:78:VAL:HG21	1	0.04	0.04
(1,576)	1:A:76:LYS:HD2	1:A:78:VAL:HG22	1	0.04	0.04
(1,576)	1:A:76:LYS:HD2	1:A:78:VAL:HG23	1	0.04	0.04
(1,576)	1:A:76:LYS:HD3	1:A:78:VAL:HG21	1	0.04	0.04
(1,576)	1:A:76:LYS:HD3	1:A:78:VAL:HG22	1	0.04	0.04
(1,576)	1:A:76:LYS:HD3	1:A:78:VAL:HG23	1	0.04	0.04
(1,572)	1:A:72:ILE:HG21	1:A:75:ILE:HB	1	0.01	0.01
(1,572)	1:A:72:ILE:HG22	1:A:75:ILE:HB	1	0.01	0.01
(1,572)	1:A:72:ILE:HG23	1:A:75:ILE:HB	1	0.01	0.01
(1,565)	1:A:66:GLU:HG2	1:A:84:VAL:HG21	1	0.01	0.01
(1,565)	1:A:66:GLU:HG2	1:A:84:VAL:HG22	1	0.01	0.01
(1,565)	1:A:66:GLU:HG2	1:A:84:VAL:HG23	1	0.01	0.01
(1,565)	1:A:66:GLU:HG3	1:A:84:VAL:HG21	1	0.01	0.01
(1,565)	1:A:66:GLU:HG3	1:A:84:VAL:HG22	1	0.01	0.01

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,565)	1:A:66:GLU:HG3	1:A:84:VAL:HG23	1	0.01	0.01
(1,555)	1:A:62:GLU:HG2	1:A:86:THR:HG21	1	0.01	0.01
(1,555)	1:A:62:GLU:HG2	1:A:86:THR:HG22	1	0.01	0.01
(1,555)	1:A:62:GLU:HG2	1:A:86:THR:HG23	1	0.01	0.01
(1,555)	1:A:62:GLU:HG3	1:A:86:THR:HG21	1	0.01	0.01
(1,555)	1:A:62:GLU:HG3	1:A:86:THR:HG22	1	0.01	0.01
(1,555)	1:A:62:GLU:HG3	1:A:86:THR:HG23	1	0.01	0.01
(1,554)	1:A:62:GLU:HB2	1:A:86:THR:HG21	1	0.01	0.01
(1,554)	1:A:62:GLU:HB2	1:A:86:THR:HG22	1	0.01	0.01
(1,554)	1:A:62:GLU:HB2	1:A:86:THR:HG23	1	0.01	0.01
(1,554)	1:A:62:GLU:HB3	1:A:86:THR:HG21	1	0.01	0.01
(1,554)	1:A:62:GLU:HB3	1:A:86:THR:HG22	1	0.01	0.01
(1,554)	1:A:62:GLU:HB3	1:A:86:THR:HG23	1	0.01	0.01
(1,550)	1:A:55:LEU:HD21	1:A:89:LEU:HD11	1	0.01	0.01
(1,550)	1:A:55:LEU:HD21	1:A:89:LEU:HD12	1	0.01	0.01
(1,550)	1:A:55:LEU:HD21	1:A:89:LEU:HD13	1	0.01	0.01
(1,550)	1:A:55:LEU:HD22	1:A:89:LEU:HD11	1	0.01	0.01
(1,550)	1:A:55:LEU:HD22	1:A:89:LEU:HD12	1	0.01	0.01
(1,550)	1:A:55:LEU:HD22	1:A:89:LEU:HD13	1	0.01	0.01
(1,550)	1:A:55:LEU:HD23	1:A:89:LEU:HD11	1	0.01	0.01
(1,550)	1:A:55:LEU:HD23	1:A:89:LEU:HD12	1	0.01	0.01
(1,550)	1:A:55:LEU:HD23	1:A:89:LEU:HD13	1	0.01	0.01
(1,547)	1:A:55:LEU:HD21	1:A:87:LEU:HD11	1	0.02	0.02
(1,547)	1:A:55:LEU:HD21	1:A:87:LEU:HD12	1	0.02	0.02
(1,547)	1:A:55:LEU:HD21	1:A:87:LEU:HD13	1	0.02	0.02
(1,547)	1:A:55:LEU:HD22	1:A:87:LEU:HD11	1	0.02	0.02
(1,547)	1:A:55:LEU:HD22	1:A:87:LEU:HD12	1	0.02	0.02
(1,547)	1:A:55:LEU:HD22	1:A:87:LEU:HD13	1	0.02	0.02
(1,547)	1:A:55:LEU:HD23	1:A:87:LEU:HD11	1	0.02	0.02
(1,547)	1:A:55:LEU:HD23	1:A:87:LEU:HD12	1	0.02	0.02
(1,547)	1:A:55:LEU:HD23	1:A:87:LEU:HD13	1	0.02	0.02
(1,538)	1:A:51:ALA:HB1	1:A:69:VAL:HG21	1	0.01	0.01
(1,538)	1:A:51:ALA:HB1	1:A:69:VAL:HG22	1	0.01	0.01
(1,538)	1:A:51:ALA:HB1	1:A:69:VAL:HG23	1	0.01	0.01
(1,538)	1:A:51:ALA:HB2	1:A:69:VAL:HG21	1	0.01	0.01
(1,538)	1:A:51:ALA:HB2	1:A:69:VAL:HG22	1	0.01	0.01
(1,538)	1:A:51:ALA:HB2	1:A:69:VAL:HG23	1	0.01	0.01
(1,538)	1:A:51:ALA:HB3	1:A:69:VAL:HG21	1	0.01	0.01
(1,538)	1:A:51:ALA:HB3	1:A:69:VAL:HG22	1	0.01	0.01
(1,538)	1:A:51:ALA:HB3	1:A:69:VAL:HG23	1	0.01	0.01
(1,534)	1:A:49:LEU:HD11	1:A:72:ILE:HD11	1	0.01	0.01
(1,534)	1:A:49:LEU:HD11	1:A:72:ILE:HD12	1	0.01	0.01

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,534)	1:A:49:LEU:HD11	1:A:72:ILE:HD13	1	0.01	0.01
(1,534)	1:A:49:LEU:HD12	1:A:72:ILE:HD11	1	0.01	0.01
(1,534)	1:A:49:LEU:HD12	1:A:72:ILE:HD12	1	0.01	0.01
(1,534)	1:A:49:LEU:HD12	1:A:72:ILE:HD13	1	0.01	0.01
(1,534)	1:A:49:LEU:HD13	1:A:72:ILE:HD11	1	0.01	0.01
(1,534)	1:A:49:LEU:HD13	1:A:72:ILE:HD12	1	0.01	0.01
(1,534)	1:A:49:LEU:HD13	1:A:72:ILE:HD13	1	0.01	0.01
(1,529)	1:A:44:ILE:HG21	1:A:75:ILE:HG12	1	0.02	0.02
(1,529)	1:A:44:ILE:HG21	1:A:75:ILE:HG13	1	0.02	0.02
(1,529)	1:A:44:ILE:HG22	1:A:75:ILE:HG12	1	0.02	0.02
(1,529)	1:A:44:ILE:HG22	1:A:75:ILE:HG13	1	0.02	0.02
(1,529)	1:A:44:ILE:HG23	1:A:75:ILE:HG12	1	0.02	0.02
(1,529)	1:A:44:ILE:HG23	1:A:75:ILE:HG13	1	0.02	0.02
(1,528)	1:A:44:ILE:HG21	1:A:46:VAL:HG11	1	0.03	0.03
(1,528)	1:A:44:ILE:HG21	1:A:46:VAL:HG12	1	0.03	0.03
(1,528)	1:A:44:ILE:HG21	1:A:46:VAL:HG13	1	0.03	0.03
(1,528)	1:A:44:ILE:HG22	1:A:46:VAL:HG11	1	0.03	0.03
(1,528)	1:A:44:ILE:HG22	1:A:46:VAL:HG12	1	0.03	0.03
(1,528)	1:A:44:ILE:HG22	1:A:46:VAL:HG13	1	0.03	0.03
(1,528)	1:A:44:ILE:HG23	1:A:46:VAL:HG11	1	0.03	0.03
(1,528)	1:A:44:ILE:HG23	1:A:46:VAL:HG12	1	0.03	0.03
(1,528)	1:A:44:ILE:HG23	1:A:46:VAL:HG13	1	0.03	0.03
(1,526)	1:A:44:ILE:HG12	1:A:72:ILE:HG21	1	0.03	0.03
(1,526)	1:A:44:ILE:HG12	1:A:72:ILE:HG22	1	0.03	0.03
(1,526)	1:A:44:ILE:HG12	1:A:72:ILE:HG23	1	0.03	0.03
(1,526)	1:A:44:ILE:HG13	1:A:72:ILE:HG21	1	0.03	0.03
(1,526)	1:A:44:ILE:HG13	1:A:72:ILE:HG22	1	0.03	0.03
(1,526)	1:A:44:ILE:HG13	1:A:72:ILE:HG23	1	0.03	0.03
(1,525)	1:A:41:ASN:HD21	1:A:44:ILE:HD11	1	0.01	0.01
(1,525)	1:A:41:ASN:HD21	1:A:44:ILE:HD12	1	0.01	0.01
(1,525)	1:A:41:ASN:HD21	1:A:44:ILE:HD13	1	0.01	0.01
(1,525)	1:A:41:ASN:HD22	1:A:44:ILE:HD11	1	0.01	0.01
(1,525)	1:A:41:ASN:HD22	1:A:44:ILE:HD12	1	0.01	0.01
(1,525)	1:A:41:ASN:HD22	1:A:44:ILE:HD13	1	0.01	0.01
(1,511)	1:A:36:LYS:HE2	1:A:78:VAL:HG21	1	0.06	0.06
(1,511)	1:A:36:LYS:HE2	1:A:78:VAL:HG22	1	0.06	0.06
(1,511)	1:A:36:LYS:HE2	1:A:78:VAL:HG23	1	0.06	0.06
(1,511)	1:A:36:LYS:HE3	1:A:78:VAL:HG21	1	0.06	0.06
(1,511)	1:A:36:LYS:HE3	1:A:78:VAL:HG22	1	0.06	0.06
(1,511)	1:A:36:LYS:HE3	1:A:78:VAL:HG23	1	0.06	0.06
(1,501)	1:A:33:VAL:HG11	1:A:82:PRO:HD2	1	0.01	0.01
(1,501)	1:A:33:VAL:HG11	1:A:82:PRO:HD3	1	0.01	0.01

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,501)	1:A:33:VAL:HG12	1:A:82:PRO:HD2	1	0.01	0.01
(1,501)	1:A:33:VAL:HG12	1:A:82:PRO:HD3	1	0.01	0.01
(1,501)	1:A:33:VAL:HG13	1:A:82:PRO:HD2	1	0.01	0.01
(1,501)	1:A:33:VAL:HG13	1:A:82:PRO:HD3	1	0.01	0.01
(1,477)	1:A:26:ILE:HB	1:A:30:LEU:HD11	1	0.02	0.02
(1,477)	1:A:26:ILE:HB	1:A:30:LEU:HD12	1	0.02	0.02
(1,477)	1:A:26:ILE:HB	1:A:30:LEU:HD13	1	0.02	0.02
(1,441)	1:A:15:LEU:HD21	1:A:31:PRO:HB2	1	0.01	0.01
(1,441)	1:A:15:LEU:HD21	1:A:31:PRO:HB3	1	0.01	0.01
(1,441)	1:A:15:LEU:HD22	1:A:31:PRO:HB2	1	0.01	0.01
(1,441)	1:A:15:LEU:HD22	1:A:31:PRO:HB3	1	0.01	0.01
(1,441)	1:A:15:LEU:HD23	1:A:31:PRO:HB2	1	0.01	0.01
(1,441)	1:A:15:LEU:HD23	1:A:31:PRO:HB3	1	0.01	0.01
(1,425)	1:A:13:LEU:HD21	1:A:49:LEU:HB2	1	0.02	0.02
(1,425)	1:A:13:LEU:HD21	1:A:49:LEU:HB3	1	0.02	0.02
(1,425)	1:A:13:LEU:HD22	1:A:49:LEU:HB2	1	0.02	0.02
(1,425)	1:A:13:LEU:HD22	1:A:49:LEU:HB3	1	0.02	0.02
(1,425)	1:A:13:LEU:HD23	1:A:49:LEU:HB2	1	0.02	0.02
(1,425)	1:A:13:LEU:HD23	1:A:49:LEU:HB3	1	0.02	0.02
(1,414)	1:A:10:THR:HG21	1:A:34:ARG:HE	1	0.07	0.07
(1,414)	1:A:10:THR:HG22	1:A:34:ARG:HE	1	0.07	0.07
(1,414)	1:A:10:THR:HG23	1:A:34:ARG:HE	1	0.07	0.07
(1,412)	1:A:10:THR:HG21	1:A:34:ARG:HG2	1	0.01	0.01
(1,412)	1:A:10:THR:HG21	1:A:34:ARG:HG3	1	0.01	0.01
(1,412)	1:A:10:THR:HG22	1:A:34:ARG:HG2	1	0.01	0.01
(1,412)	1:A:10:THR:HG22	1:A:34:ARG:HG3	1	0.01	0.01
(1,412)	1:A:10:THR:HG23	1:A:34:ARG:HG2	1	0.01	0.01
(1,412)	1:A:10:THR:HG23	1:A:34:ARG:HG3	1	0.01	0.01
(1,373)	1:A:25:MET:HE1	1:A:92:HIS:HA	1	0.03	0.03
(1,373)	1:A:25:MET:HE2	1:A:92:HIS:HA	1	0.03	0.03
(1,373)	1:A:25:MET:HE3	1:A:92:HIS:HA	1	0.03	0.03
(1,372)	1:A:25:MET:HE1	1:A:27:MET:HA	1	0.04	0.04
(1,372)	1:A:25:MET:HE2	1:A:27:MET:HA	1	0.04	0.04
(1,372)	1:A:25:MET:HE3	1:A:27:MET:HA	1	0.04	0.04
(1,370)	1:A:20:THR:HG21	1:A:25:MET:HA	1	0.03	0.03
(1,370)	1:A:20:THR:HG22	1:A:25:MET:HA	1	0.03	0.03
(1,370)	1:A:20:THR:HG23	1:A:25:MET:HA	1	0.03	0.03
(1,342)	1:A:61:GLY:H	1:A:89:LEU:HD11	1	0.01	0.01
(1,342)	1:A:61:GLY:H	1:A:89:LEU:HD12	1	0.01	0.01
(1,342)	1:A:61:GLY:H	1:A:89:LEU:HD13	1	0.01	0.01
(1,327)	1:A:34:ARG:H	1:A:81:SER:HB2	1	0.01	0.01
(1,327)	1:A:34:ARG:H	1:A:81:SER:HB3	1	0.01	0.01

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

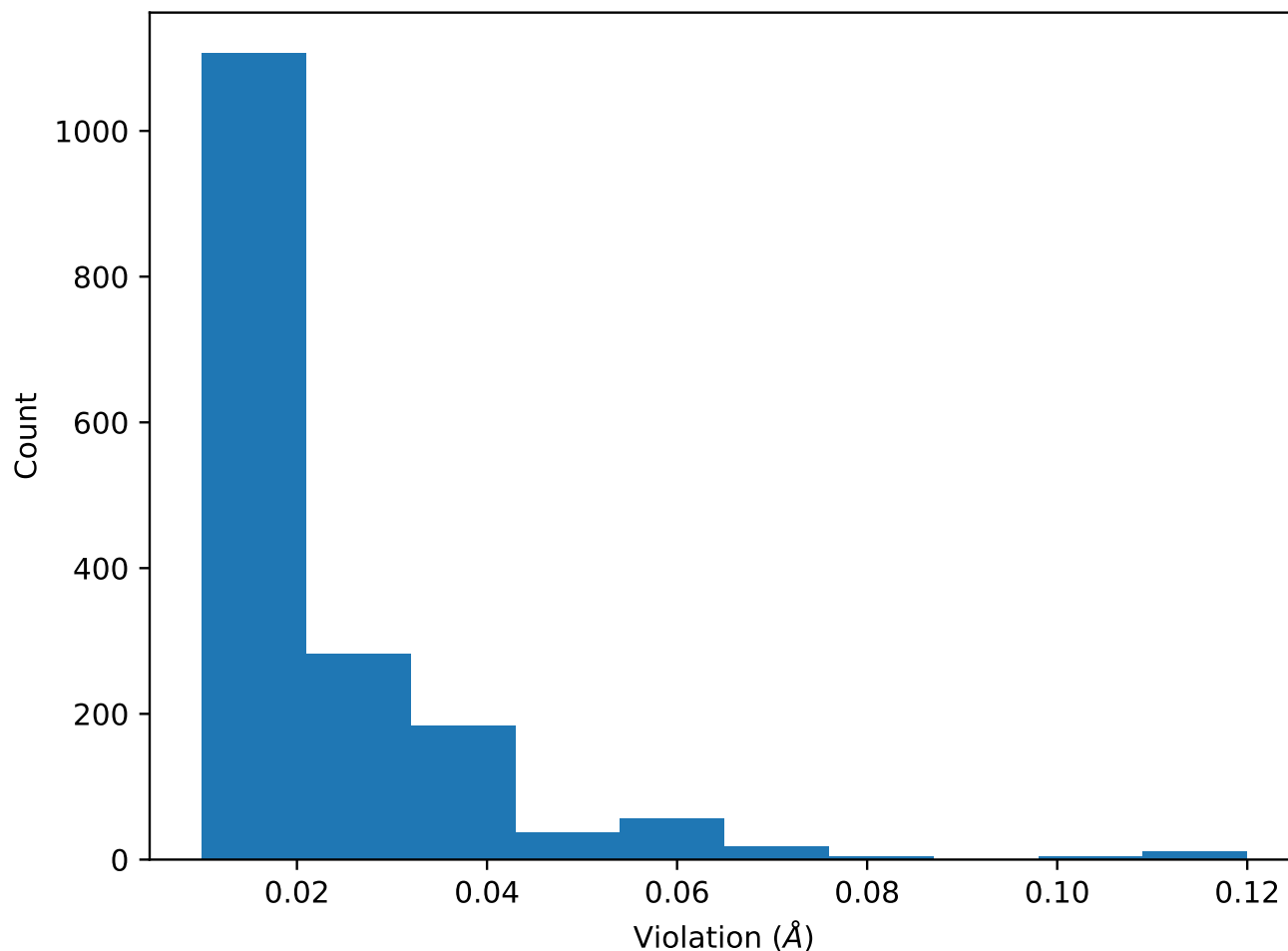
Key	Atom-1	Atom-2	Models	Mean (Å)	Max (Å)
(1,322)	1:A:23:ASN:H	1:A:92:HIS:HB2	1	0.01	0.01
(1,322)	1:A:23:ASN:H	1:A:92:HIS:HB3	1	0.01	0.01
(1,320)	1:A:18:LYS:H	1:A:55:LEU:HD11	1	0.02	0.02
(1,320)	1:A:18:LYS:H	1:A:55:LEU:HD12	1	0.02	0.02
(1,320)	1:A:18:LYS:H	1:A:55:LEU:HD13	1	0.02	0.02
(1,300)	1:A:37:THR:HB	1:A:78:VAL:H	1	0.02	0.02
(1,286)	1:A:18:LYS:HB2	1:A:55:LEU:H	1	0.03	0.03
(1,286)	1:A:18:LYS:HB3	1:A:55:LEU:H	1	0.03	0.03
(1,276)	1:A:12:THR:HG21	1:A:33:VAL:H	1	0.03	0.03
(1,276)	1:A:12:THR:HG22	1:A:33:VAL:H	1	0.03	0.03
(1,276)	1:A:12:THR:HG23	1:A:33:VAL:H	1	0.03	0.03
(1,270)	1:A:62:GLU:HA	1:A:88:GLN:HA	1	0.01	0.01
(1,261)	1:A:67:VAL:H	1:A:84:VAL:HA	1	0.01	0.01
(1,258)	1:A:65:TYR:H	1:A:84:VAL:HA	1	0.02	0.02
(1,239)	1:A:64:ASP:HA	1:A:85:VAL:H	1	0.01	0.01
(1,202)	1:A:72:ILE:HG21	1:A:75:ILE:H	1	0.01	0.01
(1,202)	1:A:72:ILE:HG22	1:A:75:ILE:H	1	0.01	0.01
(1,202)	1:A:72:ILE:HG23	1:A:75:ILE:H	1	0.01	0.01
(1,194)	1:A:44:ILE:HG21	1:A:46:VAL:H	1	0.01	0.01
(1,194)	1:A:44:ILE:HG22	1:A:46:VAL:H	1	0.01	0.01
(1,194)	1:A:44:ILE:HG23	1:A:46:VAL:H	1	0.01	0.01
(1,181)	1:A:43:SER:H	1:A:44:ILE:HB	1	0.01	0.01



## 8.8 All distance violations

### 8.8.1 Histogram : Distribution of distance violations

The following histogram shows the distribution of violations in the ensemble.



### 8.8.2 Table : All distance violations

The following table lists the violations in the ensemble sorted by violation value

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,71)	1:A:73:PRO:HA	1:A:74:ASN:H	6	0.12
(1,539)	1:A:52:TYR:HB2	1:A:68:LYS:HD2	20	0.12
(1,539)	1:A:52:TYR:HB2	1:A:68:LYS:HD3	20	0.12
(1,539)	1:A:52:TYR:HB3	1:A:68:LYS:HD2	20	0.12
(1,539)	1:A:52:TYR:HB3	1:A:68:LYS:HD3	20	0.12
(1,204)	1:A:17:ALA:HA	1:A:20:THR:HB	14	0.12
(1,1)	1:A:19:ASN:H	1:A:20:THR:H	14	0.12

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,85)	1:A:18:LYS:HA	1:A:20:THR:H	17	0.11
(1,71)	1:A:73:PRO:HA	1:A:74:ASN:H	15	0.11
(1,330)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG21	19	0.11
(1,330)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG22	19	0.11
(1,330)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG23	19	0.11
(1,539)	1:A:52:TYR:HB2	1:A:68:LYS:HD2	16	0.1
(1,539)	1:A:52:TYR:HB2	1:A:68:LYS:HD3	16	0.1
(1,539)	1:A:52:TYR:HB3	1:A:68:LYS:HD2	16	0.1
(1,539)	1:A:52:TYR:HB3	1:A:68:LYS:HD3	16	0.1
(1,71)	1:A:73:PRO:HA	1:A:74:ASN:H	10	0.09
(1,818)	1:A:45:ASN:O	1:A:49:LEU:H	6	0.08
(1,818)	1:A:45:ASN:O	1:A:49:LEU:H	9	0.08
(1,818)	1:A:45:ASN:O	1:A:49:LEU:H	15	0.08
(1,71)	1:A:73:PRO:HA	1:A:74:ASN:H	17	0.08
(1,818)	1:A:45:ASN:O	1:A:49:LEU:H	3	0.07
(1,779)	1:A:81:SER:HA	1:A:82:PRO:HA	10	0.07
(1,539)	1:A:52:TYR:HB2	1:A:68:LYS:HD2	17	0.07
(1,539)	1:A:52:TYR:HB2	1:A:68:LYS:HD3	17	0.07
(1,539)	1:A:52:TYR:HB3	1:A:68:LYS:HD2	17	0.07
(1,539)	1:A:52:TYR:HB3	1:A:68:LYS:HD3	17	0.07
(1,414)	1:A:10:THR:HG21	1:A:34:ARG:HE	5	0.07
(1,414)	1:A:10:THR:HG22	1:A:34:ARG:HE	5	0.07
(1,414)	1:A:10:THR:HG23	1:A:34:ARG:HE	5	0.07
(1,329)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG11	19	0.07
(1,329)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG12	19	0.07
(1,329)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG13	19	0.07
(1,179)	1:A:24:SER:H	1:A:25:MET:HB2	10	0.07
(1,179)	1:A:24:SER:H	1:A:25:MET:HB3	10	0.07
(1,179)	1:A:24:SER:H	1:A:25:MET:HB2	18	0.07
(1,179)	1:A:24:SER:H	1:A:25:MET:HB3	18	0.07
(1,159)	1:A:76:LYS:HD2	1:A:77:ILE:H	15	0.07
(1,159)	1:A:76:LYS:HD3	1:A:77:ILE:H	15	0.07
(1,832)	1:A:36:LYS:O	1:A:79:GLU:H	17	0.06
(1,818)	1:A:45:ASN:O	1:A:49:LEU:H	8	0.06
(1,781)	1:A:82:PRO:HA	1:A:83:ARG:HE	4	0.06
(1,779)	1:A:81:SER:HA	1:A:82:PRO:HA	2	0.06
(1,779)	1:A:81:SER:HA	1:A:82:PRO:HA	12	0.06
(1,779)	1:A:81:SER:HA	1:A:82:PRO:HA	16	0.06
(1,750)	1:A:22:ALA:HB1	1:A:23:ASN:HD21	16	0.06
(1,750)	1:A:22:ALA:HB1	1:A:23:ASN:HD22	16	0.06
(1,750)	1:A:22:ALA:HB2	1:A:23:ASN:HD21	16	0.06
(1,750)	1:A:22:ALA:HB2	1:A:23:ASN:HD22	16	0.06

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,750)	1:A:22:ALA:HB3	1:A:23:ASN:HD21	16	0.06
(1,750)	1:A:22:ALA:HB3	1:A:23:ASN:HD22	16	0.06
(1,539)	1:A:52:TYR:HB2	1:A:68:LYS:HD2	9	0.06
(1,539)	1:A:52:TYR:HB2	1:A:68:LYS:HD3	9	0.06
(1,539)	1:A:52:TYR:HB3	1:A:68:LYS:HD2	9	0.06
(1,539)	1:A:52:TYR:HB3	1:A:68:LYS:HD3	9	0.06
(1,511)	1:A:36:LYS:HE2	1:A:78:VAL:HG21	5	0.06
(1,511)	1:A:36:LYS:HE2	1:A:78:VAL:HG22	5	0.06
(1,511)	1:A:36:LYS:HE2	1:A:78:VAL:HG23	5	0.06
(1,511)	1:A:36:LYS:HE3	1:A:78:VAL:HG21	5	0.06
(1,511)	1:A:36:LYS:HE3	1:A:78:VAL:HG22	5	0.06
(1,511)	1:A:36:LYS:HE3	1:A:78:VAL:HG23	5	0.06
(1,469)	1:A:20:THR:HG21	1:A:55:LEU:HD21	20	0.06
(1,469)	1:A:20:THR:HG21	1:A:55:LEU:HD22	20	0.06
(1,469)	1:A:20:THR:HG21	1:A:55:LEU:HD23	20	0.06
(1,469)	1:A:20:THR:HG22	1:A:55:LEU:HD21	20	0.06
(1,469)	1:A:20:THR:HG22	1:A:55:LEU:HD22	20	0.06
(1,469)	1:A:20:THR:HG22	1:A:55:LEU:HD23	20	0.06
(1,469)	1:A:20:THR:HG23	1:A:55:LEU:HD21	20	0.06
(1,469)	1:A:20:THR:HG23	1:A:55:LEU:HD22	20	0.06
(1,469)	1:A:20:THR:HG23	1:A:55:LEU:HD23	20	0.06
(1,416)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:35:VAL:HG21	5	0.06
(1,416)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:35:VAL:HG22	5	0.06
(1,416)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:35:VAL:HG23	5	0.06
(1,416)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:35:VAL:HG21	5	0.06
(1,416)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:35:VAL:HG22	5	0.06
(1,416)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:35:VAL:HG23	5	0.06
(1,330)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG21	13	0.06
(1,330)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG22	13	0.06
(1,330)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG23	13	0.06
(1,204)	1:A:17:ALA:HA	1:A:20:THR:HB	13	0.06
(1,179)	1:A:24:SER:H	1:A:25:MET:HB2	5	0.06
(1,179)	1:A:24:SER:H	1:A:25:MET:HB3	5	0.06
(1,179)	1:A:24:SER:H	1:A:25:MET:HB2	19	0.06
(1,179)	1:A:24:SER:H	1:A:25:MET:HB3	19	0.06
(1,179)	1:A:24:SER:H	1:A:25:MET:HB2	20	0.06
(1,179)	1:A:24:SER:H	1:A:25:MET:HB3	20	0.06
(1,175)	1:A:89:LEU:HD11	1:A:90:GLU:H	19	0.06
(1,175)	1:A:89:LEU:HD12	1:A:90:GLU:H	19	0.06
(1,175)	1:A:89:LEU:HD13	1:A:90:GLU:H	19	0.06
(1,174)	1:A:89:LEU:HG	1:A:90:GLU:H	1	0.06
(1,113)	1:A:11:LEU:HG	1:A:12:THR:H	2	0.06

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,113)	1:A:11:LEU:HG	1:A:12:THR:H	7	0.06
(1,113)	1:A:11:LEU:HG	1:A:12:THR:H	19	0.06
(1,1)	1:A:19:ASN:H	1:A:20:THR:H	8	0.06
(1,1)	1:A:19:ASN:H	1:A:20:THR:H	16	0.06
(1,830)	1:A:38:GLU:O	1:A:76:LYS:H	19	0.05
(1,818)	1:A:45:ASN:O	1:A:49:LEU:H	13	0.05
(1,818)	1:A:45:ASN:O	1:A:49:LEU:H	16	0.05
(1,802)	1:A:53:VAL:O	1:A:18:LYS:H	11	0.05
(1,781)	1:A:82:PRO:HA	1:A:83:ARG:HE	19	0.05
(1,779)	1:A:81:SER:HA	1:A:82:PRO:HA	17	0.05
(1,779)	1:A:81:SER:HA	1:A:82:PRO:HA	19	0.05
(1,539)	1:A:52:TYR:HB2	1:A:68:LYS:HD2	4	0.05
(1,539)	1:A:52:TYR:HB2	1:A:68:LYS:HD3	4	0.05
(1,539)	1:A:52:TYR:HB3	1:A:68:LYS:HD2	4	0.05
(1,539)	1:A:52:TYR:HB3	1:A:68:LYS:HD3	4	0.05
(1,384)	1:A:37:THR:HA	1:A:78:VAL:HG11	15	0.05
(1,384)	1:A:37:THR:HA	1:A:78:VAL:HG12	15	0.05
(1,384)	1:A:37:THR:HA	1:A:78:VAL:HG13	15	0.05
(1,384)	1:A:37:THR:HA	1:A:78:VAL:HG11	16	0.05
(1,384)	1:A:37:THR:HA	1:A:78:VAL:HG12	16	0.05
(1,384)	1:A:37:THR:HA	1:A:78:VAL:HG13	16	0.05
(1,330)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG21	6	0.05
(1,330)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG22	6	0.05
(1,330)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG23	6	0.05
(1,330)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG21	12	0.05
(1,330)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG22	12	0.05
(1,330)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG23	12	0.05
(1,253)	1:A:40:TYR:H	1:A:75:ILE:HA	1	0.05
(1,204)	1:A:17:ALA:HA	1:A:20:THR:HB	8	0.05
(1,204)	1:A:17:ALA:HA	1:A:20:THR:HB	18	0.05
(1,196)	1:A:77:ILE:HG21	1:A:79:GLU:H	17	0.05
(1,196)	1:A:77:ILE:HG22	1:A:79:GLU:H	17	0.05
(1,196)	1:A:77:ILE:HG23	1:A:79:GLU:H	17	0.05
(1,179)	1:A:24:SER:H	1:A:25:MET:HB2	2	0.05
(1,179)	1:A:24:SER:H	1:A:25:MET:HB3	2	0.05
(1,179)	1:A:24:SER:H	1:A:25:MET:HB2	6	0.05
(1,179)	1:A:24:SER:H	1:A:25:MET:HB3	6	0.05
(1,179)	1:A:24:SER:H	1:A:25:MET:HB2	16	0.05
(1,179)	1:A:24:SER:H	1:A:25:MET:HB3	16	0.05
(1,159)	1:A:76:LYS:HD2	1:A:77:ILE:H	2	0.05
(1,159)	1:A:76:LYS:HD3	1:A:77:ILE:H	2	0.05
(1,113)	1:A:11:LEU:HG	1:A:12:THR:H	5	0.05

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,91)	1:A:54:ASP:HA	1:A:56:SER:H	12	0.04
(1,828)	1:A:50:PHE:O	1:A:70:GLU:H	10	0.04
(1,818)	1:A:45:ASN:O	1:A:49:LEU:H	17	0.04
(1,818)	1:A:45:ASN:O	1:A:49:LEU:H	20	0.04
(1,814)	1:A:14:SER:O	1:A:51:ALA:H	16	0.04
(1,779)	1:A:81:SER:HA	1:A:82:PRO:HA	15	0.04
(1,750)	1:A:22:ALA:HB1	1:A:23:ASN:HD21	10	0.04
(1,750)	1:A:22:ALA:HB1	1:A:23:ASN:HD22	10	0.04
(1,750)	1:A:22:ALA:HB2	1:A:23:ASN:HD21	10	0.04
(1,750)	1:A:22:ALA:HB2	1:A:23:ASN:HD22	10	0.04
(1,750)	1:A:22:ALA:HB3	1:A:23:ASN:HD21	10	0.04
(1,750)	1:A:22:ALA:HB3	1:A:23:ASN:HD22	10	0.04
(1,576)	1:A:76:LYS:HD2	1:A:78:VAL:HG21	6	0.04
(1,576)	1:A:76:LYS:HD2	1:A:78:VAL:HG22	6	0.04
(1,576)	1:A:76:LYS:HD2	1:A:78:VAL:HG23	6	0.04
(1,576)	1:A:76:LYS:HD3	1:A:78:VAL:HG21	6	0.04
(1,576)	1:A:76:LYS:HD3	1:A:78:VAL:HG22	6	0.04
(1,576)	1:A:76:LYS:HD3	1:A:78:VAL:HG23	6	0.04
(1,552)	1:A:58:SER:HB2	1:A:89:LEU:HD11	13	0.04
(1,552)	1:A:58:SER:HB2	1:A:89:LEU:HD12	13	0.04
(1,552)	1:A:58:SER:HB2	1:A:89:LEU:HD13	13	0.04
(1,552)	1:A:58:SER:HB3	1:A:89:LEU:HD11	13	0.04
(1,552)	1:A:58:SER:HB3	1:A:89:LEU:HD12	13	0.04
(1,552)	1:A:58:SER:HB3	1:A:89:LEU:HD13	13	0.04
(1,548)	1:A:55:LEU:HD11	1:A:89:LEU:HG	17	0.04
(1,548)	1:A:55:LEU:HD12	1:A:89:LEU:HG	17	0.04
(1,548)	1:A:55:LEU:HD13	1:A:89:LEU:HG	17	0.04
(1,539)	1:A:52:TYR:HB2	1:A:68:LYS:HD2	1	0.04
(1,539)	1:A:52:TYR:HB2	1:A:68:LYS:HD3	1	0.04
(1,539)	1:A:52:TYR:HB3	1:A:68:LYS:HD2	1	0.04
(1,539)	1:A:52:TYR:HB3	1:A:68:LYS:HD3	1	0.04
(1,539)	1:A:52:TYR:HB2	1:A:68:LYS:HD2	5	0.04
(1,539)	1:A:52:TYR:HB2	1:A:68:LYS:HD3	5	0.04
(1,539)	1:A:52:TYR:HB3	1:A:68:LYS:HD2	5	0.04
(1,539)	1:A:52:TYR:HB3	1:A:68:LYS:HD3	5	0.04
(1,539)	1:A:52:TYR:HB2	1:A:68:LYS:HD2	11	0.04
(1,539)	1:A:52:TYR:HB2	1:A:68:LYS:HD3	11	0.04
(1,539)	1:A:52:TYR:HB3	1:A:68:LYS:HD2	11	0.04
(1,539)	1:A:52:TYR:HB3	1:A:68:LYS:HD3	11	0.04
(1,533)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:49:LEU:HD11	1	0.04
(1,533)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:49:LEU:HD12	1	0.04
(1,533)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:49:LEU:HD13	1	0.04

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,533)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:49:LEU:HD11	1	0.04
(1,533)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:49:LEU:HD12	1	0.04
(1,533)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:49:LEU:HD13	1	0.04
(1,533)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:49:LEU:HD11	1	0.04
(1,533)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:49:LEU:HD12	1	0.04
(1,533)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:49:LEU:HD13	1	0.04
(1,523)	1:A:41:ASN:HB2	1:A:75:ILE:HG12	7	0.04
(1,523)	1:A:41:ASN:HB2	1:A:75:ILE:HG13	7	0.04
(1,523)	1:A:41:ASN:HB3	1:A:75:ILE:HG12	7	0.04
(1,523)	1:A:41:ASN:HB3	1:A:75:ILE:HG13	7	0.04
(1,505)	1:A:35:VAL:HG11	1:A:79:GLU:HB2	8	0.04
(1,505)	1:A:35:VAL:HG11	1:A:79:GLU:HB3	8	0.04
(1,505)	1:A:35:VAL:HG12	1:A:79:GLU:HB2	8	0.04
(1,505)	1:A:35:VAL:HG12	1:A:79:GLU:HB3	8	0.04
(1,505)	1:A:35:VAL:HG13	1:A:79:GLU:HB2	8	0.04
(1,505)	1:A:35:VAL:HG13	1:A:79:GLU:HB3	8	0.04
(1,505)	1:A:35:VAL:HG11	1:A:79:GLU:HB2	15	0.04
(1,505)	1:A:35:VAL:HG11	1:A:79:GLU:HB3	15	0.04
(1,505)	1:A:35:VAL:HG12	1:A:79:GLU:HB2	15	0.04
(1,505)	1:A:35:VAL:HG12	1:A:79:GLU:HB3	15	0.04
(1,505)	1:A:35:VAL:HG13	1:A:79:GLU:HB2	15	0.04
(1,505)	1:A:35:VAL:HG13	1:A:79:GLU:HB3	15	0.04
(1,470)	1:A:20:THR:HG21	1:A:89:LEU:HD11	17	0.04
(1,470)	1:A:20:THR:HG21	1:A:89:LEU:HD12	17	0.04
(1,470)	1:A:20:THR:HG21	1:A:89:LEU:HD13	17	0.04
(1,470)	1:A:20:THR:HG22	1:A:89:LEU:HD11	17	0.04
(1,470)	1:A:20:THR:HG22	1:A:89:LEU:HD12	17	0.04
(1,470)	1:A:20:THR:HG22	1:A:89:LEU:HD13	17	0.04
(1,470)	1:A:20:THR:HG23	1:A:89:LEU:HD11	17	0.04
(1,470)	1:A:20:THR:HG23	1:A:89:LEU:HD12	17	0.04
(1,470)	1:A:20:THR:HG23	1:A:89:LEU:HD13	17	0.04
(1,451)	1:A:16:ILE:HD11	1:A:18:LYS:HE2	6	0.04
(1,451)	1:A:16:ILE:HD11	1:A:18:LYS:HE3	6	0.04
(1,451)	1:A:16:ILE:HD12	1:A:18:LYS:HE2	6	0.04
(1,451)	1:A:16:ILE:HD12	1:A:18:LYS:HE3	6	0.04
(1,451)	1:A:16:ILE:HD13	1:A:18:LYS:HE2	6	0.04
(1,451)	1:A:16:ILE:HD13	1:A:18:LYS:HE3	6	0.04
(1,435)	1:A:15:LEU:HB2	1:A:33:VAL:HG21	1	0.04
(1,435)	1:A:15:LEU:HB2	1:A:33:VAL:HG22	1	0.04
(1,435)	1:A:15:LEU:HB2	1:A:33:VAL:HG23	1	0.04
(1,435)	1:A:15:LEU:HB3	1:A:33:VAL:HG21	1	0.04
(1,435)	1:A:15:LEU:HB3	1:A:33:VAL:HG22	1	0.04

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,435)	1:A:15:LEU:HB3	1:A:33:VAL:HG23	1	0.04
(1,410)	1:A:9:PRO:HD2	1:A:75:ILE:HD11	19	0.04
(1,410)	1:A:9:PRO:HD2	1:A:75:ILE:HD12	19	0.04
(1,410)	1:A:9:PRO:HD2	1:A:75:ILE:HD13	19	0.04
(1,410)	1:A:9:PRO:HD3	1:A:75:ILE:HD11	19	0.04
(1,410)	1:A:9:PRO:HD3	1:A:75:ILE:HD12	19	0.04
(1,410)	1:A:9:PRO:HD3	1:A:75:ILE:HD13	19	0.04
(1,409)	1:A:9:PRO:HD2	1:A:41:ASN:HD21	9	0.04
(1,409)	1:A:9:PRO:HD2	1:A:41:ASN:HD22	9	0.04
(1,409)	1:A:9:PRO:HD3	1:A:41:ASN:HD21	9	0.04
(1,409)	1:A:9:PRO:HD3	1:A:41:ASN:HD22	9	0.04
(1,409)	1:A:9:PRO:HD2	1:A:41:ASN:HD21	11	0.04
(1,409)	1:A:9:PRO:HD2	1:A:41:ASN:HD22	11	0.04
(1,409)	1:A:9:PRO:HD3	1:A:41:ASN:HD21	11	0.04
(1,409)	1:A:9:PRO:HD3	1:A:41:ASN:HD22	11	0.04
(1,384)	1:A:37:THR:HA	1:A:78:VAL:HG11	2	0.04
(1,384)	1:A:37:THR:HA	1:A:78:VAL:HG12	2	0.04
(1,384)	1:A:37:THR:HA	1:A:78:VAL:HG13	2	0.04
(1,384)	1:A:37:THR:HA	1:A:78:VAL:HG11	6	0.04
(1,384)	1:A:37:THR:HA	1:A:78:VAL:HG12	6	0.04
(1,384)	1:A:37:THR:HA	1:A:78:VAL:HG13	6	0.04
(1,383)	1:A:35:VAL:HG11	1:A:80:ILE:HA	3	0.04
(1,383)	1:A:35:VAL:HG12	1:A:80:ILE:HA	3	0.04
(1,383)	1:A:35:VAL:HG13	1:A:80:ILE:HA	3	0.04
(1,383)	1:A:35:VAL:HG11	1:A:80:ILE:HA	8	0.04
(1,383)	1:A:35:VAL:HG12	1:A:80:ILE:HA	8	0.04
(1,383)	1:A:35:VAL:HG13	1:A:80:ILE:HA	8	0.04
(1,383)	1:A:35:VAL:HG11	1:A:80:ILE:HA	20	0.04
(1,383)	1:A:35:VAL:HG12	1:A:80:ILE:HA	20	0.04
(1,383)	1:A:35:VAL:HG13	1:A:80:ILE:HA	20	0.04
(1,382)	1:A:33:VAL:HG11	1:A:51:ALA:HA	17	0.04
(1,382)	1:A:33:VAL:HG12	1:A:51:ALA:HA	17	0.04
(1,382)	1:A:33:VAL:HG13	1:A:51:ALA:HA	17	0.04
(1,382)	1:A:33:VAL:HG11	1:A:51:ALA:HA	20	0.04
(1,382)	1:A:33:VAL:HG12	1:A:51:ALA:HA	20	0.04
(1,382)	1:A:33:VAL:HG13	1:A:51:ALA:HA	20	0.04
(1,374)	1:A:26:ILE:HA	1:A:89:LEU:HG	7	0.04
(1,372)	1:A:25:MET:HE1	1:A:27:MET:HA	9	0.04
(1,372)	1:A:25:MET:HE2	1:A:27:MET:HA	9	0.04
(1,372)	1:A:25:MET:HE3	1:A:27:MET:HA	9	0.04
(1,341)	1:A:61:GLY:H	1:A:89:LEU:HG	8	0.04
(1,34)	1:A:18:LYS:HA	1:A:19:ASN:H	12	0.04

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,330)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG21	1	0.04
(1,330)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG22	1	0.04
(1,330)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG23	1	0.04
(1,330)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG21	10	0.04
(1,330)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG22	10	0.04
(1,330)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG23	10	0.04
(1,330)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG21	20	0.04
(1,330)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG22	20	0.04
(1,330)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG23	20	0.04
(1,329)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG11	12	0.04
(1,329)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG12	12	0.04
(1,329)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG13	12	0.04
(1,293)	1:A:26:ILE:HG12	1:A:90:GLU:H	3	0.04
(1,293)	1:A:26:ILE:HG13	1:A:90:GLU:H	3	0.04
(1,293)	1:A:26:ILE:HG12	1:A:90:GLU:H	5	0.04
(1,293)	1:A:26:ILE:HG13	1:A:90:GLU:H	5	0.04
(1,263)	1:A:10:THR:HA	1:A:36:LYS:HA	2	0.04
(1,227)	1:A:14:SER:HA	1:A:32:SER:H	1	0.04
(1,227)	1:A:14:SER:HA	1:A:32:SER:H	2	0.04
(1,227)	1:A:14:SER:HA	1:A:32:SER:H	5	0.04
(1,219)	1:A:54:ASP:H	1:A:66:GLU:H	3	0.04
(1,219)	1:A:54:ASP:H	1:A:66:GLU:H	8	0.04
(1,204)	1:A:17:ALA:HA	1:A:20:THR:HB	2	0.04
(1,204)	1:A:17:ALA:HA	1:A:20:THR:HB	3	0.04
(1,204)	1:A:17:ALA:HA	1:A:20:THR:HB	7	0.04
(1,196)	1:A:77:ILE:HG21	1:A:79:GLU:H	1	0.04
(1,196)	1:A:77:ILE:HG22	1:A:79:GLU:H	1	0.04
(1,196)	1:A:77:ILE:HG23	1:A:79:GLU:H	1	0.04
(1,196)	1:A:77:ILE:HG21	1:A:79:GLU:H	6	0.04
(1,196)	1:A:77:ILE:HG22	1:A:79:GLU:H	6	0.04
(1,196)	1:A:77:ILE:HG23	1:A:79:GLU:H	6	0.04
(1,196)	1:A:77:ILE:HG21	1:A:79:GLU:H	9	0.04
(1,196)	1:A:77:ILE:HG22	1:A:79:GLU:H	9	0.04
(1,196)	1:A:77:ILE:HG23	1:A:79:GLU:H	9	0.04
(1,196)	1:A:77:ILE:HG21	1:A:79:GLU:H	19	0.04
(1,196)	1:A:77:ILE:HG22	1:A:79:GLU:H	19	0.04
(1,196)	1:A:77:ILE:HG23	1:A:79:GLU:H	19	0.04
(1,18)	1:A:74:ASN:H	1:A:75:ILE:H	10	0.04
(1,18)	1:A:74:ASN:H	1:A:75:ILE:H	15	0.04
(1,179)	1:A:24:SER:H	1:A:25:MET:HB2	9	0.04
(1,179)	1:A:24:SER:H	1:A:25:MET:HB3	9	0.04
(1,179)	1:A:24:SER:H	1:A:25:MET:HB2	17	0.04

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,179)	1:A:24:SER:H	1:A:25:MET:HB3	17	0.04
(1,174)	1:A:89:LEU:HG	1:A:90:GLU:H	3	0.04
(1,174)	1:A:89:LEU:HG	1:A:90:GLU:H	4	0.04
(1,174)	1:A:89:LEU:HG	1:A:90:GLU:H	9	0.04
(1,174)	1:A:89:LEU:HG	1:A:90:GLU:H	13	0.04
(1,174)	1:A:89:LEU:HG	1:A:90:GLU:H	14	0.04
(1,174)	1:A:89:LEU:HG	1:A:90:GLU:H	15	0.04
(1,174)	1:A:89:LEU:HG	1:A:90:GLU:H	19	0.04
(1,159)	1:A:76:LYS:HD2	1:A:77:ILE:H	5	0.04
(1,159)	1:A:76:LYS:HD3	1:A:77:ILE:H	5	0.04
(1,144)	1:A:49:LEU:HD11	1:A:50:PHE:H	4	0.04
(1,144)	1:A:49:LEU:HD12	1:A:50:PHE:H	4	0.04
(1,144)	1:A:49:LEU:HD13	1:A:50:PHE:H	4	0.04
(1,113)	1:A:11:LEU:HG	1:A:12:THR:H	1	0.04
(1,113)	1:A:11:LEU:HG	1:A:12:THR:H	3	0.04
(1,113)	1:A:11:LEU:HG	1:A:12:THR:H	8	0.04
(1,832)	1:A:36:LYS:O	1:A:79:GLU:H	4	0.03
(1,832)	1:A:36:LYS:O	1:A:79:GLU:H	15	0.03
(1,830)	1:A:38:GLU:O	1:A:76:LYS:H	4	0.03
(1,830)	1:A:38:GLU:O	1:A:76:LYS:H	12	0.03
(1,828)	1:A:50:PHE:O	1:A:70:GLU:H	8	0.03
(1,828)	1:A:50:PHE:O	1:A:70:GLU:H	18	0.03
(1,828)	1:A:50:PHE:O	1:A:70:GLU:H	19	0.03
(1,818)	1:A:45:ASN:O	1:A:49:LEU:H	4	0.03
(1,781)	1:A:82:PRO:HA	1:A:83:ARG:HE	1	0.03
(1,781)	1:A:82:PRO:HA	1:A:83:ARG:HE	9	0.03
(1,781)	1:A:82:PRO:HA	1:A:83:ARG:HE	20	0.03
(1,759)	1:A:33:VAL:HG21	1:A:34:ARG:HB2	8	0.03
(1,759)	1:A:33:VAL:HG21	1:A:34:ARG:HB3	8	0.03
(1,759)	1:A:33:VAL:HG22	1:A:34:ARG:HB2	8	0.03
(1,759)	1:A:33:VAL:HG22	1:A:34:ARG:HB3	8	0.03
(1,759)	1:A:33:VAL:HG23	1:A:34:ARG:HB2	8	0.03
(1,759)	1:A:33:VAL:HG23	1:A:34:ARG:HB3	8	0.03
(1,7)	1:A:43:SER:H	1:A:44:ILE:H	8	0.03
(1,7)	1:A:43:SER:H	1:A:44:ILE:H	12	0.03
(1,650)	1:A:44:ILE:H	1:A:44:ILE:HB	4	0.03
(1,650)	1:A:44:ILE:H	1:A:44:ILE:HB	13	0.03
(1,628)	1:A:28:THR:H	1:A:28:THR:HB	11	0.03
(1,58)	1:A:56:SER:HA	1:A:57:GLY:H	1	0.03
(1,58)	1:A:56:SER:HA	1:A:57:GLY:H	3	0.03
(1,58)	1:A:56:SER:HA	1:A:57:GLY:H	9	0.03
(1,58)	1:A:56:SER:HA	1:A:57:GLY:H	10	0.03

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,58)	1:A:56:SER:HA	1:A:57:GLY:H	15	0.03
(1,58)	1:A:56:SER:HA	1:A:57:GLY:H	16	0.03
(1,569)	1:A:69:VAL:HG21	1:A:77:ILE:HG12	5	0.03
(1,569)	1:A:69:VAL:HG21	1:A:77:ILE:HG13	5	0.03
(1,569)	1:A:69:VAL:HG22	1:A:77:ILE:HG12	5	0.03
(1,569)	1:A:69:VAL:HG22	1:A:77:ILE:HG13	5	0.03
(1,569)	1:A:69:VAL:HG23	1:A:77:ILE:HG12	5	0.03
(1,569)	1:A:69:VAL:HG23	1:A:77:ILE:HG13	5	0.03
(1,557)	1:A:64:ASP:HB2	1:A:84:VAL:HG11	18	0.03
(1,557)	1:A:64:ASP:HB2	1:A:84:VAL:HG12	18	0.03
(1,557)	1:A:64:ASP:HB2	1:A:84:VAL:HG13	18	0.03
(1,557)	1:A:64:ASP:HB3	1:A:84:VAL:HG11	18	0.03
(1,557)	1:A:64:ASP:HB3	1:A:84:VAL:HG12	18	0.03
(1,557)	1:A:64:ASP:HB3	1:A:84:VAL:HG13	18	0.03
(1,539)	1:A:52:TYR:HB2	1:A:68:LYS:HD2	2	0.03
(1,539)	1:A:52:TYR:HB2	1:A:68:LYS:HD3	2	0.03
(1,539)	1:A:52:TYR:HB3	1:A:68:LYS:HD2	2	0.03
(1,539)	1:A:52:TYR:HB3	1:A:68:LYS:HD3	2	0.03
(1,539)	1:A:52:TYR:HB2	1:A:68:LYS:HD2	12	0.03
(1,539)	1:A:52:TYR:HB2	1:A:68:LYS:HD3	12	0.03
(1,539)	1:A:52:TYR:HB3	1:A:68:LYS:HD2	12	0.03
(1,539)	1:A:52:TYR:HB3	1:A:68:LYS:HD3	12	0.03
(1,539)	1:A:52:TYR:HB2	1:A:68:LYS:HD2	13	0.03
(1,539)	1:A:52:TYR:HB2	1:A:68:LYS:HD3	13	0.03
(1,539)	1:A:52:TYR:HB3	1:A:68:LYS:HD2	13	0.03
(1,539)	1:A:52:TYR:HB3	1:A:68:LYS:HD3	13	0.03
(1,539)	1:A:52:TYR:HB2	1:A:68:LYS:HD2	19	0.03
(1,539)	1:A:52:TYR:HB2	1:A:68:LYS:HD3	19	0.03
(1,539)	1:A:52:TYR:HB3	1:A:68:LYS:HD2	19	0.03
(1,539)	1:A:52:TYR:HB3	1:A:68:LYS:HD3	19	0.03
(1,533)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:49:LEU:HD11	18	0.03
(1,533)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:49:LEU:HD12	18	0.03
(1,533)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:49:LEU:HD13	18	0.03
(1,533)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:49:LEU:HD11	18	0.03
(1,533)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:49:LEU:HD12	18	0.03
(1,533)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:49:LEU:HD13	18	0.03
(1,533)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:49:LEU:HD11	18	0.03
(1,533)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:49:LEU:HD12	18	0.03
(1,533)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:49:LEU:HD13	18	0.03
(1,531)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:49:LEU:HG	10	0.03
(1,531)	1:A:46:VAL:HG12	1:A:49:LEU:HG	10	0.03
(1,531)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:49:LEU:HG	10	0.03

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,528)	1:A:44:ILE:HG21	1:A:46:VAL:HG11	17	0.03
(1,528)	1:A:44:ILE:HG21	1:A:46:VAL:HG12	17	0.03
(1,528)	1:A:44:ILE:HG21	1:A:46:VAL:HG13	17	0.03
(1,528)	1:A:44:ILE:HG22	1:A:46:VAL:HG11	17	0.03
(1,528)	1:A:44:ILE:HG22	1:A:46:VAL:HG12	17	0.03
(1,528)	1:A:44:ILE:HG22	1:A:46:VAL:HG13	17	0.03
(1,528)	1:A:44:ILE:HG23	1:A:46:VAL:HG11	17	0.03
(1,528)	1:A:44:ILE:HG23	1:A:46:VAL:HG12	17	0.03
(1,528)	1:A:44:ILE:HG23	1:A:46:VAL:HG13	17	0.03
(1,526)	1:A:44:ILE:HG12	1:A:72:ILE:HG21	12	0.03
(1,526)	1:A:44:ILE:HG12	1:A:72:ILE:HG22	12	0.03
(1,526)	1:A:44:ILE:HG12	1:A:72:ILE:HG23	12	0.03
(1,526)	1:A:44:ILE:HG13	1:A:72:ILE:HG21	12	0.03
(1,526)	1:A:44:ILE:HG13	1:A:72:ILE:HG22	12	0.03
(1,526)	1:A:44:ILE:HG13	1:A:72:ILE:HG23	12	0.03
(1,523)	1:A:41:ASN:HB2	1:A:75:ILE:HG12	6	0.03
(1,523)	1:A:41:ASN:HB2	1:A:75:ILE:HG13	6	0.03
(1,523)	1:A:41:ASN:HB3	1:A:75:ILE:HG12	6	0.03
(1,523)	1:A:41:ASN:HB3	1:A:75:ILE:HG13	6	0.03
(1,523)	1:A:41:ASN:HB2	1:A:75:ILE:HG12	19	0.03
(1,523)	1:A:41:ASN:HB2	1:A:75:ILE:HG13	19	0.03
(1,523)	1:A:41:ASN:HB3	1:A:75:ILE:HG12	19	0.03
(1,523)	1:A:41:ASN:HB3	1:A:75:ILE:HG13	19	0.03
(1,520)	1:A:38:GLU:HG2	1:A:78:VAL:HG11	11	0.03
(1,520)	1:A:38:GLU:HG2	1:A:78:VAL:HG12	11	0.03
(1,520)	1:A:38:GLU:HG2	1:A:78:VAL:HG13	11	0.03
(1,520)	1:A:38:GLU:HG3	1:A:78:VAL:HG11	11	0.03
(1,520)	1:A:38:GLU:HG3	1:A:78:VAL:HG12	11	0.03
(1,520)	1:A:38:GLU:HG3	1:A:78:VAL:HG13	11	0.03
(1,506)	1:A:36:LYS:HB2	1:A:78:VAL:HB	5	0.03
(1,506)	1:A:36:LYS:HB3	1:A:78:VAL:HB	5	0.03
(1,505)	1:A:35:VAL:HG11	1:A:79:GLU:HB2	20	0.03
(1,505)	1:A:35:VAL:HG11	1:A:79:GLU:HB3	20	0.03
(1,505)	1:A:35:VAL:HG12	1:A:79:GLU:HB2	20	0.03
(1,505)	1:A:35:VAL:HG12	1:A:79:GLU:HB3	20	0.03
(1,505)	1:A:35:VAL:HG13	1:A:79:GLU:HB2	20	0.03
(1,505)	1:A:35:VAL:HG13	1:A:79:GLU:HB3	20	0.03
(1,490)	1:A:27:MET:HG2	1:A:90:GLU:HB2	15	0.03
(1,490)	1:A:27:MET:HG2	1:A:90:GLU:HB3	15	0.03
(1,490)	1:A:27:MET:HG3	1:A:90:GLU:HB2	15	0.03
(1,490)	1:A:27:MET:HG3	1:A:90:GLU:HB3	15	0.03
(1,470)	1:A:20:THR:HG21	1:A:89:LEU:HD11	6	0.03

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,470)	1:A:20:THR:HG21	1:A:89:LEU:HD12	6	0.03
(1,470)	1:A:20:THR:HG21	1:A:89:LEU:HD13	6	0.03
(1,470)	1:A:20:THR:HG22	1:A:89:LEU:HD11	6	0.03
(1,470)	1:A:20:THR:HG22	1:A:89:LEU:HD12	6	0.03
(1,470)	1:A:20:THR:HG22	1:A:89:LEU:HD13	6	0.03
(1,470)	1:A:20:THR:HG23	1:A:89:LEU:HD11	6	0.03
(1,470)	1:A:20:THR:HG23	1:A:89:LEU:HD12	6	0.03
(1,470)	1:A:20:THR:HG23	1:A:89:LEU:HD13	6	0.03
(1,451)	1:A:16:ILE:HD11	1:A:18:LYS:HE2	7	0.03
(1,451)	1:A:16:ILE:HD11	1:A:18:LYS:HE3	7	0.03
(1,451)	1:A:16:ILE:HD12	1:A:18:LYS:HE2	7	0.03
(1,451)	1:A:16:ILE:HD12	1:A:18:LYS:HE3	7	0.03
(1,451)	1:A:16:ILE:HD13	1:A:18:LYS:HE2	7	0.03
(1,451)	1:A:16:ILE:HD13	1:A:18:LYS:HE3	7	0.03
(1,451)	1:A:16:ILE:HD11	1:A:18:LYS:HE2	10	0.03
(1,451)	1:A:16:ILE:HD11	1:A:18:LYS:HE3	10	0.03
(1,451)	1:A:16:ILE:HD12	1:A:18:LYS:HE2	10	0.03
(1,451)	1:A:16:ILE:HD12	1:A:18:LYS:HE3	10	0.03
(1,451)	1:A:16:ILE:HD13	1:A:18:LYS:HE2	10	0.03
(1,451)	1:A:16:ILE:HD13	1:A:18:LYS:HE3	10	0.03
(1,451)	1:A:16:ILE:HD11	1:A:18:LYS:HE2	15	0.03
(1,451)	1:A:16:ILE:HD11	1:A:18:LYS:HE3	15	0.03
(1,451)	1:A:16:ILE:HD12	1:A:18:LYS:HE2	15	0.03
(1,451)	1:A:16:ILE:HD12	1:A:18:LYS:HE3	15	0.03
(1,451)	1:A:16:ILE:HD13	1:A:18:LYS:HE2	15	0.03
(1,451)	1:A:16:ILE:HD13	1:A:18:LYS:HE3	15	0.03
(1,451)	1:A:16:ILE:HD11	1:A:18:LYS:HE2	18	0.03
(1,451)	1:A:16:ILE:HD11	1:A:18:LYS:HE3	18	0.03
(1,451)	1:A:16:ILE:HD12	1:A:18:LYS:HE2	18	0.03
(1,451)	1:A:16:ILE:HD12	1:A:18:LYS:HE3	18	0.03
(1,451)	1:A:16:ILE:HD13	1:A:18:LYS:HE2	18	0.03
(1,451)	1:A:16:ILE:HD13	1:A:18:LYS:HE3	18	0.03
(1,451)	1:A:16:ILE:HD11	1:A:18:LYS:HE2	19	0.03
(1,451)	1:A:16:ILE:HD11	1:A:18:LYS:HE3	19	0.03
(1,451)	1:A:16:ILE:HD12	1:A:18:LYS:HE2	19	0.03
(1,451)	1:A:16:ILE:HD12	1:A:18:LYS:HE3	19	0.03
(1,451)	1:A:16:ILE:HD13	1:A:18:LYS:HE2	19	0.03
(1,451)	1:A:16:ILE:HD13	1:A:18:LYS:HE3	19	0.03
(1,410)	1:A:9:PRO:HD2	1:A:75:ILE:HD11	6	0.03
(1,410)	1:A:9:PRO:HD2	1:A:75:ILE:HD12	6	0.03
(1,410)	1:A:9:PRO:HD2	1:A:75:ILE:HD13	6	0.03
(1,410)	1:A:9:PRO:HD3	1:A:75:ILE:HD11	6	0.03

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,410)	1:A:9:PRO:HD3	1:A:75:ILE:HD12	6	0.03
(1,410)	1:A:9:PRO:HD3	1:A:75:ILE:HD13	6	0.03
(1,410)	1:A:9:PRO:HD2	1:A:75:ILE:HD11	14	0.03
(1,410)	1:A:9:PRO:HD2	1:A:75:ILE:HD12	14	0.03
(1,410)	1:A:9:PRO:HD2	1:A:75:ILE:HD13	14	0.03
(1,410)	1:A:9:PRO:HD3	1:A:75:ILE:HD11	14	0.03
(1,410)	1:A:9:PRO:HD3	1:A:75:ILE:HD12	14	0.03
(1,410)	1:A:9:PRO:HD3	1:A:75:ILE:HD13	14	0.03
(1,396)	1:A:60:PRO:HA	1:A:89:LEU:HD21	8	0.03
(1,396)	1:A:60:PRO:HA	1:A:89:LEU:HD22	8	0.03
(1,396)	1:A:60:PRO:HA	1:A:89:LEU:HD23	8	0.03
(1,396)	1:A:60:PRO:HA	1:A:89:LEU:HD21	12	0.03
(1,396)	1:A:60:PRO:HA	1:A:89:LEU:HD22	12	0.03
(1,396)	1:A:60:PRO:HA	1:A:89:LEU:HD23	12	0.03
(1,384)	1:A:37:THR:HA	1:A:78:VAL:HG11	5	0.03
(1,384)	1:A:37:THR:HA	1:A:78:VAL:HG12	5	0.03
(1,384)	1:A:37:THR:HA	1:A:78:VAL:HG13	5	0.03
(1,384)	1:A:37:THR:HA	1:A:78:VAL:HG11	11	0.03
(1,384)	1:A:37:THR:HA	1:A:78:VAL:HG12	11	0.03
(1,384)	1:A:37:THR:HA	1:A:78:VAL:HG13	11	0.03
(1,383)	1:A:35:VAL:HG11	1:A:80:ILE:HA	1	0.03
(1,383)	1:A:35:VAL:HG12	1:A:80:ILE:HA	1	0.03
(1,383)	1:A:35:VAL:HG13	1:A:80:ILE:HA	1	0.03
(1,383)	1:A:35:VAL:HG11	1:A:80:ILE:HA	15	0.03
(1,383)	1:A:35:VAL:HG12	1:A:80:ILE:HA	15	0.03
(1,383)	1:A:35:VAL:HG13	1:A:80:ILE:HA	15	0.03
(1,382)	1:A:33:VAL:HG11	1:A:51:ALA:HA	13	0.03
(1,382)	1:A:33:VAL:HG12	1:A:51:ALA:HA	13	0.03
(1,382)	1:A:33:VAL:HG13	1:A:51:ALA:HA	13	0.03
(1,380)	1:A:33:VAL:HA	1:A:67:VAL:HG11	16	0.03
(1,380)	1:A:33:VAL:HA	1:A:67:VAL:HG12	16	0.03
(1,380)	1:A:33:VAL:HA	1:A:67:VAL:HG13	16	0.03
(1,373)	1:A:25:MET:HE1	1:A:92:HIS:HA	18	0.03
(1,373)	1:A:25:MET:HE2	1:A:92:HIS:HA	18	0.03
(1,373)	1:A:25:MET:HE3	1:A:92:HIS:HA	18	0.03
(1,370)	1:A:20:THR:HG21	1:A:25:MET:HA	20	0.03
(1,370)	1:A:20:THR:HG22	1:A:25:MET:HA	20	0.03
(1,370)	1:A:20:THR:HG23	1:A:25:MET:HA	20	0.03
(1,363)	1:A:17:ALA:HA	1:A:87:LEU:HD11	19	0.03
(1,363)	1:A:17:ALA:HA	1:A:87:LEU:HD12	19	0.03
(1,363)	1:A:17:ALA:HA	1:A:87:LEU:HD13	19	0.03
(1,347)	1:A:40:TYR:HD1	1:A:7:ARG:HA	8	0.03

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,347)	1:A:40:TYR:HD2	1:A:7:ARG:HA	8	0.03
(1,341)	1:A:61:GLY:H	1:A:89:LEU:HG	15	0.03
(1,340)	1:A:61:GLY:H	1:A:89:LEU:HB2	10	0.03
(1,340)	1:A:61:GLY:H	1:A:89:LEU:HB3	10	0.03
(1,34)	1:A:18:LYS:HA	1:A:19:ASN:H	8	0.03
(1,34)	1:A:18:LYS:HA	1:A:19:ASN:H	11	0.03
(1,34)	1:A:18:LYS:HA	1:A:19:ASN:H	16	0.03
(1,34)	1:A:18:LYS:HA	1:A:19:ASN:H	17	0.03
(1,330)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG21	3	0.03
(1,330)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG22	3	0.03
(1,330)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG23	3	0.03
(1,330)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG21	9	0.03
(1,330)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG22	9	0.03
(1,330)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG23	9	0.03
(1,330)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG21	11	0.03
(1,330)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG22	11	0.03
(1,330)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG23	11	0.03
(1,330)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG21	15	0.03
(1,330)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG22	15	0.03
(1,330)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG23	15	0.03
(1,330)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG21	16	0.03
(1,330)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG22	16	0.03
(1,330)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG23	16	0.03
(1,330)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG21	17	0.03
(1,330)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG22	17	0.03
(1,330)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG23	17	0.03
(1,330)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG21	18	0.03
(1,330)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG22	18	0.03
(1,330)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG23	18	0.03
(1,329)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG11	11	0.03
(1,329)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG12	11	0.03
(1,329)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG13	11	0.03
(1,329)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG11	18	0.03
(1,329)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG12	18	0.03
(1,329)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG13	18	0.03
(1,329)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG11	20	0.03
(1,329)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG12	20	0.03
(1,329)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG13	20	0.03
(1,323)	1:A:25:MET:H	1:A:89:LEU:HD11	12	0.03
(1,323)	1:A:25:MET:H	1:A:89:LEU:HD12	12	0.03
(1,323)	1:A:25:MET:H	1:A:89:LEU:HD13	12	0.03
(1,293)	1:A:26:ILE:HG12	1:A:90:GLU:H	2	0.03

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,293)	1:A:26:ILE:HG13	1:A:90:GLU:H	2	0.03
(1,289)	1:A:21:PRO:HG2	1:A:58:SER:H	19	0.03
(1,289)	1:A:21:PRO:HG3	1:A:58:SER:H	19	0.03
(1,286)	1:A:18:LYS:HB2	1:A:55:LEU:H	11	0.03
(1,286)	1:A:18:LYS:HB3	1:A:55:LEU:H	11	0.03
(1,276)	1:A:12:THR:HG21	1:A:33:VAL:H	16	0.03
(1,276)	1:A:12:THR:HG22	1:A:33:VAL:H	16	0.03
(1,276)	1:A:12:THR:HG23	1:A:33:VAL:H	16	0.03
(1,253)	1:A:40:TYR:H	1:A:75:ILE:HA	5	0.03
(1,242)	1:A:11:LEU:H	1:A:34:ARG:HA	16	0.03
(1,227)	1:A:14:SER:HA	1:A:32:SER:H	17	0.03
(1,219)	1:A:54:ASP:H	1:A:66:GLU:H	18	0.03
(1,204)	1:A:17:ALA:HA	1:A:20:THR:HB	9	0.03
(1,204)	1:A:17:ALA:HA	1:A:20:THR:HB	10	0.03
(1,204)	1:A:17:ALA:HA	1:A:20:THR:HB	12	0.03
(1,204)	1:A:17:ALA:HA	1:A:20:THR:HB	19	0.03
(1,196)	1:A:77:ILE:HG21	1:A:79:GLU:H	2	0.03
(1,196)	1:A:77:ILE:HG22	1:A:79:GLU:H	2	0.03
(1,196)	1:A:77:ILE:HG23	1:A:79:GLU:H	2	0.03
(1,196)	1:A:77:ILE:HG21	1:A:79:GLU:H	13	0.03
(1,196)	1:A:77:ILE:HG22	1:A:79:GLU:H	13	0.03
(1,196)	1:A:77:ILE:HG23	1:A:79:GLU:H	13	0.03
(1,196)	1:A:77:ILE:HG21	1:A:79:GLU:H	18	0.03
(1,196)	1:A:77:ILE:HG22	1:A:79:GLU:H	18	0.03
(1,196)	1:A:77:ILE:HG23	1:A:79:GLU:H	18	0.03
(1,179)	1:A:24:SER:H	1:A:25:MET:HB2	8	0.03
(1,179)	1:A:24:SER:H	1:A:25:MET:HB3	8	0.03
(1,179)	1:A:24:SER:H	1:A:25:MET:HB2	14	0.03
(1,179)	1:A:24:SER:H	1:A:25:MET:HB3	14	0.03
(1,175)	1:A:89:LEU:HD11	1:A:90:GLU:H	4	0.03
(1,175)	1:A:89:LEU:HD12	1:A:90:GLU:H	4	0.03
(1,175)	1:A:89:LEU:HD13	1:A:90:GLU:H	4	0.03
(1,175)	1:A:89:LEU:HD11	1:A:90:GLU:H	16	0.03
(1,175)	1:A:89:LEU:HD12	1:A:90:GLU:H	16	0.03
(1,175)	1:A:89:LEU:HD13	1:A:90:GLU:H	16	0.03
(1,174)	1:A:89:LEU:HG	1:A:90:GLU:H	2	0.03
(1,174)	1:A:89:LEU:HG	1:A:90:GLU:H	5	0.03
(1,174)	1:A:89:LEU:HG	1:A:90:GLU:H	16	0.03
(1,174)	1:A:89:LEU:HG	1:A:90:GLU:H	20	0.03
(1,159)	1:A:76:LYS:HD2	1:A:77:ILE:H	17	0.03
(1,159)	1:A:76:LYS:HD3	1:A:77:ILE:H	17	0.03
(1,144)	1:A:49:LEU:HD11	1:A:50:PHE:H	12	0.03

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,144)	1:A:49:LEU:HD12	1:A:50:PHE:H	12	0.03
(1,144)	1:A:49:LEU:HD13	1:A:50:PHE:H	12	0.03
(1,113)	1:A:11:LEU:HG	1:A:12:THR:H	9	0.03
(1,113)	1:A:11:LEU:HG	1:A:12:THR:H	12	0.03
(1,1)	1:A:19:ASN:H	1:A:20:THR:H	12	0.03
(1,92)	1:A:73:PRO:HA	1:A:75:ILE:H	6	0.02
(1,838)	1:A:61:GLY:O	1:A:89:LEU:H	5	0.02
(1,832)	1:A:36:LYS:O	1:A:79:GLU:H	3	0.02
(1,832)	1:A:36:LYS:O	1:A:79:GLU:H	16	0.02
(1,830)	1:A:38:GLU:O	1:A:76:LYS:H	6	0.02
(1,830)	1:A:38:GLU:O	1:A:76:LYS:H	8	0.02
(1,830)	1:A:38:GLU:O	1:A:76:LYS:H	17	0.02
(1,830)	1:A:38:GLU:O	1:A:76:LYS:H	18	0.02
(1,828)	1:A:50:PHE:O	1:A:70:GLU:H	2	0.02
(1,828)	1:A:50:PHE:O	1:A:70:GLU:H	3	0.02
(1,828)	1:A:50:PHE:O	1:A:70:GLU:H	7	0.02
(1,828)	1:A:50:PHE:O	1:A:70:GLU:H	13	0.02
(1,828)	1:A:50:PHE:O	1:A:70:GLU:H	14	0.02
(1,828)	1:A:50:PHE:O	1:A:70:GLU:H	20	0.02
(1,826)	1:A:52:TYR:O	1:A:68:LYS:H	11	0.02
(1,820)	1:A:16:ILE:O	1:A:53:VAL:H	6	0.02
(1,818)	1:A:45:ASN:O	1:A:49:LEU:H	7	0.02
(1,818)	1:A:45:ASN:O	1:A:49:LEU:H	10	0.02
(1,818)	1:A:45:ASN:O	1:A:49:LEU:H	11	0.02
(1,818)	1:A:45:ASN:O	1:A:49:LEU:H	19	0.02
(1,802)	1:A:53:VAL:O	1:A:18:LYS:H	14	0.02
(1,798)	1:A:31:PRO:O	1:A:15:LEU:H	14	0.02
(1,781)	1:A:82:PRO:HA	1:A:83:ARG:HE	3	0.02
(1,781)	1:A:82:PRO:HA	1:A:83:ARG:HE	8	0.02
(1,781)	1:A:82:PRO:HA	1:A:83:ARG:HE	10	0.02
(1,781)	1:A:82:PRO:HA	1:A:83:ARG:HE	16	0.02
(1,781)	1:A:82:PRO:HA	1:A:83:ARG:HE	17	0.02
(1,779)	1:A:81:SER:HA	1:A:82:PRO:HA	3	0.02
(1,779)	1:A:81:SER:HA	1:A:82:PRO:HA	8	0.02
(1,779)	1:A:81:SER:HA	1:A:82:PRO:HA	18	0.02
(1,7)	1:A:43:SER:H	1:A:44:ILE:H	13	0.02
(1,682)	1:A:59:GLU:H	1:A:59:GLU:HG2	13	0.02
(1,682)	1:A:59:GLU:H	1:A:59:GLU:HG3	13	0.02
(1,58)	1:A:56:SER:HA	1:A:57:GLY:H	2	0.02
(1,58)	1:A:56:SER:HA	1:A:57:GLY:H	6	0.02
(1,569)	1:A:69:VAL:HG21	1:A:77:ILE:HG12	4	0.02
(1,569)	1:A:69:VAL:HG21	1:A:77:ILE:HG13	4	0.02

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,569)	1:A:69:VAL:HG22	1:A:77:ILE:HG12	4	0.02
(1,569)	1:A:69:VAL:HG22	1:A:77:ILE:HG13	4	0.02
(1,569)	1:A:69:VAL:HG23	1:A:77:ILE:HG12	4	0.02
(1,569)	1:A:69:VAL:HG23	1:A:77:ILE:HG13	4	0.02
(1,569)	1:A:69:VAL:HG21	1:A:77:ILE:HG12	10	0.02
(1,569)	1:A:69:VAL:HG21	1:A:77:ILE:HG13	10	0.02
(1,569)	1:A:69:VAL:HG22	1:A:77:ILE:HG12	10	0.02
(1,569)	1:A:69:VAL:HG22	1:A:77:ILE:HG13	10	0.02
(1,569)	1:A:69:VAL:HG23	1:A:77:ILE:HG12	10	0.02
(1,569)	1:A:69:VAL:HG23	1:A:77:ILE:HG13	10	0.02
(1,552)	1:A:58:SER:HB2	1:A:89:LEU:HD11	8	0.02
(1,552)	1:A:58:SER:HB2	1:A:89:LEU:HD12	8	0.02
(1,552)	1:A:58:SER:HB2	1:A:89:LEU:HD13	8	0.02
(1,552)	1:A:58:SER:HB3	1:A:89:LEU:HD11	8	0.02
(1,552)	1:A:58:SER:HB3	1:A:89:LEU:HD12	8	0.02
(1,552)	1:A:58:SER:HB3	1:A:89:LEU:HD13	8	0.02
(1,548)	1:A:55:LEU:HD11	1:A:89:LEU:HG	5	0.02
(1,548)	1:A:55:LEU:HD12	1:A:89:LEU:HG	5	0.02
(1,548)	1:A:55:LEU:HD13	1:A:89:LEU:HG	5	0.02
(1,547)	1:A:55:LEU:HD21	1:A:87:LEU:HD11	8	0.02
(1,547)	1:A:55:LEU:HD21	1:A:87:LEU:HD12	8	0.02
(1,547)	1:A:55:LEU:HD21	1:A:87:LEU:HD13	8	0.02
(1,547)	1:A:55:LEU:HD22	1:A:87:LEU:HD11	8	0.02
(1,547)	1:A:55:LEU:HD22	1:A:87:LEU:HD12	8	0.02
(1,547)	1:A:55:LEU:HD22	1:A:87:LEU:HD13	8	0.02
(1,547)	1:A:55:LEU:HD23	1:A:87:LEU:HD11	8	0.02
(1,547)	1:A:55:LEU:HD23	1:A:87:LEU:HD12	8	0.02
(1,547)	1:A:55:LEU:HD23	1:A:87:LEU:HD13	8	0.02
(1,533)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:49:LEU:HD11	2	0.02
(1,533)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:49:LEU:HD12	2	0.02
(1,533)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:49:LEU:HD13	2	0.02
(1,533)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:49:LEU:HD11	2	0.02
(1,533)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:49:LEU:HD12	2	0.02
(1,533)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:49:LEU:HD13	2	0.02
(1,533)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:49:LEU:HD11	2	0.02
(1,533)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:49:LEU:HD12	2	0.02
(1,533)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:49:LEU:HD13	2	0.02
(1,533)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:49:LEU:HD11	7	0.02
(1,533)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:49:LEU:HD12	7	0.02
(1,533)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:49:LEU:HD13	7	0.02
(1,533)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:49:LEU:HD11	7	0.02
(1,533)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:49:LEU:HD12	7	0.02

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,533)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:49:LEU:HD13	7	0.02
(1,533)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:49:LEU:HD11	7	0.02
(1,533)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:49:LEU:HD12	7	0.02
(1,533)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:49:LEU:HD13	7	0.02
(1,533)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:49:LEU:HD11	14	0.02
(1,533)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:49:LEU:HD12	14	0.02
(1,533)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:49:LEU:HD13	14	0.02
(1,533)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:49:LEU:HD11	14	0.02
(1,533)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:49:LEU:HD12	14	0.02
(1,533)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:49:LEU:HD13	14	0.02
(1,533)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:49:LEU:HD11	14	0.02
(1,533)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:49:LEU:HD12	14	0.02
(1,533)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:49:LEU:HD13	14	0.02
(1,531)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:49:LEU:HG	4	0.02
(1,531)	1:A:46:VAL:HG12	1:A:49:LEU:HG	4	0.02
(1,531)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:49:LEU:HG	4	0.02
(1,531)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:49:LEU:HG	8	0.02
(1,531)	1:A:46:VAL:HG12	1:A:49:LEU:HG	8	0.02
(1,531)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:49:LEU:HG	8	0.02
(1,529)	1:A:44:ILE:HG21	1:A:75:ILE:HG12	4	0.02
(1,529)	1:A:44:ILE:HG21	1:A:75:ILE:HG13	4	0.02
(1,529)	1:A:44:ILE:HG22	1:A:75:ILE:HG12	4	0.02
(1,529)	1:A:44:ILE:HG22	1:A:75:ILE:HG13	4	0.02
(1,529)	1:A:44:ILE:HG23	1:A:75:ILE:HG12	4	0.02
(1,529)	1:A:44:ILE:HG23	1:A:75:ILE:HG13	4	0.02
(1,527)	1:A:44:ILE:HG12	1:A:75:ILE:HG12	1	0.02
(1,527)	1:A:44:ILE:HG12	1:A:75:ILE:HG13	1	0.02
(1,527)	1:A:44:ILE:HG13	1:A:75:ILE:HG12	1	0.02
(1,527)	1:A:44:ILE:HG13	1:A:75:ILE:HG13	1	0.02
(1,524)	1:A:41:ASN:HB2	1:A:75:ILE:HD11	15	0.02
(1,524)	1:A:41:ASN:HB2	1:A:75:ILE:HD12	15	0.02
(1,524)	1:A:41:ASN:HB2	1:A:75:ILE:HD13	15	0.02
(1,524)	1:A:41:ASN:HB3	1:A:75:ILE:HD11	15	0.02
(1,524)	1:A:41:ASN:HB3	1:A:75:ILE:HD12	15	0.02
(1,524)	1:A:41:ASN:HB3	1:A:75:ILE:HD13	15	0.02
(1,523)	1:A:41:ASN:HB2	1:A:75:ILE:HG12	10	0.02
(1,523)	1:A:41:ASN:HB2	1:A:75:ILE:HG13	10	0.02
(1,523)	1:A:41:ASN:HB3	1:A:75:ILE:HG12	10	0.02
(1,523)	1:A:41:ASN:HB3	1:A:75:ILE:HG13	10	0.02
(1,523)	1:A:41:ASN:HB2	1:A:75:ILE:HG12	16	0.02
(1,523)	1:A:41:ASN:HB2	1:A:75:ILE:HG13	16	0.02
(1,523)	1:A:41:ASN:HB3	1:A:75:ILE:HG12	16	0.02

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,523)	1:A:41:ASN:HB3	1:A:75:ILE:HG13	16	0.02
(1,520)	1:A:38:GLU:HG2	1:A:78:VAL:HG11	8	0.02
(1,520)	1:A:38:GLU:HG2	1:A:78:VAL:HG12	8	0.02
(1,520)	1:A:38:GLU:HG2	1:A:78:VAL:HG13	8	0.02
(1,520)	1:A:38:GLU:HG3	1:A:78:VAL:HG11	8	0.02
(1,520)	1:A:38:GLU:HG3	1:A:78:VAL:HG12	8	0.02
(1,520)	1:A:38:GLU:HG3	1:A:78:VAL:HG13	8	0.02
(1,520)	1:A:38:GLU:HG2	1:A:78:VAL:HG11	15	0.02
(1,520)	1:A:38:GLU:HG2	1:A:78:VAL:HG12	15	0.02
(1,520)	1:A:38:GLU:HG2	1:A:78:VAL:HG13	15	0.02
(1,520)	1:A:38:GLU:HG3	1:A:78:VAL:HG11	15	0.02
(1,520)	1:A:38:GLU:HG3	1:A:78:VAL:HG12	15	0.02
(1,520)	1:A:38:GLU:HG3	1:A:78:VAL:HG13	15	0.02
(1,520)	1:A:38:GLU:HG2	1:A:78:VAL:HG11	16	0.02
(1,520)	1:A:38:GLU:HG2	1:A:78:VAL:HG12	16	0.02
(1,520)	1:A:38:GLU:HG2	1:A:78:VAL:HG13	16	0.02
(1,520)	1:A:38:GLU:HG3	1:A:78:VAL:HG11	16	0.02
(1,520)	1:A:38:GLU:HG3	1:A:78:VAL:HG12	16	0.02
(1,520)	1:A:38:GLU:HG3	1:A:78:VAL:HG13	16	0.02
(1,520)	1:A:38:GLU:HG2	1:A:78:VAL:HG11	19	0.02
(1,520)	1:A:38:GLU:HG2	1:A:78:VAL:HG12	19	0.02
(1,520)	1:A:38:GLU:HG2	1:A:78:VAL:HG13	19	0.02
(1,520)	1:A:38:GLU:HG3	1:A:78:VAL:HG11	19	0.02
(1,520)	1:A:38:GLU:HG3	1:A:78:VAL:HG12	19	0.02
(1,520)	1:A:38:GLU:HG3	1:A:78:VAL:HG13	19	0.02
(1,519)	1:A:38:GLU:HG2	1:A:78:VAL:HG21	5	0.02
(1,519)	1:A:38:GLU:HG2	1:A:78:VAL:HG22	5	0.02
(1,519)	1:A:38:GLU:HG2	1:A:78:VAL:HG23	5	0.02
(1,519)	1:A:38:GLU:HG3	1:A:78:VAL:HG21	5	0.02
(1,519)	1:A:38:GLU:HG3	1:A:78:VAL:HG22	5	0.02
(1,519)	1:A:38:GLU:HG3	1:A:78:VAL:HG23	5	0.02
(1,512)	1:A:37:THR:HB	1:A:75:ILE:HG21	10	0.02
(1,512)	1:A:37:THR:HB	1:A:75:ILE:HG22	10	0.02
(1,512)	1:A:37:THR:HB	1:A:75:ILE:HG23	10	0.02
(1,505)	1:A:35:VAL:HG11	1:A:79:GLU:HB2	3	0.02
(1,505)	1:A:35:VAL:HG11	1:A:79:GLU:HB3	3	0.02
(1,505)	1:A:35:VAL:HG12	1:A:79:GLU:HB2	3	0.02
(1,505)	1:A:35:VAL:HG12	1:A:79:GLU:HB3	3	0.02
(1,505)	1:A:35:VAL:HG13	1:A:79:GLU:HB2	3	0.02
(1,505)	1:A:35:VAL:HG13	1:A:79:GLU:HB3	3	0.02
(1,496)	1:A:31:PRO:HG2	1:A:85:VAL:HG21	3	0.02
(1,496)	1:A:31:PRO:HG2	1:A:85:VAL:HG22	3	0.02

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,496)	1:A:31:PRO:HG2	1:A:85:VAL:HG23	3	0.02
(1,496)	1:A:31:PRO:HG3	1:A:85:VAL:HG21	3	0.02
(1,496)	1:A:31:PRO:HG3	1:A:85:VAL:HG22	3	0.02
(1,496)	1:A:31:PRO:HG3	1:A:85:VAL:HG23	3	0.02
(1,494)	1:A:30:LEU:HD11	1:A:53:VAL:HG11	6	0.02
(1,494)	1:A:30:LEU:HD11	1:A:53:VAL:HG12	6	0.02
(1,494)	1:A:30:LEU:HD11	1:A:53:VAL:HG13	6	0.02
(1,494)	1:A:30:LEU:HD12	1:A:53:VAL:HG11	6	0.02
(1,494)	1:A:30:LEU:HD12	1:A:53:VAL:HG12	6	0.02
(1,494)	1:A:30:LEU:HD12	1:A:53:VAL:HG13	6	0.02
(1,494)	1:A:30:LEU:HD13	1:A:53:VAL:HG11	6	0.02
(1,494)	1:A:30:LEU:HD13	1:A:53:VAL:HG12	6	0.02
(1,494)	1:A:30:LEU:HD13	1:A:53:VAL:HG13	6	0.02
(1,477)	1:A:26:ILE:HB	1:A:30:LEU:HD11	20	0.02
(1,477)	1:A:26:ILE:HB	1:A:30:LEU:HD12	20	0.02
(1,477)	1:A:26:ILE:HB	1:A:30:LEU:HD13	20	0.02
(1,462)	1:A:17:ALA:HB1	1:A:89:LEU:HD21	13	0.02
(1,462)	1:A:17:ALA:HB1	1:A:89:LEU:HD22	13	0.02
(1,462)	1:A:17:ALA:HB1	1:A:89:LEU:HD23	13	0.02
(1,462)	1:A:17:ALA:HB2	1:A:89:LEU:HD21	13	0.02
(1,462)	1:A:17:ALA:HB2	1:A:89:LEU:HD22	13	0.02
(1,462)	1:A:17:ALA:HB2	1:A:89:LEU:HD23	13	0.02
(1,462)	1:A:17:ALA:HB3	1:A:89:LEU:HD21	13	0.02
(1,462)	1:A:17:ALA:HB3	1:A:89:LEU:HD22	13	0.02
(1,462)	1:A:17:ALA:HB3	1:A:89:LEU:HD23	13	0.02
(1,451)	1:A:16:ILE:HD11	1:A:18:LYS:HE2	1	0.02
(1,451)	1:A:16:ILE:HD11	1:A:18:LYS:HE3	1	0.02
(1,451)	1:A:16:ILE:HD12	1:A:18:LYS:HE2	1	0.02
(1,451)	1:A:16:ILE:HD12	1:A:18:LYS:HE3	1	0.02
(1,451)	1:A:16:ILE:HD13	1:A:18:LYS:HE2	1	0.02
(1,451)	1:A:16:ILE:HD13	1:A:18:LYS:HE3	1	0.02
(1,451)	1:A:16:ILE:HD11	1:A:18:LYS:HE2	3	0.02
(1,451)	1:A:16:ILE:HD11	1:A:18:LYS:HE3	3	0.02
(1,451)	1:A:16:ILE:HD12	1:A:18:LYS:HE2	3	0.02
(1,451)	1:A:16:ILE:HD12	1:A:18:LYS:HE3	3	0.02
(1,451)	1:A:16:ILE:HD13	1:A:18:LYS:HE2	3	0.02
(1,451)	1:A:16:ILE:HD13	1:A:18:LYS:HE3	3	0.02
(1,451)	1:A:16:ILE:HD11	1:A:18:LYS:HE2	13	0.02
(1,451)	1:A:16:ILE:HD11	1:A:18:LYS:HE3	13	0.02
(1,451)	1:A:16:ILE:HD12	1:A:18:LYS:HE2	13	0.02
(1,451)	1:A:16:ILE:HD12	1:A:18:LYS:HE3	13	0.02
(1,451)	1:A:16:ILE:HD13	1:A:18:LYS:HE2	13	0.02

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,451)	1:A:16:ILE:HD13	1:A:18:LYS:HE3	13	0.02
(1,451)	1:A:16:ILE:HD11	1:A:18:LYS:HE2	14	0.02
(1,451)	1:A:16:ILE:HD11	1:A:18:LYS:HE3	14	0.02
(1,451)	1:A:16:ILE:HD12	1:A:18:LYS:HE2	14	0.02
(1,451)	1:A:16:ILE:HD12	1:A:18:LYS:HE3	14	0.02
(1,451)	1:A:16:ILE:HD13	1:A:18:LYS:HE2	14	0.02
(1,451)	1:A:16:ILE:HD13	1:A:18:LYS:HE3	14	0.02
(1,425)	1:A:13:LEU:HD21	1:A:49:LEU:HB2	18	0.02
(1,425)	1:A:13:LEU:HD21	1:A:49:LEU:HB3	18	0.02
(1,425)	1:A:13:LEU:HD22	1:A:49:LEU:HB2	18	0.02
(1,425)	1:A:13:LEU:HD22	1:A:49:LEU:HB3	18	0.02
(1,425)	1:A:13:LEU:HD23	1:A:49:LEU:HB2	18	0.02
(1,425)	1:A:13:LEU:HD23	1:A:49:LEU:HB3	18	0.02
(1,419)	1:A:11:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HB	4	0.02
(1,419)	1:A:11:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HB	4	0.02
(1,419)	1:A:11:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HB	4	0.02
(1,419)	1:A:11:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HB	17	0.02
(1,419)	1:A:11:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HB	17	0.02
(1,419)	1:A:11:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HB	17	0.02
(1,409)	1:A:9:PRO:HD2	1:A:41:ASN:HD21	17	0.02
(1,409)	1:A:9:PRO:HD2	1:A:41:ASN:HD22	17	0.02
(1,409)	1:A:9:PRO:HD3	1:A:41:ASN:HD21	17	0.02
(1,409)	1:A:9:PRO:HD3	1:A:41:ASN:HD22	17	0.02
(1,405)	1:A:71:PRO:HA	1:A:77:ILE:HD11	17	0.02
(1,405)	1:A:71:PRO:HA	1:A:77:ILE:HD12	17	0.02
(1,405)	1:A:71:PRO:HA	1:A:77:ILE:HD13	17	0.02
(1,396)	1:A:60:PRO:HA	1:A:89:LEU:HD21	17	0.02
(1,396)	1:A:60:PRO:HA	1:A:89:LEU:HD22	17	0.02
(1,396)	1:A:60:PRO:HA	1:A:89:LEU:HD23	17	0.02
(1,395)	1:A:60:PRO:HA	1:A:89:LEU:HB2	4	0.02
(1,395)	1:A:60:PRO:HA	1:A:89:LEU:HB3	4	0.02
(1,395)	1:A:60:PRO:HA	1:A:89:LEU:HB2	11	0.02
(1,395)	1:A:60:PRO:HA	1:A:89:LEU:HB3	11	0.02
(1,383)	1:A:35:VAL:HG11	1:A:80:ILE:HA	7	0.02
(1,383)	1:A:35:VAL:HG12	1:A:80:ILE:HA	7	0.02
(1,383)	1:A:35:VAL:HG13	1:A:80:ILE:HA	7	0.02
(1,383)	1:A:35:VAL:HG11	1:A:80:ILE:HA	11	0.02
(1,383)	1:A:35:VAL:HG12	1:A:80:ILE:HA	11	0.02
(1,383)	1:A:35:VAL:HG13	1:A:80:ILE:HA	11	0.02
(1,383)	1:A:35:VAL:HG11	1:A:80:ILE:HA	19	0.02
(1,383)	1:A:35:VAL:HG12	1:A:80:ILE:HA	19	0.02
(1,383)	1:A:35:VAL:HG13	1:A:80:ILE:HA	19	0.02

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,382)	1:A:33:VAL:HG11	1:A:51:ALA:HA	3	0.02
(1,382)	1:A:33:VAL:HG12	1:A:51:ALA:HA	3	0.02
(1,382)	1:A:33:VAL:HG13	1:A:51:ALA:HA	3	0.02
(1,382)	1:A:33:VAL:HG11	1:A:51:ALA:HA	6	0.02
(1,382)	1:A:33:VAL:HG12	1:A:51:ALA:HA	6	0.02
(1,382)	1:A:33:VAL:HG13	1:A:51:ALA:HA	6	0.02
(1,382)	1:A:33:VAL:HG11	1:A:51:ALA:HA	14	0.02
(1,382)	1:A:33:VAL:HG12	1:A:51:ALA:HA	14	0.02
(1,382)	1:A:33:VAL:HG13	1:A:51:ALA:HA	14	0.02
(1,380)	1:A:33:VAL:HA	1:A:67:VAL:HG11	7	0.02
(1,380)	1:A:33:VAL:HA	1:A:67:VAL:HG12	7	0.02
(1,380)	1:A:33:VAL:HA	1:A:67:VAL:HG13	7	0.02
(1,371)	1:A:21:PRO:HG2	1:A:56:SER:HA	5	0.02
(1,371)	1:A:21:PRO:HG3	1:A:56:SER:HA	5	0.02
(1,369)	1:A:20:THR:HA	1:A:55:LEU:HD21	6	0.02
(1,369)	1:A:20:THR:HA	1:A:55:LEU:HD22	6	0.02
(1,369)	1:A:20:THR:HA	1:A:55:LEU:HD23	6	0.02
(1,369)	1:A:20:THR:HA	1:A:55:LEU:HD21	10	0.02
(1,369)	1:A:20:THR:HA	1:A:55:LEU:HD22	10	0.02
(1,369)	1:A:20:THR:HA	1:A:55:LEU:HD23	10	0.02
(1,363)	1:A:17:ALA:HA	1:A:87:LEU:HD11	1	0.02
(1,363)	1:A:17:ALA:HA	1:A:87:LEU:HD12	1	0.02
(1,363)	1:A:17:ALA:HA	1:A:87:LEU:HD13	1	0.02
(1,363)	1:A:17:ALA:HA	1:A:87:LEU:HD11	8	0.02
(1,363)	1:A:17:ALA:HA	1:A:87:LEU:HD12	8	0.02
(1,363)	1:A:17:ALA:HA	1:A:87:LEU:HD13	8	0.02
(1,363)	1:A:17:ALA:HA	1:A:87:LEU:HD11	14	0.02
(1,363)	1:A:17:ALA:HA	1:A:87:LEU:HD12	14	0.02
(1,363)	1:A:17:ALA:HA	1:A:87:LEU:HD13	14	0.02
(1,362)	1:A:17:ALA:HA	1:A:55:LEU:HD21	12	0.02
(1,362)	1:A:17:ALA:HA	1:A:55:LEU:HD22	12	0.02
(1,362)	1:A:17:ALA:HA	1:A:55:LEU:HD23	12	0.02
(1,340)	1:A:61:GLY:H	1:A:89:LEU:HB2	5	0.02
(1,340)	1:A:61:GLY:H	1:A:89:LEU:HB3	5	0.02
(1,330)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG21	2	0.02
(1,330)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG22	2	0.02
(1,330)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG23	2	0.02
(1,330)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG21	8	0.02
(1,330)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG22	8	0.02
(1,330)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG23	8	0.02
(1,330)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG21	14	0.02
(1,330)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG22	14	0.02

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,330)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG23	14	0.02
(1,329)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG11	6	0.02
(1,329)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG12	6	0.02
(1,329)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG13	6	0.02
(1,329)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG11	8	0.02
(1,329)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG12	8	0.02
(1,329)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG13	8	0.02
(1,329)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG11	9	0.02
(1,329)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG12	9	0.02
(1,329)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG13	9	0.02
(1,329)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG11	10	0.02
(1,329)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG12	10	0.02
(1,329)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG13	10	0.02
(1,329)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG11	13	0.02
(1,329)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG12	13	0.02
(1,329)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG13	13	0.02
(1,329)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG11	14	0.02
(1,329)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG12	14	0.02
(1,329)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG13	14	0.02
(1,329)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG11	16	0.02
(1,329)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG12	16	0.02
(1,329)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG13	16	0.02
(1,329)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG11	17	0.02
(1,329)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG12	17	0.02
(1,329)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG13	17	0.02
(1,323)	1:A:25:MET:H	1:A:89:LEU:HD11	1	0.02
(1,323)	1:A:25:MET:H	1:A:89:LEU:HD12	1	0.02
(1,323)	1:A:25:MET:H	1:A:89:LEU:HD13	1	0.02
(1,323)	1:A:25:MET:H	1:A:89:LEU:HD11	3	0.02
(1,323)	1:A:25:MET:H	1:A:89:LEU:HD12	3	0.02
(1,323)	1:A:25:MET:H	1:A:89:LEU:HD13	3	0.02
(1,323)	1:A:25:MET:H	1:A:89:LEU:HD11	8	0.02
(1,323)	1:A:25:MET:H	1:A:89:LEU:HD12	8	0.02
(1,323)	1:A:25:MET:H	1:A:89:LEU:HD13	8	0.02
(1,323)	1:A:25:MET:H	1:A:89:LEU:HD11	9	0.02
(1,323)	1:A:25:MET:H	1:A:89:LEU:HD12	9	0.02
(1,323)	1:A:25:MET:H	1:A:89:LEU:HD13	9	0.02
(1,323)	1:A:25:MET:H	1:A:89:LEU:HD11	11	0.02
(1,323)	1:A:25:MET:H	1:A:89:LEU:HD12	11	0.02
(1,323)	1:A:25:MET:H	1:A:89:LEU:HD13	11	0.02
(1,320)	1:A:18:LYS:H	1:A:55:LEU:HD11	12	0.02
(1,320)	1:A:18:LYS:H	1:A:55:LEU:HD12	12	0.02

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,320)	1:A:18:LYS:H	1:A:55:LEU:HD13	12	0.02
(1,314)	1:A:13:LEU:H	1:A:33:VAL:HB	9	0.02
(1,314)	1:A:13:LEU:H	1:A:33:VAL:HB	12	0.02
(1,314)	1:A:13:LEU:H	1:A:33:VAL:HB	15	0.02
(1,311)	1:A:11:LEU:H	1:A:35:VAL:HB	5	0.02
(1,311)	1:A:11:LEU:H	1:A:35:VAL:HB	11	0.02
(1,300)	1:A:37:THR:HB	1:A:78:VAL:H	4	0.02
(1,293)	1:A:26:ILE:HG12	1:A:90:GLU:H	9	0.02
(1,293)	1:A:26:ILE:HG13	1:A:90:GLU:H	9	0.02
(1,281)	1:A:13:LEU:HD21	1:A:51:ALA:H	6	0.02
(1,281)	1:A:13:LEU:HD22	1:A:51:ALA:H	6	0.02
(1,281)	1:A:13:LEU:HD23	1:A:51:ALA:H	6	0.02
(1,281)	1:A:13:LEU:HD21	1:A:51:ALA:H	17	0.02
(1,281)	1:A:13:LEU:HD22	1:A:51:ALA:H	17	0.02
(1,281)	1:A:13:LEU:HD23	1:A:51:ALA:H	17	0.02
(1,281)	1:A:13:LEU:HD21	1:A:51:ALA:H	18	0.02
(1,281)	1:A:13:LEU:HD22	1:A:51:ALA:H	18	0.02
(1,281)	1:A:13:LEU:HD23	1:A:51:ALA:H	18	0.02
(1,271)	1:A:64:ASP:HA	1:A:86:THR:HA	13	0.02
(1,258)	1:A:65:TYR:H	1:A:84:VAL:HA	5	0.02
(1,242)	1:A:11:LEU:H	1:A:34:ARG:HA	10	0.02
(1,238)	1:A:63:HIS:HA	1:A:87:LEU:H	19	0.02
(1,227)	1:A:14:SER:HA	1:A:32:SER:H	13	0.02
(1,227)	1:A:14:SER:HA	1:A:32:SER:H	14	0.02
(1,227)	1:A:14:SER:HA	1:A:32:SER:H	16	0.02
(1,224)	1:A:10:THR:HA	1:A:35:VAL:H	4	0.02
(1,224)	1:A:10:THR:HA	1:A:35:VAL:H	5	0.02
(1,219)	1:A:54:ASP:H	1:A:66:GLU:H	9	0.02
(1,219)	1:A:54:ASP:H	1:A:66:GLU:H	12	0.02
(1,204)	1:A:17:ALA:HA	1:A:20:THR:HB	1	0.02
(1,204)	1:A:17:ALA:HA	1:A:20:THR:HB	5	0.02
(1,204)	1:A:17:ALA:HA	1:A:20:THR:HB	15	0.02
(1,204)	1:A:17:ALA:HA	1:A:20:THR:HB	20	0.02
(1,196)	1:A:77:ILE:HG21	1:A:79:GLU:H	3	0.02
(1,196)	1:A:77:ILE:HG22	1:A:79:GLU:H	3	0.02
(1,196)	1:A:77:ILE:HG23	1:A:79:GLU:H	3	0.02
(1,196)	1:A:77:ILE:HG21	1:A:79:GLU:H	10	0.02
(1,196)	1:A:77:ILE:HG22	1:A:79:GLU:H	10	0.02
(1,196)	1:A:77:ILE:HG23	1:A:79:GLU:H	10	0.02
(1,196)	1:A:77:ILE:HG21	1:A:79:GLU:H	12	0.02
(1,196)	1:A:77:ILE:HG22	1:A:79:GLU:H	12	0.02
(1,196)	1:A:77:ILE:HG23	1:A:79:GLU:H	12	0.02

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,196)	1:A:77:ILE:HG21	1:A:79:GLU:H	14	0.02
(1,196)	1:A:77:ILE:HG22	1:A:79:GLU:H	14	0.02
(1,196)	1:A:77:ILE:HG23	1:A:79:GLU:H	14	0.02
(1,196)	1:A:77:ILE:HG21	1:A:79:GLU:H	15	0.02
(1,196)	1:A:77:ILE:HG22	1:A:79:GLU:H	15	0.02
(1,196)	1:A:77:ILE:HG23	1:A:79:GLU:H	15	0.02
(1,196)	1:A:77:ILE:HG21	1:A:79:GLU:H	16	0.02
(1,196)	1:A:77:ILE:HG22	1:A:79:GLU:H	16	0.02
(1,196)	1:A:77:ILE:HG23	1:A:79:GLU:H	16	0.02
(1,193)	1:A:26:ILE:HG21	1:A:28:THR:H	2	0.02
(1,193)	1:A:26:ILE:HG22	1:A:28:THR:H	2	0.02
(1,193)	1:A:26:ILE:HG23	1:A:28:THR:H	2	0.02
(1,179)	1:A:24:SER:H	1:A:25:MET:HB2	3	0.02
(1,179)	1:A:24:SER:H	1:A:25:MET:HB3	3	0.02
(1,175)	1:A:89:LEU:HD11	1:A:90:GLU:H	2	0.02
(1,175)	1:A:89:LEU:HD12	1:A:90:GLU:H	2	0.02
(1,175)	1:A:89:LEU:HD13	1:A:90:GLU:H	2	0.02
(1,174)	1:A:89:LEU:HG	1:A:90:GLU:H	11	0.02
(1,174)	1:A:89:LEU:HG	1:A:90:GLU:H	18	0.02
(1,159)	1:A:76:LYS:HD2	1:A:77:ILE:H	6	0.02
(1,159)	1:A:76:LYS:HD3	1:A:77:ILE:H	6	0.02
(1,159)	1:A:76:LYS:HD2	1:A:77:ILE:H	9	0.02
(1,159)	1:A:76:LYS:HD3	1:A:77:ILE:H	9	0.02
(1,159)	1:A:76:LYS:HD2	1:A:77:ILE:H	10	0.02
(1,159)	1:A:76:LYS:HD3	1:A:77:ILE:H	10	0.02
(1,159)	1:A:76:LYS:HD2	1:A:77:ILE:H	11	0.02
(1,159)	1:A:76:LYS:HD3	1:A:77:ILE:H	11	0.02
(1,157)	1:A:75:ILE:HD11	1:A:76:LYS:H	6	0.02
(1,157)	1:A:75:ILE:HD12	1:A:76:LYS:H	6	0.02
(1,157)	1:A:75:ILE:HD13	1:A:76:LYS:H	6	0.02
(1,144)	1:A:49:LEU:HD11	1:A:50:PHE:H	3	0.02
(1,144)	1:A:49:LEU:HD12	1:A:50:PHE:H	3	0.02
(1,144)	1:A:49:LEU:HD13	1:A:50:PHE:H	3	0.02
(1,144)	1:A:49:LEU:HD11	1:A:50:PHE:H	8	0.02
(1,144)	1:A:49:LEU:HD12	1:A:50:PHE:H	8	0.02
(1,144)	1:A:49:LEU:HD13	1:A:50:PHE:H	8	0.02
(1,144)	1:A:49:LEU:HD11	1:A:50:PHE:H	15	0.02
(1,144)	1:A:49:LEU:HD12	1:A:50:PHE:H	15	0.02
(1,144)	1:A:49:LEU:HD13	1:A:50:PHE:H	15	0.02
(1,113)	1:A:11:LEU:HG	1:A:12:THR:H	13	0.02
(1,1)	1:A:19:ASN:H	1:A:20:THR:H	11	0.02
(1,832)	1:A:36:LYS:O	1:A:79:GLU:H	8	0.01

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,832)	1:A:36:LYS:O	1:A:79:GLU:H	18	0.01
(1,832)	1:A:36:LYS:O	1:A:79:GLU:H	20	0.01
(1,830)	1:A:38:GLU:O	1:A:76:LYS:H	11	0.01
(1,830)	1:A:38:GLU:O	1:A:76:LYS:H	20	0.01
(1,829)	1:A:50:PHE:O	1:A:70:GLU:N	8	0.01
(1,829)	1:A:50:PHE:O	1:A:70:GLU:N	10	0.01
(1,820)	1:A:16:ILE:O	1:A:53:VAL:H	3	0.01
(1,820)	1:A:16:ILE:O	1:A:53:VAL:H	8	0.01
(1,818)	1:A:45:ASN:O	1:A:49:LEU:H	12	0.01
(1,814)	1:A:14:SER:O	1:A:51:ALA:H	4	0.01
(1,814)	1:A:14:SER:O	1:A:51:ALA:H	15	0.01
(1,814)	1:A:14:SER:O	1:A:51:ALA:H	20	0.01
(1,802)	1:A:53:VAL:O	1:A:18:LYS:H	3	0.01
(1,802)	1:A:53:VAL:O	1:A:18:LYS:H	7	0.01
(1,802)	1:A:53:VAL:O	1:A:18:LYS:H	12	0.01
(1,798)	1:A:31:PRO:O	1:A:15:LEU:H	4	0.01
(1,798)	1:A:31:PRO:O	1:A:15:LEU:H	10	0.01
(1,798)	1:A:31:PRO:O	1:A:15:LEU:H	11	0.01
(1,798)	1:A:31:PRO:O	1:A:15:LEU:H	20	0.01
(1,781)	1:A:82:PRO:HA	1:A:83:ARG:HE	2	0.01
(1,781)	1:A:82:PRO:HA	1:A:83:ARG:HE	6	0.01
(1,779)	1:A:81:SER:HA	1:A:82:PRO:HA	9	0.01
(1,779)	1:A:81:SER:HA	1:A:82:PRO:HA	11	0.01
(1,759)	1:A:33:VAL:HG21	1:A:34:ARG:HB2	5	0.01
(1,759)	1:A:33:VAL:HG21	1:A:34:ARG:HB3	5	0.01
(1,759)	1:A:33:VAL:HG22	1:A:34:ARG:HB2	5	0.01
(1,759)	1:A:33:VAL:HG22	1:A:34:ARG:HB3	5	0.01
(1,759)	1:A:33:VAL:HG23	1:A:34:ARG:HB2	5	0.01
(1,759)	1:A:33:VAL:HG23	1:A:34:ARG:HB3	5	0.01
(1,759)	1:A:33:VAL:HG21	1:A:34:ARG:HB2	17	0.01
(1,759)	1:A:33:VAL:HG21	1:A:34:ARG:HB3	17	0.01
(1,759)	1:A:33:VAL:HG22	1:A:34:ARG:HB2	17	0.01
(1,759)	1:A:33:VAL:HG22	1:A:34:ARG:HB3	17	0.01
(1,759)	1:A:33:VAL:HG23	1:A:34:ARG:HB2	17	0.01
(1,759)	1:A:33:VAL:HG23	1:A:34:ARG:HB3	17	0.01
(1,756)	1:A:30:LEU:HD21	1:A:31:PRO:HD2	10	0.01
(1,756)	1:A:30:LEU:HD22	1:A:31:PRO:HD2	10	0.01
(1,756)	1:A:30:LEU:HD23	1:A:31:PRO:HD2	10	0.01
(1,7)	1:A:43:SER:H	1:A:44:ILE:H	6	0.01
(1,578)	1:A:82:PRO:HG2	1:A:85:VAL:HG11	10	0.01
(1,578)	1:A:82:PRO:HG2	1:A:85:VAL:HG12	10	0.01
(1,578)	1:A:82:PRO:HG2	1:A:85:VAL:HG13	10	0.01

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,578)	1:A:82:PRO:HG3	1:A:85:VAL:HG11	10	0.01
(1,578)	1:A:82:PRO:HG3	1:A:85:VAL:HG12	10	0.01
(1,578)	1:A:82:PRO:HG3	1:A:85:VAL:HG13	10	0.01
(1,572)	1:A:72:ILE:HG21	1:A:75:ILE:HB	16	0.01
(1,572)	1:A:72:ILE:HG22	1:A:75:ILE:HB	16	0.01
(1,572)	1:A:72:ILE:HG23	1:A:75:ILE:HB	16	0.01
(1,565)	1:A:66:GLU:HG2	1:A:84:VAL:HG21	3	0.01
(1,565)	1:A:66:GLU:HG2	1:A:84:VAL:HG22	3	0.01
(1,565)	1:A:66:GLU:HG2	1:A:84:VAL:HG23	3	0.01
(1,565)	1:A:66:GLU:HG3	1:A:84:VAL:HG21	3	0.01
(1,565)	1:A:66:GLU:HG3	1:A:84:VAL:HG22	3	0.01
(1,565)	1:A:66:GLU:HG3	1:A:84:VAL:HG23	3	0.01
(1,557)	1:A:64:ASP:HB2	1:A:84:VAL:HG11	4	0.01
(1,557)	1:A:64:ASP:HB2	1:A:84:VAL:HG12	4	0.01
(1,557)	1:A:64:ASP:HB2	1:A:84:VAL:HG13	4	0.01
(1,557)	1:A:64:ASP:HB3	1:A:84:VAL:HG11	4	0.01
(1,557)	1:A:64:ASP:HB3	1:A:84:VAL:HG12	4	0.01
(1,557)	1:A:64:ASP:HB3	1:A:84:VAL:HG13	4	0.01
(1,557)	1:A:64:ASP:HB2	1:A:84:VAL:HG11	17	0.01
(1,557)	1:A:64:ASP:HB2	1:A:84:VAL:HG12	17	0.01
(1,557)	1:A:64:ASP:HB2	1:A:84:VAL:HG13	17	0.01
(1,557)	1:A:64:ASP:HB3	1:A:84:VAL:HG11	17	0.01
(1,557)	1:A:64:ASP:HB3	1:A:84:VAL:HG12	17	0.01
(1,557)	1:A:64:ASP:HB3	1:A:84:VAL:HG13	17	0.01
(1,557)	1:A:64:ASP:HB2	1:A:84:VAL:HG11	20	0.01
(1,557)	1:A:64:ASP:HB2	1:A:84:VAL:HG12	20	0.01
(1,557)	1:A:64:ASP:HB2	1:A:84:VAL:HG13	20	0.01
(1,557)	1:A:64:ASP:HB3	1:A:84:VAL:HG11	20	0.01
(1,557)	1:A:64:ASP:HB3	1:A:84:VAL:HG12	20	0.01
(1,557)	1:A:64:ASP:HB3	1:A:84:VAL:HG13	20	0.01
(1,555)	1:A:62:GLU:HG2	1:A:86:THR:HG21	1	0.01
(1,555)	1:A:62:GLU:HG2	1:A:86:THR:HG22	1	0.01
(1,555)	1:A:62:GLU:HG2	1:A:86:THR:HG23	1	0.01
(1,555)	1:A:62:GLU:HG3	1:A:86:THR:HG21	1	0.01
(1,555)	1:A:62:GLU:HG3	1:A:86:THR:HG22	1	0.01
(1,555)	1:A:62:GLU:HG3	1:A:86:THR:HG23	1	0.01
(1,554)	1:A:62:GLU:HB2	1:A:86:THR:HG21	7	0.01
(1,554)	1:A:62:GLU:HB2	1:A:86:THR:HG22	7	0.01
(1,554)	1:A:62:GLU:HB2	1:A:86:THR:HG23	7	0.01
(1,554)	1:A:62:GLU:HB3	1:A:86:THR:HG21	7	0.01
(1,554)	1:A:62:GLU:HB3	1:A:86:THR:HG22	7	0.01
(1,554)	1:A:62:GLU:HB3	1:A:86:THR:HG23	7	0.01

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,552)	1:A:58:SER:HB2	1:A:89:LEU:HD11	15	0.01
(1,552)	1:A:58:SER:HB2	1:A:89:LEU:HD12	15	0.01
(1,552)	1:A:58:SER:HB2	1:A:89:LEU:HD13	15	0.01
(1,552)	1:A:58:SER:HB3	1:A:89:LEU:HD11	15	0.01
(1,552)	1:A:58:SER:HB3	1:A:89:LEU:HD12	15	0.01
(1,552)	1:A:58:SER:HB3	1:A:89:LEU:HD13	15	0.01
(1,550)	1:A:55:LEU:HD21	1:A:89:LEU:HD11	15	0.01
(1,550)	1:A:55:LEU:HD21	1:A:89:LEU:HD12	15	0.01
(1,550)	1:A:55:LEU:HD21	1:A:89:LEU:HD13	15	0.01
(1,550)	1:A:55:LEU:HD22	1:A:89:LEU:HD11	15	0.01
(1,550)	1:A:55:LEU:HD22	1:A:89:LEU:HD12	15	0.01
(1,550)	1:A:55:LEU:HD22	1:A:89:LEU:HD13	15	0.01
(1,550)	1:A:55:LEU:HD23	1:A:89:LEU:HD11	15	0.01
(1,550)	1:A:55:LEU:HD23	1:A:89:LEU:HD12	15	0.01
(1,550)	1:A:55:LEU:HD23	1:A:89:LEU:HD13	15	0.01
(1,548)	1:A:55:LEU:HD11	1:A:89:LEU:HG	15	0.01
(1,548)	1:A:55:LEU:HD12	1:A:89:LEU:HG	15	0.01
(1,548)	1:A:55:LEU:HD13	1:A:89:LEU:HG	15	0.01
(1,543)	1:A:53:VAL:HG11	1:A:55:LEU:HD11	3	0.01
(1,543)	1:A:53:VAL:HG11	1:A:55:LEU:HD12	3	0.01
(1,543)	1:A:53:VAL:HG11	1:A:55:LEU:HD13	3	0.01
(1,543)	1:A:53:VAL:HG12	1:A:55:LEU:HD11	3	0.01
(1,543)	1:A:53:VAL:HG12	1:A:55:LEU:HD12	3	0.01
(1,543)	1:A:53:VAL:HG12	1:A:55:LEU:HD13	3	0.01
(1,543)	1:A:53:VAL:HG13	1:A:55:LEU:HD11	3	0.01
(1,543)	1:A:53:VAL:HG13	1:A:55:LEU:HD12	3	0.01
(1,543)	1:A:53:VAL:HG13	1:A:55:LEU:HD13	3	0.01
(1,543)	1:A:53:VAL:HG11	1:A:55:LEU:HD11	9	0.01
(1,543)	1:A:53:VAL:HG11	1:A:55:LEU:HD12	9	0.01
(1,543)	1:A:53:VAL:HG11	1:A:55:LEU:HD13	9	0.01
(1,543)	1:A:53:VAL:HG12	1:A:55:LEU:HD11	9	0.01
(1,543)	1:A:53:VAL:HG12	1:A:55:LEU:HD12	9	0.01
(1,543)	1:A:53:VAL:HG12	1:A:55:LEU:HD13	9	0.01
(1,543)	1:A:53:VAL:HG13	1:A:55:LEU:HD11	9	0.01
(1,543)	1:A:53:VAL:HG13	1:A:55:LEU:HD12	9	0.01
(1,543)	1:A:53:VAL:HG13	1:A:55:LEU:HD13	9	0.01
(1,543)	1:A:53:VAL:HG11	1:A:55:LEU:HD11	19	0.01
(1,543)	1:A:53:VAL:HG11	1:A:55:LEU:HD12	19	0.01
(1,543)	1:A:53:VAL:HG11	1:A:55:LEU:HD13	19	0.01
(1,543)	1:A:53:VAL:HG12	1:A:55:LEU:HD11	19	0.01
(1,543)	1:A:53:VAL:HG12	1:A:55:LEU:HD12	19	0.01
(1,543)	1:A:53:VAL:HG12	1:A:55:LEU:HD13	19	0.01

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,543)	1:A:53:VAL:HG13	1:A:55:LEU:HD11	19	0.01
(1,543)	1:A:53:VAL:HG13	1:A:55:LEU:HD12	19	0.01
(1,543)	1:A:53:VAL:HG13	1:A:55:LEU:HD13	19	0.01
(1,539)	1:A:52:TYR:HB2	1:A:68:LYS:HD2	15	0.01
(1,539)	1:A:52:TYR:HB2	1:A:68:LYS:HD3	15	0.01
(1,539)	1:A:52:TYR:HB3	1:A:68:LYS:HD2	15	0.01
(1,539)	1:A:52:TYR:HB3	1:A:68:LYS:HD3	15	0.01
(1,538)	1:A:51:ALA:HB1	1:A:69:VAL:HG21	20	0.01
(1,538)	1:A:51:ALA:HB1	1:A:69:VAL:HG22	20	0.01
(1,538)	1:A:51:ALA:HB1	1:A:69:VAL:HG23	20	0.01
(1,538)	1:A:51:ALA:HB2	1:A:69:VAL:HG21	20	0.01
(1,538)	1:A:51:ALA:HB2	1:A:69:VAL:HG22	20	0.01
(1,538)	1:A:51:ALA:HB2	1:A:69:VAL:HG23	20	0.01
(1,538)	1:A:51:ALA:HB3	1:A:69:VAL:HG21	20	0.01
(1,538)	1:A:51:ALA:HB3	1:A:69:VAL:HG22	20	0.01
(1,538)	1:A:51:ALA:HB3	1:A:69:VAL:HG23	20	0.01
(1,534)	1:A:49:LEU:HD11	1:A:72:ILE:HD11	4	0.01
(1,534)	1:A:49:LEU:HD11	1:A:72:ILE:HD12	4	0.01
(1,534)	1:A:49:LEU:HD11	1:A:72:ILE:HD13	4	0.01
(1,534)	1:A:49:LEU:HD12	1:A:72:ILE:HD11	4	0.01
(1,534)	1:A:49:LEU:HD12	1:A:72:ILE:HD12	4	0.01
(1,534)	1:A:49:LEU:HD12	1:A:72:ILE:HD13	4	0.01
(1,534)	1:A:49:LEU:HD13	1:A:72:ILE:HD11	4	0.01
(1,534)	1:A:49:LEU:HD13	1:A:72:ILE:HD12	4	0.01
(1,534)	1:A:49:LEU:HD13	1:A:72:ILE:HD13	4	0.01
(1,527)	1:A:44:ILE:HG12	1:A:75:ILE:HG12	7	0.01
(1,527)	1:A:44:ILE:HG12	1:A:75:ILE:HG13	7	0.01
(1,527)	1:A:44:ILE:HG13	1:A:75:ILE:HG12	7	0.01
(1,527)	1:A:44:ILE:HG13	1:A:75:ILE:HG13	7	0.01
(1,525)	1:A:41:ASN:HD21	1:A:44:ILE:HD11	18	0.01
(1,525)	1:A:41:ASN:HD21	1:A:44:ILE:HD12	18	0.01
(1,525)	1:A:41:ASN:HD21	1:A:44:ILE:HD13	18	0.01
(1,525)	1:A:41:ASN:HD22	1:A:44:ILE:HD11	18	0.01
(1,525)	1:A:41:ASN:HD22	1:A:44:ILE:HD12	18	0.01
(1,525)	1:A:41:ASN:HD22	1:A:44:ILE:HD13	18	0.01
(1,524)	1:A:41:ASN:HB2	1:A:75:ILE:HD11	20	0.01
(1,524)	1:A:41:ASN:HB2	1:A:75:ILE:HD12	20	0.01
(1,524)	1:A:41:ASN:HB2	1:A:75:ILE:HD13	20	0.01
(1,524)	1:A:41:ASN:HB3	1:A:75:ILE:HD11	20	0.01
(1,524)	1:A:41:ASN:HB3	1:A:75:ILE:HD12	20	0.01
(1,524)	1:A:41:ASN:HB3	1:A:75:ILE:HD13	20	0.01
(1,520)	1:A:38:GLU:HG2	1:A:78:VAL:HG11	6	0.01

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,520)	1:A:38:GLU:HG2	1:A:78:VAL:HG12	6	0.01
(1,520)	1:A:38:GLU:HG2	1:A:78:VAL:HG13	6	0.01
(1,520)	1:A:38:GLU:HG3	1:A:78:VAL:HG11	6	0.01
(1,520)	1:A:38:GLU:HG3	1:A:78:VAL:HG12	6	0.01
(1,520)	1:A:38:GLU:HG3	1:A:78:VAL:HG13	6	0.01
(1,519)	1:A:38:GLU:HG2	1:A:78:VAL:HG21	9	0.01
(1,519)	1:A:38:GLU:HG2	1:A:78:VAL:HG22	9	0.01
(1,519)	1:A:38:GLU:HG2	1:A:78:VAL:HG23	9	0.01
(1,519)	1:A:38:GLU:HG3	1:A:78:VAL:HG21	9	0.01
(1,519)	1:A:38:GLU:HG3	1:A:78:VAL:HG22	9	0.01
(1,519)	1:A:38:GLU:HG3	1:A:78:VAL:HG23	9	0.01
(1,512)	1:A:37:THR:HB	1:A:75:ILE:HG21	7	0.01
(1,512)	1:A:37:THR:HB	1:A:75:ILE:HG22	7	0.01
(1,512)	1:A:37:THR:HB	1:A:75:ILE:HG23	7	0.01
(1,512)	1:A:37:THR:HB	1:A:75:ILE:HG21	12	0.01
(1,512)	1:A:37:THR:HB	1:A:75:ILE:HG22	12	0.01
(1,512)	1:A:37:THR:HB	1:A:75:ILE:HG23	12	0.01
(1,506)	1:A:36:LYS:HB2	1:A:78:VAL:HB	15	0.01
(1,506)	1:A:36:LYS:HB3	1:A:78:VAL:HB	15	0.01
(1,505)	1:A:35:VAL:HG11	1:A:79:GLU:HB2	12	0.01
(1,505)	1:A:35:VAL:HG11	1:A:79:GLU:HB3	12	0.01
(1,505)	1:A:35:VAL:HG12	1:A:79:GLU:HB2	12	0.01
(1,505)	1:A:35:VAL:HG12	1:A:79:GLU:HB3	12	0.01
(1,505)	1:A:35:VAL:HG13	1:A:79:GLU:HB2	12	0.01
(1,505)	1:A:35:VAL:HG13	1:A:79:GLU:HB3	12	0.01
(1,505)	1:A:35:VAL:HG11	1:A:79:GLU:HB2	17	0.01
(1,505)	1:A:35:VAL:HG11	1:A:79:GLU:HB3	17	0.01
(1,505)	1:A:35:VAL:HG12	1:A:79:GLU:HB2	17	0.01
(1,505)	1:A:35:VAL:HG12	1:A:79:GLU:HB3	17	0.01
(1,505)	1:A:35:VAL:HG13	1:A:79:GLU:HB2	17	0.01
(1,505)	1:A:35:VAL:HG13	1:A:79:GLU:HB3	17	0.01
(1,501)	1:A:33:VAL:HG11	1:A:82:PRO:HD2	6	0.01
(1,501)	1:A:33:VAL:HG11	1:A:82:PRO:HD3	6	0.01
(1,501)	1:A:33:VAL:HG12	1:A:82:PRO:HD2	6	0.01
(1,501)	1:A:33:VAL:HG12	1:A:82:PRO:HD3	6	0.01
(1,501)	1:A:33:VAL:HG13	1:A:82:PRO:HD2	6	0.01
(1,501)	1:A:33:VAL:HG13	1:A:82:PRO:HD3	6	0.01
(1,496)	1:A:31:PRO:HG2	1:A:85:VAL:HG21	7	0.01
(1,496)	1:A:31:PRO:HG2	1:A:85:VAL:HG22	7	0.01
(1,496)	1:A:31:PRO:HG2	1:A:85:VAL:HG23	7	0.01
(1,496)	1:A:31:PRO:HG3	1:A:85:VAL:HG21	7	0.01
(1,496)	1:A:31:PRO:HG3	1:A:85:VAL:HG22	7	0.01

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,496)	1:A:31:PRO:HG3	1:A:85:VAL:HG23	7	0.01
(1,496)	1:A:31:PRO:HG2	1:A:85:VAL:HG21	11	0.01
(1,496)	1:A:31:PRO:HG2	1:A:85:VAL:HG22	11	0.01
(1,496)	1:A:31:PRO:HG2	1:A:85:VAL:HG23	11	0.01
(1,496)	1:A:31:PRO:HG3	1:A:85:VAL:HG21	11	0.01
(1,496)	1:A:31:PRO:HG3	1:A:85:VAL:HG22	11	0.01
(1,496)	1:A:31:PRO:HG3	1:A:85:VAL:HG23	11	0.01
(1,494)	1:A:30:LEU:HD11	1:A:53:VAL:HG11	1	0.01
(1,494)	1:A:30:LEU:HD11	1:A:53:VAL:HG12	1	0.01
(1,494)	1:A:30:LEU:HD11	1:A:53:VAL:HG13	1	0.01
(1,494)	1:A:30:LEU:HD12	1:A:53:VAL:HG11	1	0.01
(1,494)	1:A:30:LEU:HD12	1:A:53:VAL:HG12	1	0.01
(1,494)	1:A:30:LEU:HD12	1:A:53:VAL:HG13	1	0.01
(1,494)	1:A:30:LEU:HD13	1:A:53:VAL:HG11	1	0.01
(1,494)	1:A:30:LEU:HD13	1:A:53:VAL:HG12	1	0.01
(1,494)	1:A:30:LEU:HD13	1:A:53:VAL:HG13	1	0.01
(1,490)	1:A:27:MET:HG2	1:A:90:GLU:HB2	4	0.01
(1,490)	1:A:27:MET:HG2	1:A:90:GLU:HB3	4	0.01
(1,490)	1:A:27:MET:HG3	1:A:90:GLU:HB2	4	0.01
(1,490)	1:A:27:MET:HG3	1:A:90:GLU:HB3	4	0.01
(1,490)	1:A:27:MET:HG2	1:A:90:GLU:HB2	10	0.01
(1,490)	1:A:27:MET:HG2	1:A:90:GLU:HB3	10	0.01
(1,490)	1:A:27:MET:HG3	1:A:90:GLU:HB2	10	0.01
(1,490)	1:A:27:MET:HG3	1:A:90:GLU:HB3	10	0.01
(1,490)	1:A:27:MET:HG2	1:A:90:GLU:HB2	17	0.01
(1,490)	1:A:27:MET:HG2	1:A:90:GLU:HB3	17	0.01
(1,490)	1:A:27:MET:HG3	1:A:90:GLU:HB2	17	0.01
(1,490)	1:A:27:MET:HG3	1:A:90:GLU:HB3	17	0.01
(1,470)	1:A:20:THR:HG21	1:A:89:LEU:HD11	20	0.01
(1,470)	1:A:20:THR:HG21	1:A:89:LEU:HD12	20	0.01
(1,470)	1:A:20:THR:HG21	1:A:89:LEU:HD13	20	0.01
(1,470)	1:A:20:THR:HG22	1:A:89:LEU:HD11	20	0.01
(1,470)	1:A:20:THR:HG22	1:A:89:LEU:HD12	20	0.01
(1,470)	1:A:20:THR:HG22	1:A:89:LEU:HD13	20	0.01
(1,470)	1:A:20:THR:HG23	1:A:89:LEU:HD11	20	0.01
(1,470)	1:A:20:THR:HG23	1:A:89:LEU:HD12	20	0.01
(1,470)	1:A:20:THR:HG23	1:A:89:LEU:HD13	20	0.01
(1,469)	1:A:20:THR:HG21	1:A:55:LEU:HD21	6	0.01
(1,469)	1:A:20:THR:HG21	1:A:55:LEU:HD22	6	0.01
(1,469)	1:A:20:THR:HG21	1:A:55:LEU:HD23	6	0.01
(1,469)	1:A:20:THR:HG22	1:A:55:LEU:HD21	6	0.01
(1,469)	1:A:20:THR:HG22	1:A:55:LEU:HD22	6	0.01

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,469)	1:A:20:THR:HG22	1:A:55:LEU:HD23	6	0.01
(1,469)	1:A:20:THR:HG23	1:A:55:LEU:HD21	6	0.01
(1,469)	1:A:20:THR:HG23	1:A:55:LEU:HD22	6	0.01
(1,469)	1:A:20:THR:HG23	1:A:55:LEU:HD23	6	0.01
(1,468)	1:A:20:THR:HG21	1:A:55:LEU:HD11	9	0.01
(1,468)	1:A:20:THR:HG21	1:A:55:LEU:HD12	9	0.01
(1,468)	1:A:20:THR:HG21	1:A:55:LEU:HD13	9	0.01
(1,468)	1:A:20:THR:HG22	1:A:55:LEU:HD11	9	0.01
(1,468)	1:A:20:THR:HG22	1:A:55:LEU:HD12	9	0.01
(1,468)	1:A:20:THR:HG22	1:A:55:LEU:HD13	9	0.01
(1,468)	1:A:20:THR:HG23	1:A:55:LEU:HD11	9	0.01
(1,468)	1:A:20:THR:HG23	1:A:55:LEU:HD12	9	0.01
(1,468)	1:A:20:THR:HG23	1:A:55:LEU:HD13	9	0.01
(1,468)	1:A:20:THR:HG21	1:A:55:LEU:HD11	19	0.01
(1,468)	1:A:20:THR:HG21	1:A:55:LEU:HD12	19	0.01
(1,468)	1:A:20:THR:HG21	1:A:55:LEU:HD13	19	0.01
(1,468)	1:A:20:THR:HG22	1:A:55:LEU:HD11	19	0.01
(1,468)	1:A:20:THR:HG22	1:A:55:LEU:HD12	19	0.01
(1,468)	1:A:20:THR:HG22	1:A:55:LEU:HD13	19	0.01
(1,468)	1:A:20:THR:HG23	1:A:55:LEU:HD11	19	0.01
(1,468)	1:A:20:THR:HG23	1:A:55:LEU:HD12	19	0.01
(1,468)	1:A:20:THR:HG23	1:A:55:LEU:HD13	19	0.01
(1,462)	1:A:17:ALA:HB1	1:A:89:LEU:HD21	3	0.01
(1,462)	1:A:17:ALA:HB1	1:A:89:LEU:HD22	3	0.01
(1,462)	1:A:17:ALA:HB1	1:A:89:LEU:HD23	3	0.01
(1,462)	1:A:17:ALA:HB2	1:A:89:LEU:HD21	3	0.01
(1,462)	1:A:17:ALA:HB2	1:A:89:LEU:HD22	3	0.01
(1,462)	1:A:17:ALA:HB2	1:A:89:LEU:HD23	3	0.01
(1,462)	1:A:17:ALA:HB3	1:A:89:LEU:HD21	3	0.01
(1,462)	1:A:17:ALA:HB3	1:A:89:LEU:HD22	3	0.01
(1,462)	1:A:17:ALA:HB3	1:A:89:LEU:HD23	3	0.01
(1,462)	1:A:17:ALA:HB1	1:A:89:LEU:HD21	14	0.01
(1,462)	1:A:17:ALA:HB1	1:A:89:LEU:HD22	14	0.01
(1,462)	1:A:17:ALA:HB1	1:A:89:LEU:HD23	14	0.01
(1,462)	1:A:17:ALA:HB2	1:A:89:LEU:HD21	14	0.01
(1,462)	1:A:17:ALA:HB2	1:A:89:LEU:HD22	14	0.01
(1,462)	1:A:17:ALA:HB2	1:A:89:LEU:HD23	14	0.01
(1,462)	1:A:17:ALA:HB3	1:A:89:LEU:HD21	14	0.01
(1,462)	1:A:17:ALA:HB3	1:A:89:LEU:HD22	14	0.01
(1,462)	1:A:17:ALA:HB3	1:A:89:LEU:HD23	14	0.01
(1,462)	1:A:17:ALA:HB1	1:A:89:LEU:HD21	18	0.01
(1,462)	1:A:17:ALA:HB1	1:A:89:LEU:HD22	18	0.01

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,462)	1:A:17:ALA:HB1	1:A:89:LEU:HD23	18	0.01
(1,462)	1:A:17:ALA:HB2	1:A:89:LEU:HD21	18	0.01
(1,462)	1:A:17:ALA:HB2	1:A:89:LEU:HD22	18	0.01
(1,462)	1:A:17:ALA:HB2	1:A:89:LEU:HD23	18	0.01
(1,462)	1:A:17:ALA:HB3	1:A:89:LEU:HD21	18	0.01
(1,462)	1:A:17:ALA:HB3	1:A:89:LEU:HD22	18	0.01
(1,462)	1:A:17:ALA:HB3	1:A:89:LEU:HD23	18	0.01
(1,451)	1:A:16:ILE:HD11	1:A:18:LYS:HE2	4	0.01
(1,451)	1:A:16:ILE:HD11	1:A:18:LYS:HE3	4	0.01
(1,451)	1:A:16:ILE:HD12	1:A:18:LYS:HE2	4	0.01
(1,451)	1:A:16:ILE:HD12	1:A:18:LYS:HE3	4	0.01
(1,451)	1:A:16:ILE:HD13	1:A:18:LYS:HE2	4	0.01
(1,451)	1:A:16:ILE:HD13	1:A:18:LYS:HE3	4	0.01
(1,451)	1:A:16:ILE:HD11	1:A:18:LYS:HE2	9	0.01
(1,451)	1:A:16:ILE:HD11	1:A:18:LYS:HE3	9	0.01
(1,451)	1:A:16:ILE:HD12	1:A:18:LYS:HE2	9	0.01
(1,451)	1:A:16:ILE:HD12	1:A:18:LYS:HE3	9	0.01
(1,451)	1:A:16:ILE:HD13	1:A:18:LYS:HE2	9	0.01
(1,451)	1:A:16:ILE:HD13	1:A:18:LYS:HE3	9	0.01
(1,441)	1:A:15:LEU:HD21	1:A:31:PRO:HB2	3	0.01
(1,441)	1:A:15:LEU:HD21	1:A:31:PRO:HB3	3	0.01
(1,441)	1:A:15:LEU:HD22	1:A:31:PRO:HB2	3	0.01
(1,441)	1:A:15:LEU:HD22	1:A:31:PRO:HB3	3	0.01
(1,441)	1:A:15:LEU:HD23	1:A:31:PRO:HB2	3	0.01
(1,441)	1:A:15:LEU:HD23	1:A:31:PRO:HB3	3	0.01
(1,435)	1:A:15:LEU:HB2	1:A:33:VAL:HG21	11	0.01
(1,435)	1:A:15:LEU:HB2	1:A:33:VAL:HG22	11	0.01
(1,435)	1:A:15:LEU:HB2	1:A:33:VAL:HG23	11	0.01
(1,435)	1:A:15:LEU:HB3	1:A:33:VAL:HG21	11	0.01
(1,435)	1:A:15:LEU:HB3	1:A:33:VAL:HG22	11	0.01
(1,435)	1:A:15:LEU:HB3	1:A:33:VAL:HG23	11	0.01
(1,435)	1:A:15:LEU:HB2	1:A:33:VAL:HG21	15	0.01
(1,435)	1:A:15:LEU:HB2	1:A:33:VAL:HG22	15	0.01
(1,435)	1:A:15:LEU:HB2	1:A:33:VAL:HG23	15	0.01
(1,435)	1:A:15:LEU:HB3	1:A:33:VAL:HG21	15	0.01
(1,435)	1:A:15:LEU:HB3	1:A:33:VAL:HG22	15	0.01
(1,435)	1:A:15:LEU:HB3	1:A:33:VAL:HG23	15	0.01
(1,416)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:35:VAL:HG21	10	0.01
(1,416)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:35:VAL:HG22	10	0.01
(1,416)	1:A:11:LEU:HB2	1:A:35:VAL:HG23	10	0.01
(1,416)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:35:VAL:HG21	10	0.01
(1,416)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:35:VAL:HG22	10	0.01

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,416)	1:A:11:LEU:HB3	1:A:35:VAL:HG23	10	0.01
(1,412)	1:A:10:THR:HG21	1:A:34:ARG:HG2	4	0.01
(1,412)	1:A:10:THR:HG21	1:A:34:ARG:HG3	4	0.01
(1,412)	1:A:10:THR:HG22	1:A:34:ARG:HG2	4	0.01
(1,412)	1:A:10:THR:HG22	1:A:34:ARG:HG3	4	0.01
(1,412)	1:A:10:THR:HG23	1:A:34:ARG:HG2	4	0.01
(1,412)	1:A:10:THR:HG23	1:A:34:ARG:HG3	4	0.01
(1,410)	1:A:9:PRO:HD2	1:A:75:ILE:HD11	3	0.01
(1,410)	1:A:9:PRO:HD2	1:A:75:ILE:HD12	3	0.01
(1,410)	1:A:9:PRO:HD2	1:A:75:ILE:HD13	3	0.01
(1,410)	1:A:9:PRO:HD3	1:A:75:ILE:HD11	3	0.01
(1,410)	1:A:9:PRO:HD3	1:A:75:ILE:HD12	3	0.01
(1,410)	1:A:9:PRO:HD3	1:A:75:ILE:HD13	3	0.01
(1,409)	1:A:9:PRO:HD2	1:A:41:ASN:HD21	19	0.01
(1,409)	1:A:9:PRO:HD2	1:A:41:ASN:HD22	19	0.01
(1,409)	1:A:9:PRO:HD3	1:A:41:ASN:HD21	19	0.01
(1,409)	1:A:9:PRO:HD3	1:A:41:ASN:HD22	19	0.01
(1,405)	1:A:71:PRO:HA	1:A:77:ILE:HD11	13	0.01
(1,405)	1:A:71:PRO:HA	1:A:77:ILE:HD12	13	0.01
(1,405)	1:A:71:PRO:HA	1:A:77:ILE:HD13	13	0.01
(1,404)	1:A:71:PRO:HA	1:A:77:ILE:HG21	15	0.01
(1,404)	1:A:71:PRO:HA	1:A:77:ILE:HG22	15	0.01
(1,404)	1:A:71:PRO:HA	1:A:77:ILE:HG23	15	0.01
(1,404)	1:A:71:PRO:HA	1:A:77:ILE:HG21	17	0.01
(1,404)	1:A:71:PRO:HA	1:A:77:ILE:HG22	17	0.01
(1,404)	1:A:71:PRO:HA	1:A:77:ILE:HG23	17	0.01
(1,396)	1:A:60:PRO:HA	1:A:89:LEU:HD21	19	0.01
(1,396)	1:A:60:PRO:HA	1:A:89:LEU:HD22	19	0.01
(1,396)	1:A:60:PRO:HA	1:A:89:LEU:HD23	19	0.01
(1,394)	1:A:58:SER:HA	1:A:89:LEU:HD11	4	0.01
(1,394)	1:A:58:SER:HA	1:A:89:LEU:HD12	4	0.01
(1,394)	1:A:58:SER:HA	1:A:89:LEU:HD13	4	0.01
(1,394)	1:A:58:SER:HA	1:A:89:LEU:HD11	6	0.01
(1,394)	1:A:58:SER:HA	1:A:89:LEU:HD12	6	0.01
(1,394)	1:A:58:SER:HA	1:A:89:LEU:HD13	6	0.01
(1,386)	1:A:37:THR:HG21	1:A:77:ILE:HA	8	0.01
(1,386)	1:A:37:THR:HG22	1:A:77:ILE:HA	8	0.01
(1,386)	1:A:37:THR:HG23	1:A:77:ILE:HA	8	0.01
(1,386)	1:A:37:THR:HG21	1:A:77:ILE:HA	9	0.01
(1,386)	1:A:37:THR:HG22	1:A:77:ILE:HA	9	0.01
(1,386)	1:A:37:THR:HG23	1:A:77:ILE:HA	9	0.01
(1,386)	1:A:37:THR:HG21	1:A:77:ILE:HA	14	0.01

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,386)	1:A:37:THR:HG22	1:A:77:ILE:HA	14	0.01
(1,386)	1:A:37:THR:HG23	1:A:77:ILE:HA	14	0.01
(1,384)	1:A:37:THR:HA	1:A:78:VAL:HG11	1	0.01
(1,384)	1:A:37:THR:HA	1:A:78:VAL:HG12	1	0.01
(1,384)	1:A:37:THR:HA	1:A:78:VAL:HG13	1	0.01
(1,384)	1:A:37:THR:HA	1:A:78:VAL:HG11	4	0.01
(1,384)	1:A:37:THR:HA	1:A:78:VAL:HG12	4	0.01
(1,384)	1:A:37:THR:HA	1:A:78:VAL:HG13	4	0.01
(1,384)	1:A:37:THR:HA	1:A:78:VAL:HG11	7	0.01
(1,384)	1:A:37:THR:HA	1:A:78:VAL:HG12	7	0.01
(1,384)	1:A:37:THR:HA	1:A:78:VAL:HG13	7	0.01
(1,384)	1:A:37:THR:HA	1:A:78:VAL:HG11	10	0.01
(1,384)	1:A:37:THR:HA	1:A:78:VAL:HG12	10	0.01
(1,384)	1:A:37:THR:HA	1:A:78:VAL:HG13	10	0.01
(1,384)	1:A:37:THR:HA	1:A:78:VAL:HG11	20	0.01
(1,384)	1:A:37:THR:HA	1:A:78:VAL:HG12	20	0.01
(1,384)	1:A:37:THR:HA	1:A:78:VAL:HG13	20	0.01
(1,383)	1:A:35:VAL:HG11	1:A:80:ILE:HA	2	0.01
(1,383)	1:A:35:VAL:HG12	1:A:80:ILE:HA	2	0.01
(1,383)	1:A:35:VAL:HG13	1:A:80:ILE:HA	2	0.01
(1,383)	1:A:35:VAL:HG11	1:A:80:ILE:HA	4	0.01
(1,383)	1:A:35:VAL:HG12	1:A:80:ILE:HA	4	0.01
(1,383)	1:A:35:VAL:HG13	1:A:80:ILE:HA	4	0.01
(1,383)	1:A:35:VAL:HG11	1:A:80:ILE:HA	5	0.01
(1,383)	1:A:35:VAL:HG12	1:A:80:ILE:HA	5	0.01
(1,383)	1:A:35:VAL:HG13	1:A:80:ILE:HA	5	0.01
(1,383)	1:A:35:VAL:HG11	1:A:80:ILE:HA	6	0.01
(1,383)	1:A:35:VAL:HG12	1:A:80:ILE:HA	6	0.01
(1,383)	1:A:35:VAL:HG13	1:A:80:ILE:HA	6	0.01
(1,383)	1:A:35:VAL:HG11	1:A:80:ILE:HA	10	0.01
(1,383)	1:A:35:VAL:HG12	1:A:80:ILE:HA	10	0.01
(1,383)	1:A:35:VAL:HG13	1:A:80:ILE:HA	10	0.01
(1,383)	1:A:35:VAL:HG11	1:A:80:ILE:HA	14	0.01
(1,383)	1:A:35:VAL:HG12	1:A:80:ILE:HA	14	0.01
(1,383)	1:A:35:VAL:HG13	1:A:80:ILE:HA	14	0.01
(1,383)	1:A:35:VAL:HG11	1:A:80:ILE:HA	16	0.01
(1,383)	1:A:35:VAL:HG12	1:A:80:ILE:HA	16	0.01
(1,383)	1:A:35:VAL:HG13	1:A:80:ILE:HA	16	0.01
(1,383)	1:A:35:VAL:HG11	1:A:80:ILE:HA	18	0.01
(1,383)	1:A:35:VAL:HG12	1:A:80:ILE:HA	18	0.01
(1,383)	1:A:35:VAL:HG13	1:A:80:ILE:HA	18	0.01
(1,382)	1:A:33:VAL:HG11	1:A:51:ALA:HA	4	0.01

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,382)	1:A:33:VAL:HG12	1:A:51:ALA:HA	4	0.01
(1,382)	1:A:33:VAL:HG13	1:A:51:ALA:HA	4	0.01
(1,382)	1:A:33:VAL:HG11	1:A:51:ALA:HA	8	0.01
(1,382)	1:A:33:VAL:HG12	1:A:51:ALA:HA	8	0.01
(1,382)	1:A:33:VAL:HG13	1:A:51:ALA:HA	8	0.01
(1,382)	1:A:33:VAL:HG11	1:A:51:ALA:HA	10	0.01
(1,382)	1:A:33:VAL:HG12	1:A:51:ALA:HA	10	0.01
(1,382)	1:A:33:VAL:HG13	1:A:51:ALA:HA	10	0.01
(1,382)	1:A:33:VAL:HG11	1:A:51:ALA:HA	18	0.01
(1,382)	1:A:33:VAL:HG12	1:A:51:ALA:HA	18	0.01
(1,382)	1:A:33:VAL:HG13	1:A:51:ALA:HA	18	0.01
(1,382)	1:A:33:VAL:HG11	1:A:51:ALA:HA	19	0.01
(1,382)	1:A:33:VAL:HG12	1:A:51:ALA:HA	19	0.01
(1,382)	1:A:33:VAL:HG13	1:A:51:ALA:HA	19	0.01
(1,374)	1:A:26:ILE:HA	1:A:89:LEU:HG	8	0.01
(1,371)	1:A:21:PRO:HG2	1:A:56:SER:HA	10	0.01
(1,371)	1:A:21:PRO:HG3	1:A:56:SER:HA	10	0.01
(1,369)	1:A:20:THR:HA	1:A:55:LEU:HD21	1	0.01
(1,369)	1:A:20:THR:HA	1:A:55:LEU:HD22	1	0.01
(1,369)	1:A:20:THR:HA	1:A:55:LEU:HD23	1	0.01
(1,369)	1:A:20:THR:HA	1:A:55:LEU:HD21	7	0.01
(1,369)	1:A:20:THR:HA	1:A:55:LEU:HD22	7	0.01
(1,369)	1:A:20:THR:HA	1:A:55:LEU:HD23	7	0.01
(1,369)	1:A:20:THR:HA	1:A:55:LEU:HD21	8	0.01
(1,369)	1:A:20:THR:HA	1:A:55:LEU:HD22	8	0.01
(1,369)	1:A:20:THR:HA	1:A:55:LEU:HD23	8	0.01
(1,363)	1:A:17:ALA:HA	1:A:87:LEU:HD11	4	0.01
(1,363)	1:A:17:ALA:HA	1:A:87:LEU:HD12	4	0.01
(1,363)	1:A:17:ALA:HA	1:A:87:LEU:HD13	4	0.01
(1,363)	1:A:17:ALA:HA	1:A:87:LEU:HD11	9	0.01
(1,363)	1:A:17:ALA:HA	1:A:87:LEU:HD12	9	0.01
(1,363)	1:A:17:ALA:HA	1:A:87:LEU:HD13	9	0.01
(1,363)	1:A:17:ALA:HA	1:A:87:LEU:HD11	15	0.01
(1,363)	1:A:17:ALA:HA	1:A:87:LEU:HD12	15	0.01
(1,363)	1:A:17:ALA:HA	1:A:87:LEU:HD13	15	0.01
(1,362)	1:A:17:ALA:HA	1:A:55:LEU:HD21	1	0.01
(1,362)	1:A:17:ALA:HA	1:A:55:LEU:HD22	1	0.01
(1,362)	1:A:17:ALA:HA	1:A:55:LEU:HD23	1	0.01
(1,362)	1:A:17:ALA:HA	1:A:55:LEU:HD21	2	0.01
(1,362)	1:A:17:ALA:HA	1:A:55:LEU:HD22	2	0.01
(1,362)	1:A:17:ALA:HA	1:A:55:LEU:HD23	2	0.01
(1,362)	1:A:17:ALA:HA	1:A:55:LEU:HD21	4	0.01

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,362)	1:A:17:ALA:HA	1:A:55:LEU:HD22	4	0.01
(1,362)	1:A:17:ALA:HA	1:A:55:LEU:HD23	4	0.01
(1,362)	1:A:17:ALA:HA	1:A:55:LEU:HD21	9	0.01
(1,362)	1:A:17:ALA:HA	1:A:55:LEU:HD22	9	0.01
(1,362)	1:A:17:ALA:HA	1:A:55:LEU:HD23	9	0.01
(1,362)	1:A:17:ALA:HA	1:A:55:LEU:HD21	18	0.01
(1,362)	1:A:17:ALA:HA	1:A:55:LEU:HD22	18	0.01
(1,362)	1:A:17:ALA:HA	1:A:55:LEU:HD23	18	0.01
(1,36)	1:A:23:ASN:HA	1:A:24:SER:H	16	0.01
(1,36)	1:A:23:ASN:HA	1:A:24:SER:H	19	0.01
(1,347)	1:A:40:TYR:HD1	1:A:7:ARG:HA	3	0.01
(1,347)	1:A:40:TYR:HD2	1:A:7:ARG:HA	3	0.01
(1,347)	1:A:40:TYR:HD1	1:A:7:ARG:HA	12	0.01
(1,347)	1:A:40:TYR:HD2	1:A:7:ARG:HA	12	0.01
(1,342)	1:A:61:GLY:H	1:A:89:LEU:HD11	12	0.01
(1,342)	1:A:61:GLY:H	1:A:89:LEU:HD12	12	0.01
(1,342)	1:A:61:GLY:H	1:A:89:LEU:HD13	12	0.01
(1,341)	1:A:61:GLY:H	1:A:89:LEU:HG	1	0.01
(1,341)	1:A:61:GLY:H	1:A:89:LEU:HG	7	0.01
(1,341)	1:A:61:GLY:H	1:A:89:LEU:HG	13	0.01
(1,341)	1:A:61:GLY:H	1:A:89:LEU:HG	19	0.01
(1,334)	1:A:40:TYR:H	1:A:75:ILE:HG12	3	0.01
(1,334)	1:A:40:TYR:H	1:A:75:ILE:HG13	3	0.01
(1,334)	1:A:40:TYR:H	1:A:75:ILE:HG12	8	0.01
(1,334)	1:A:40:TYR:H	1:A:75:ILE:HG13	8	0.01
(1,334)	1:A:40:TYR:H	1:A:75:ILE:HG12	9	0.01
(1,334)	1:A:40:TYR:H	1:A:75:ILE:HG13	9	0.01
(1,334)	1:A:40:TYR:H	1:A:75:ILE:HG12	13	0.01
(1,334)	1:A:40:TYR:H	1:A:75:ILE:HG13	13	0.01
(1,334)	1:A:40:TYR:H	1:A:75:ILE:HG12	16	0.01
(1,334)	1:A:40:TYR:H	1:A:75:ILE:HG13	16	0.01
(1,330)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG21	4	0.01
(1,330)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG22	4	0.01
(1,330)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG23	4	0.01
(1,330)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG21	7	0.01
(1,330)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG22	7	0.01
(1,330)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG23	7	0.01
(1,329)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG11	3	0.01
(1,329)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG12	3	0.01
(1,329)	1:A:36:LYS:H	1:A:78:VAL:HG13	3	0.01
(1,327)	1:A:34:ARG:H	1:A:81:SER:HB2	7	0.01
(1,327)	1:A:34:ARG:H	1:A:81:SER:HB3	7	0.01

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,323)	1:A:25:MET:H	1:A:89:LEU:HD11	10	0.01
(1,323)	1:A:25:MET:H	1:A:89:LEU:HD12	10	0.01
(1,323)	1:A:25:MET:H	1:A:89:LEU:HD13	10	0.01
(1,323)	1:A:25:MET:H	1:A:89:LEU:HD11	13	0.01
(1,323)	1:A:25:MET:H	1:A:89:LEU:HD12	13	0.01
(1,323)	1:A:25:MET:H	1:A:89:LEU:HD13	13	0.01
(1,323)	1:A:25:MET:H	1:A:89:LEU:HD11	14	0.01
(1,323)	1:A:25:MET:H	1:A:89:LEU:HD12	14	0.01
(1,323)	1:A:25:MET:H	1:A:89:LEU:HD13	14	0.01
(1,323)	1:A:25:MET:H	1:A:89:LEU:HD11	16	0.01
(1,323)	1:A:25:MET:H	1:A:89:LEU:HD12	16	0.01
(1,323)	1:A:25:MET:H	1:A:89:LEU:HD13	16	0.01
(1,322)	1:A:23:ASN:H	1:A:92:HIS:HB2	7	0.01
(1,322)	1:A:23:ASN:H	1:A:92:HIS:HB3	7	0.01
(1,317)	1:A:17:ALA:H	1:A:30:LEU:HD21	3	0.01
(1,317)	1:A:17:ALA:H	1:A:30:LEU:HD22	3	0.01
(1,317)	1:A:17:ALA:H	1:A:30:LEU:HD23	3	0.01
(1,317)	1:A:17:ALA:H	1:A:30:LEU:HD21	7	0.01
(1,317)	1:A:17:ALA:H	1:A:30:LEU:HD22	7	0.01
(1,317)	1:A:17:ALA:H	1:A:30:LEU:HD23	7	0.01
(1,317)	1:A:17:ALA:H	1:A:30:LEU:HD21	8	0.01
(1,317)	1:A:17:ALA:H	1:A:30:LEU:HD22	8	0.01
(1,317)	1:A:17:ALA:H	1:A:30:LEU:HD23	8	0.01
(1,314)	1:A:13:LEU:H	1:A:33:VAL:HB	1	0.01
(1,314)	1:A:13:LEU:H	1:A:33:VAL:HB	2	0.01
(1,314)	1:A:13:LEU:H	1:A:33:VAL:HB	7	0.01
(1,311)	1:A:11:LEU:H	1:A:35:VAL:HB	3	0.01
(1,311)	1:A:11:LEU:H	1:A:35:VAL:HB	13	0.01
(1,311)	1:A:11:LEU:H	1:A:35:VAL:HB	14	0.01
(1,311)	1:A:11:LEU:H	1:A:35:VAL:HB	16	0.01
(1,297)	1:A:35:VAL:HG11	1:A:79:GLU:H	3	0.01
(1,297)	1:A:35:VAL:HG12	1:A:79:GLU:H	3	0.01
(1,297)	1:A:35:VAL:HG13	1:A:79:GLU:H	3	0.01
(1,297)	1:A:35:VAL:HG11	1:A:79:GLU:H	19	0.01
(1,297)	1:A:35:VAL:HG12	1:A:79:GLU:H	19	0.01
(1,297)	1:A:35:VAL:HG13	1:A:79:GLU:H	19	0.01
(1,293)	1:A:26:ILE:HG12	1:A:90:GLU:H	11	0.01
(1,293)	1:A:26:ILE:HG13	1:A:90:GLU:H	11	0.01
(1,293)	1:A:26:ILE:HG12	1:A:90:GLU:H	14	0.01
(1,293)	1:A:26:ILE:HG13	1:A:90:GLU:H	14	0.01
(1,293)	1:A:26:ILE:HG12	1:A:90:GLU:H	16	0.01
(1,293)	1:A:26:ILE:HG13	1:A:90:GLU:H	16	0.01

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,293)	1:A:26:ILE:HG12	1:A:90:GLU:H	17	0.01
(1,293)	1:A:26:ILE:HG13	1:A:90:GLU:H	17	0.01
(1,289)	1:A:21:PRO:HG2	1:A:58:SER:H	11	0.01
(1,289)	1:A:21:PRO:HG3	1:A:58:SER:H	11	0.01
(1,281)	1:A:13:LEU:HD21	1:A:51:ALA:H	1	0.01
(1,281)	1:A:13:LEU:HD22	1:A:51:ALA:H	1	0.01
(1,281)	1:A:13:LEU:HD23	1:A:51:ALA:H	1	0.01
(1,281)	1:A:13:LEU:HD21	1:A:51:ALA:H	5	0.01
(1,281)	1:A:13:LEU:HD22	1:A:51:ALA:H	5	0.01
(1,281)	1:A:13:LEU:HD23	1:A:51:ALA:H	5	0.01
(1,281)	1:A:13:LEU:HD21	1:A:51:ALA:H	8	0.01
(1,281)	1:A:13:LEU:HD22	1:A:51:ALA:H	8	0.01
(1,281)	1:A:13:LEU:HD23	1:A:51:ALA:H	8	0.01
(1,281)	1:A:13:LEU:HD21	1:A:51:ALA:H	10	0.01
(1,281)	1:A:13:LEU:HD22	1:A:51:ALA:H	10	0.01
(1,281)	1:A:13:LEU:HD23	1:A:51:ALA:H	10	0.01
(1,281)	1:A:13:LEU:HD21	1:A:51:ALA:H	12	0.01
(1,281)	1:A:13:LEU:HD22	1:A:51:ALA:H	12	0.01
(1,281)	1:A:13:LEU:HD23	1:A:51:ALA:H	12	0.01
(1,281)	1:A:13:LEU:HD21	1:A:51:ALA:H	14	0.01
(1,281)	1:A:13:LEU:HD22	1:A:51:ALA:H	14	0.01
(1,281)	1:A:13:LEU:HD23	1:A:51:ALA:H	14	0.01
(1,275)	1:A:10:THR:HG21	1:A:37:THR:H	5	0.01
(1,275)	1:A:10:THR:HG22	1:A:37:THR:H	5	0.01
(1,275)	1:A:10:THR:HG23	1:A:37:THR:H	5	0.01
(1,275)	1:A:10:THR:HG21	1:A:37:THR:H	11	0.01
(1,275)	1:A:10:THR:HG22	1:A:37:THR:H	11	0.01
(1,275)	1:A:10:THR:HG23	1:A:37:THR:H	11	0.01
(1,271)	1:A:64:ASP:HA	1:A:86:THR:HA	5	0.01
(1,270)	1:A:62:GLU:HA	1:A:88:GLN:HA	20	0.01
(1,263)	1:A:10:THR:HA	1:A:36:LYS:HA	4	0.01
(1,263)	1:A:10:THR:HA	1:A:36:LYS:HA	13	0.01
(1,263)	1:A:10:THR:HA	1:A:36:LYS:HA	18	0.01
(1,261)	1:A:67:VAL:H	1:A:84:VAL:HA	19	0.01
(1,253)	1:A:40:TYR:H	1:A:75:ILE:HA	20	0.01
(1,242)	1:A:11:LEU:H	1:A:34:ARG:HA	4	0.01
(1,242)	1:A:11:LEU:H	1:A:34:ARG:HA	9	0.01
(1,242)	1:A:11:LEU:H	1:A:34:ARG:HA	18	0.01
(1,239)	1:A:64:ASP:HA	1:A:85:VAL:H	12	0.01
(1,238)	1:A:63:HIS:HA	1:A:87:LEU:H	1	0.01
(1,238)	1:A:63:HIS:HA	1:A:87:LEU:H	5	0.01
(1,238)	1:A:63:HIS:HA	1:A:87:LEU:H	6	0.01

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,227)	1:A:14:SER:HA	1:A:32:SER:H	4	0.01
(1,227)	1:A:14:SER:HA	1:A:32:SER:H	11	0.01
(1,227)	1:A:14:SER:HA	1:A:32:SER:H	12	0.01
(1,227)	1:A:14:SER:HA	1:A:32:SER:H	20	0.01
(1,224)	1:A:10:THR:HA	1:A:35:VAL:H	10	0.01
(1,224)	1:A:10:THR:HA	1:A:35:VAL:H	13	0.01
(1,224)	1:A:10:THR:HA	1:A:35:VAL:H	16	0.01
(1,219)	1:A:54:ASP:H	1:A:66:GLU:H	4	0.01
(1,219)	1:A:54:ASP:H	1:A:66:GLU:H	15	0.01
(1,219)	1:A:54:ASP:H	1:A:66:GLU:H	19	0.01
(1,219)	1:A:54:ASP:H	1:A:66:GLU:H	20	0.01
(1,204)	1:A:17:ALA:HA	1:A:20:THR:HB	4	0.01
(1,204)	1:A:17:ALA:HA	1:A:20:THR:HB	11	0.01
(1,204)	1:A:17:ALA:HA	1:A:20:THR:HB	16	0.01
(1,202)	1:A:72:ILE:HG21	1:A:75:ILE:H	6	0.01
(1,202)	1:A:72:ILE:HG22	1:A:75:ILE:H	6	0.01
(1,202)	1:A:72:ILE:HG23	1:A:75:ILE:H	6	0.01
(1,196)	1:A:77:ILE:HG21	1:A:79:GLU:H	4	0.01
(1,196)	1:A:77:ILE:HG22	1:A:79:GLU:H	4	0.01
(1,196)	1:A:77:ILE:HG23	1:A:79:GLU:H	4	0.01
(1,196)	1:A:77:ILE:HG21	1:A:79:GLU:H	7	0.01
(1,196)	1:A:77:ILE:HG22	1:A:79:GLU:H	7	0.01
(1,196)	1:A:77:ILE:HG23	1:A:79:GLU:H	7	0.01
(1,196)	1:A:77:ILE:HG21	1:A:79:GLU:H	11	0.01
(1,196)	1:A:77:ILE:HG22	1:A:79:GLU:H	11	0.01
(1,196)	1:A:77:ILE:HG23	1:A:79:GLU:H	11	0.01
(1,196)	1:A:77:ILE:HG21	1:A:79:GLU:H	20	0.01
(1,196)	1:A:77:ILE:HG22	1:A:79:GLU:H	20	0.01
(1,196)	1:A:77:ILE:HG23	1:A:79:GLU:H	20	0.01
(1,194)	1:A:44:ILE:HG21	1:A:46:VAL:H	2	0.01
(1,194)	1:A:44:ILE:HG22	1:A:46:VAL:H	2	0.01
(1,194)	1:A:44:ILE:HG23	1:A:46:VAL:H	2	0.01
(1,193)	1:A:26:ILE:HG21	1:A:28:THR:H	1	0.01
(1,193)	1:A:26:ILE:HG22	1:A:28:THR:H	1	0.01
(1,193)	1:A:26:ILE:HG23	1:A:28:THR:H	1	0.01
(1,192)	1:A:10:THR:HG21	1:A:12:THR:H	6	0.01
(1,192)	1:A:10:THR:HG22	1:A:12:THR:H	6	0.01
(1,192)	1:A:10:THR:HG23	1:A:12:THR:H	6	0.01
(1,192)	1:A:10:THR:HG21	1:A:12:THR:H	9	0.01
(1,192)	1:A:10:THR:HG22	1:A:12:THR:H	9	0.01
(1,192)	1:A:10:THR:HG23	1:A:12:THR:H	9	0.01
(1,192)	1:A:10:THR:HG21	1:A:12:THR:H	14	0.01

*Continued on next page...*



*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,192)	1:A:10:THR:HG22	1:A:12:THR:H	14	0.01
(1,192)	1:A:10:THR:HG23	1:A:12:THR:H	14	0.01
(1,192)	1:A:10:THR:HG21	1:A:12:THR:H	18	0.01
(1,192)	1:A:10:THR:HG22	1:A:12:THR:H	18	0.01
(1,192)	1:A:10:THR:HG23	1:A:12:THR:H	18	0.01
(1,184)	1:A:48:GLU:H	1:A:49:LEU:HD21	1	0.01
(1,184)	1:A:48:GLU:H	1:A:49:LEU:HD22	1	0.01
(1,184)	1:A:48:GLU:H	1:A:49:LEU:HD23	1	0.01
(1,184)	1:A:48:GLU:H	1:A:49:LEU:HD21	18	0.01
(1,184)	1:A:48:GLU:H	1:A:49:LEU:HD22	18	0.01
(1,184)	1:A:48:GLU:H	1:A:49:LEU:HD23	18	0.01
(1,181)	1:A:43:SER:H	1:A:44:ILE:HB	8	0.01
(1,179)	1:A:24:SER:H	1:A:25:MET:HB2	4	0.01
(1,179)	1:A:24:SER:H	1:A:25:MET:HB3	4	0.01
(1,179)	1:A:24:SER:H	1:A:25:MET:HB2	7	0.01
(1,179)	1:A:24:SER:H	1:A:25:MET:HB3	7	0.01
(1,179)	1:A:24:SER:H	1:A:25:MET:HB2	12	0.01
(1,179)	1:A:24:SER:H	1:A:25:MET:HB3	12	0.01
(1,179)	1:A:24:SER:H	1:A:25:MET:HB2	15	0.01
(1,179)	1:A:24:SER:H	1:A:25:MET:HB3	15	0.01
(1,175)	1:A:89:LEU:HD11	1:A:90:GLU:H	1	0.01
(1,175)	1:A:89:LEU:HD12	1:A:90:GLU:H	1	0.01
(1,175)	1:A:89:LEU:HD13	1:A:90:GLU:H	1	0.01
(1,175)	1:A:89:LEU:HD11	1:A:90:GLU:H	18	0.01
(1,175)	1:A:89:LEU:HD12	1:A:90:GLU:H	18	0.01
(1,175)	1:A:89:LEU:HD13	1:A:90:GLU:H	18	0.01
(1,174)	1:A:89:LEU:HG	1:A:90:GLU:H	17	0.01
(1,159)	1:A:76:LYS:HD2	1:A:77:ILE:H	1	0.01
(1,159)	1:A:76:LYS:HD3	1:A:77:ILE:H	1	0.01
(1,159)	1:A:76:LYS:HD2	1:A:77:ILE:H	19	0.01
(1,159)	1:A:76:LYS:HD3	1:A:77:ILE:H	19	0.01
(1,157)	1:A:75:ILE:HD11	1:A:76:LYS:H	1	0.01
(1,157)	1:A:75:ILE:HD12	1:A:76:LYS:H	1	0.01
(1,157)	1:A:75:ILE:HD13	1:A:76:LYS:H	1	0.01
(1,157)	1:A:75:ILE:HD11	1:A:76:LYS:H	7	0.01
(1,157)	1:A:75:ILE:HD12	1:A:76:LYS:H	7	0.01
(1,157)	1:A:75:ILE:HD13	1:A:76:LYS:H	7	0.01
(1,157)	1:A:75:ILE:HD11	1:A:76:LYS:H	14	0.01
(1,157)	1:A:75:ILE:HD12	1:A:76:LYS:H	14	0.01
(1,157)	1:A:75:ILE:HD13	1:A:76:LYS:H	14	0.01
(1,144)	1:A:49:LEU:HD11	1:A:50:PHE:H	1	0.01
(1,144)	1:A:49:LEU:HD12	1:A:50:PHE:H	1	0.01

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Model	Violation (Å)
(1,144)	1:A:49:LEU:HD13	1:A:50:PHE:H	1	0.01
(1,144)	1:A:49:LEU:HD11	1:A:50:PHE:H	2	0.01
(1,144)	1:A:49:LEU:HD12	1:A:50:PHE:H	2	0.01
(1,144)	1:A:49:LEU:HD13	1:A:50:PHE:H	2	0.01
(1,144)	1:A:49:LEU:HD11	1:A:50:PHE:H	5	0.01
(1,144)	1:A:49:LEU:HD12	1:A:50:PHE:H	5	0.01
(1,144)	1:A:49:LEU:HD13	1:A:50:PHE:H	5	0.01
(1,144)	1:A:49:LEU:HD11	1:A:50:PHE:H	9	0.01
(1,144)	1:A:49:LEU:HD12	1:A:50:PHE:H	9	0.01
(1,144)	1:A:49:LEU:HD13	1:A:50:PHE:H	9	0.01
(1,144)	1:A:49:LEU:HD11	1:A:50:PHE:H	14	0.01
(1,144)	1:A:49:LEU:HD12	1:A:50:PHE:H	14	0.01
(1,144)	1:A:49:LEU:HD13	1:A:50:PHE:H	14	0.01
(1,144)	1:A:49:LEU:HD11	1:A:50:PHE:H	16	0.01
(1,144)	1:A:49:LEU:HD12	1:A:50:PHE:H	16	0.01
(1,144)	1:A:49:LEU:HD13	1:A:50:PHE:H	16	0.01
(1,144)	1:A:49:LEU:HD11	1:A:50:PHE:H	20	0.01
(1,144)	1:A:49:LEU:HD12	1:A:50:PHE:H	20	0.01
(1,144)	1:A:49:LEU:HD13	1:A:50:PHE:H	20	0.01
(1,113)	1:A:11:LEU:HG	1:A:12:THR:H	14	0.01

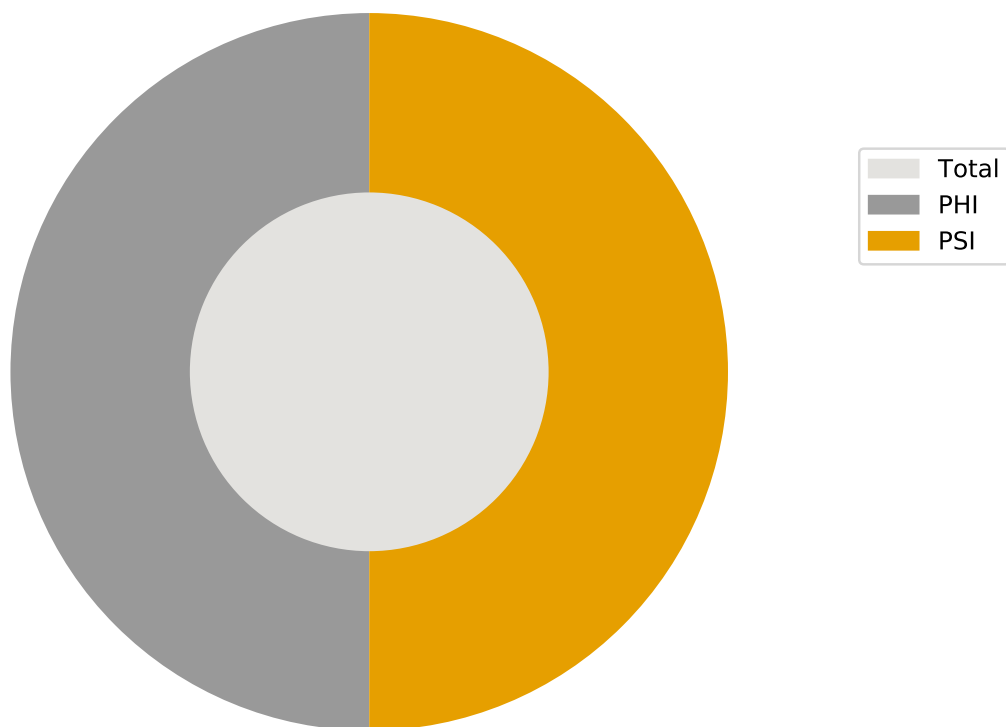
## 9 Dihedral angle restraints analysis

### 9.1 Dihedral angle restraints summary

Angle name	Count	%
PHI	33	50.0
PSI	33	50.0
Total	66	100.0

#### 9.1.1 Pie chart : Dihedral angle restraints

There are 0 unmapped restraints



### 9.2 Dihedral angle violations

The following table provides the summary of violated restraints. Restraints that are violated at least in one model are counted as violated.

Angle name	Count	% <sup>1</sup>	% <sup>2</sup>
PHI	12	36.4	42.9
PSI	16	48.5	57.1

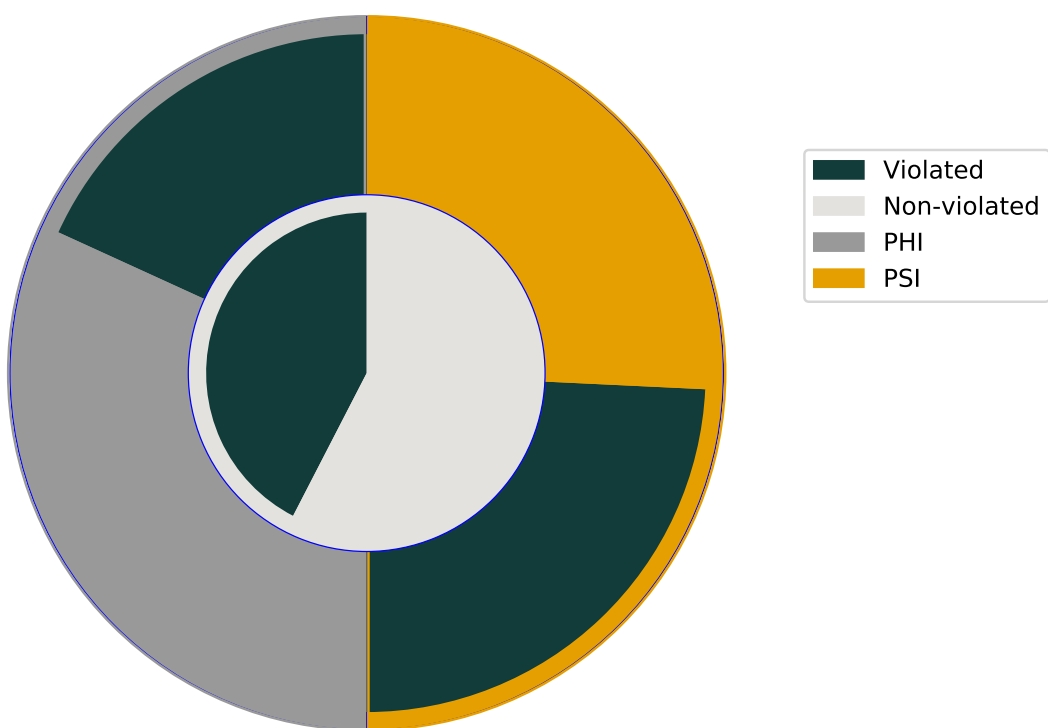
*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

Angle name	Count	% <sup>1</sup>	% <sup>2</sup>
Total	28	42.4	100.0

<sup>1</sup>percentage of violated restraints in that particular angle type, <sup>2</sup>percentage of violation in total violations.

### 9.2.1 Pie chart : Dihedral angle violations



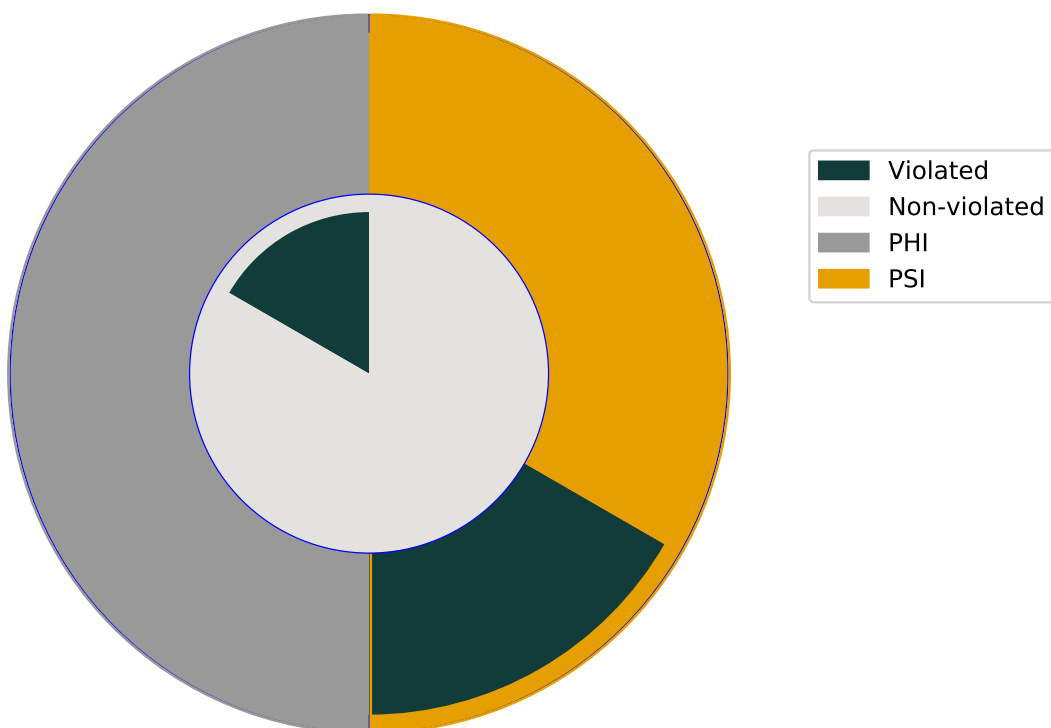
## 9.3 Consistent dihedral angle violations

The following table provides the summary of consistently violated restraints. Restraints that are violated in all models are counted as consistently violated.

Angle name	Count	% <sup>1</sup>	% <sup>2</sup>
PHI	0	0.0	0.0
PSI	11	33.3	100.0
Total	11	16.7	100.0

<sup>1</sup>percentage of violated restraints in that particular angle type, <sup>2</sup>percentage of violation in total violations.

### 9.3.1 Pie chart : Consistent dihedral angle violations



## 9.4 Residual dihedral angle violations

Violation are counted in different bin sizes and listed below

Range ( ° )	Avg. No. of violated restraints per model	Max violation ( ° )
0.0-5.0	2.5	4.98
5.0-10.0	0.5	9.19
10.0-20.0	2.1	19.91
20.0-40.0	9.3	39.9
40.0-80.0	None	None
80.0<	None	None

## 9.5 Dihedral angle violations in the ensemble

The restraints are grouped based on the number of violated models and listed here.

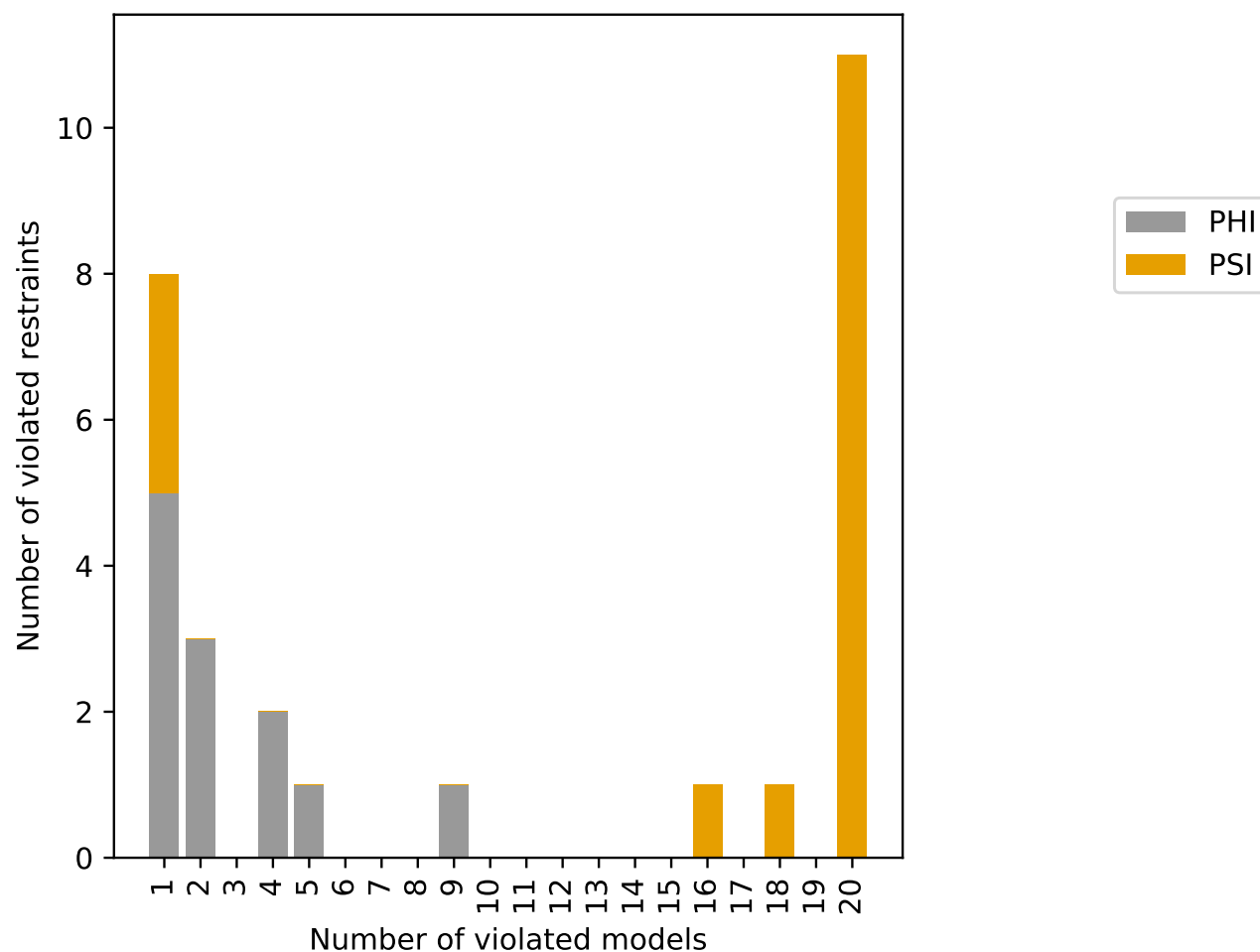
No. of violated restraints			No. of violated models
PHI	PSI	Total	
5	3	8	1

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

No. of violated restraints			No. of violated models
PHI	PSI	Total	
3	0	3	2
0	0	0	3
2	0	2	4
1	0	1	5
0	0	0	6
0	0	0	7
0	0	0	8
1	0	1	9
0	0	0	10
0	0	0	11
0	0	0	12
0	0	0	13
0	0	0	14
0	0	0	15
0	1	1	16
0	0	0	17
0	1	1	18
0	0	0	19
0	11	11	20

### 9.5.1 Bar graph : No. of models vs No. of violations



## 9.6 Violations in each model

The following table lists the violation count in each model in the ensemble

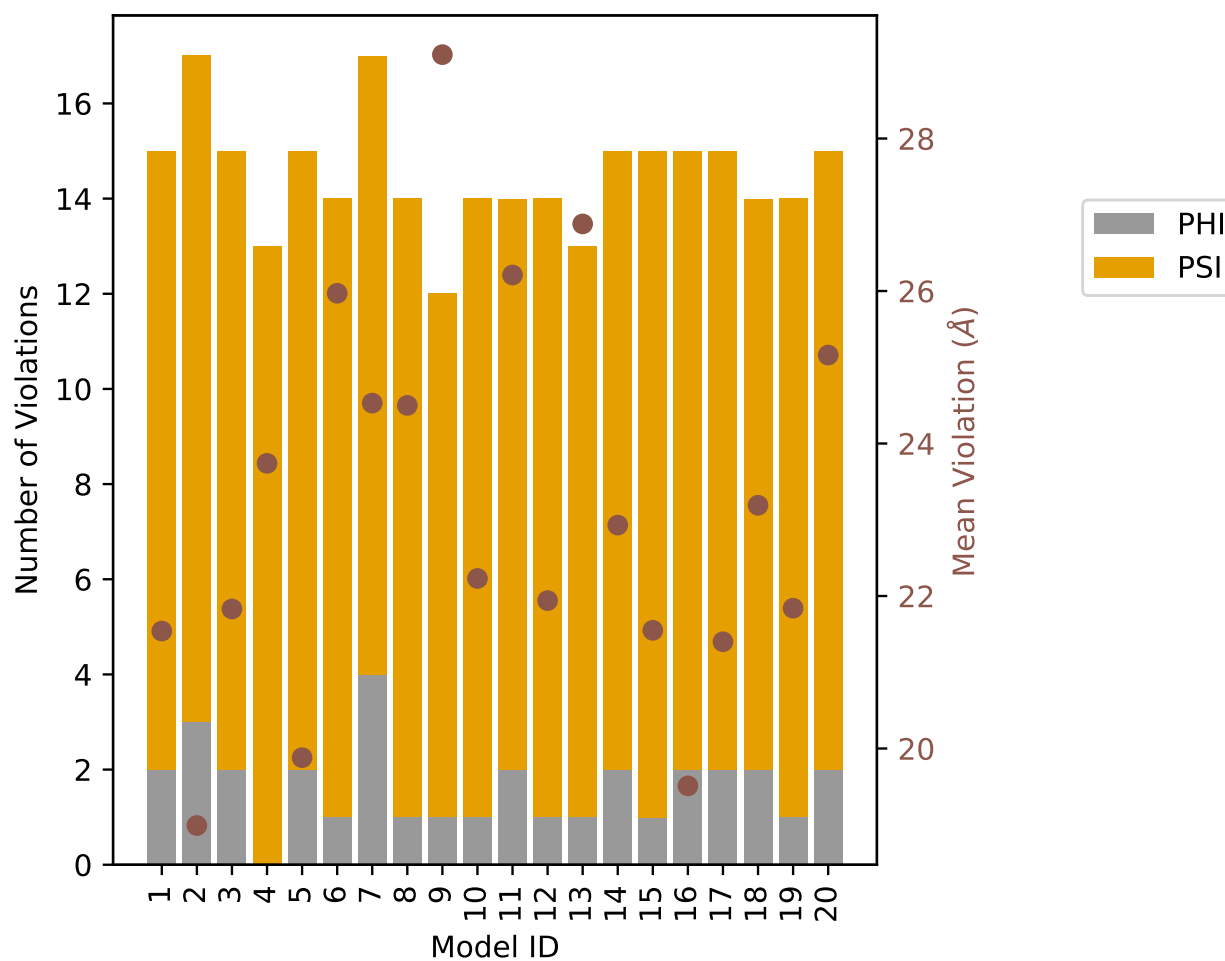
Model ID	No. of violations			Mean ( ° )	Max ( ° )
	PHI	PSI	Total		
1	2	13	15	21.54	36.5
2	3	14	17	18.99	38.48
3	2	13	15	21.83	38.04
4	0	13	13	23.74	39.7
5	2	13	15	19.88	39.51
6	1	13	14	25.97	37.68
7	4	13	17	24.53	39.69
8	1	13	14	24.5	39.15
9	1	11	12	29.1	37.8

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Model ID	No. of violations			Mean ( ° )	Max ( ° )
	PHI	PSI	Total		
10	1	13	14	22.23	37.38
11	2	12	14	26.21	37.54
12	1	13	14	21.94	39.09
13	1	12	13	26.88	39.16
14	2	13	15	22.93	39.81
15	1	14	15	21.55	35.78
16	2	13	15	19.51	37.27
17	2	13	15	21.4	38.81
18	2	12	14	23.19	39.9
19	1	13	14	21.84	38.06
20	2	13	15	25.16	39.32

### 9.6.1 Bar graph : Violations in each model

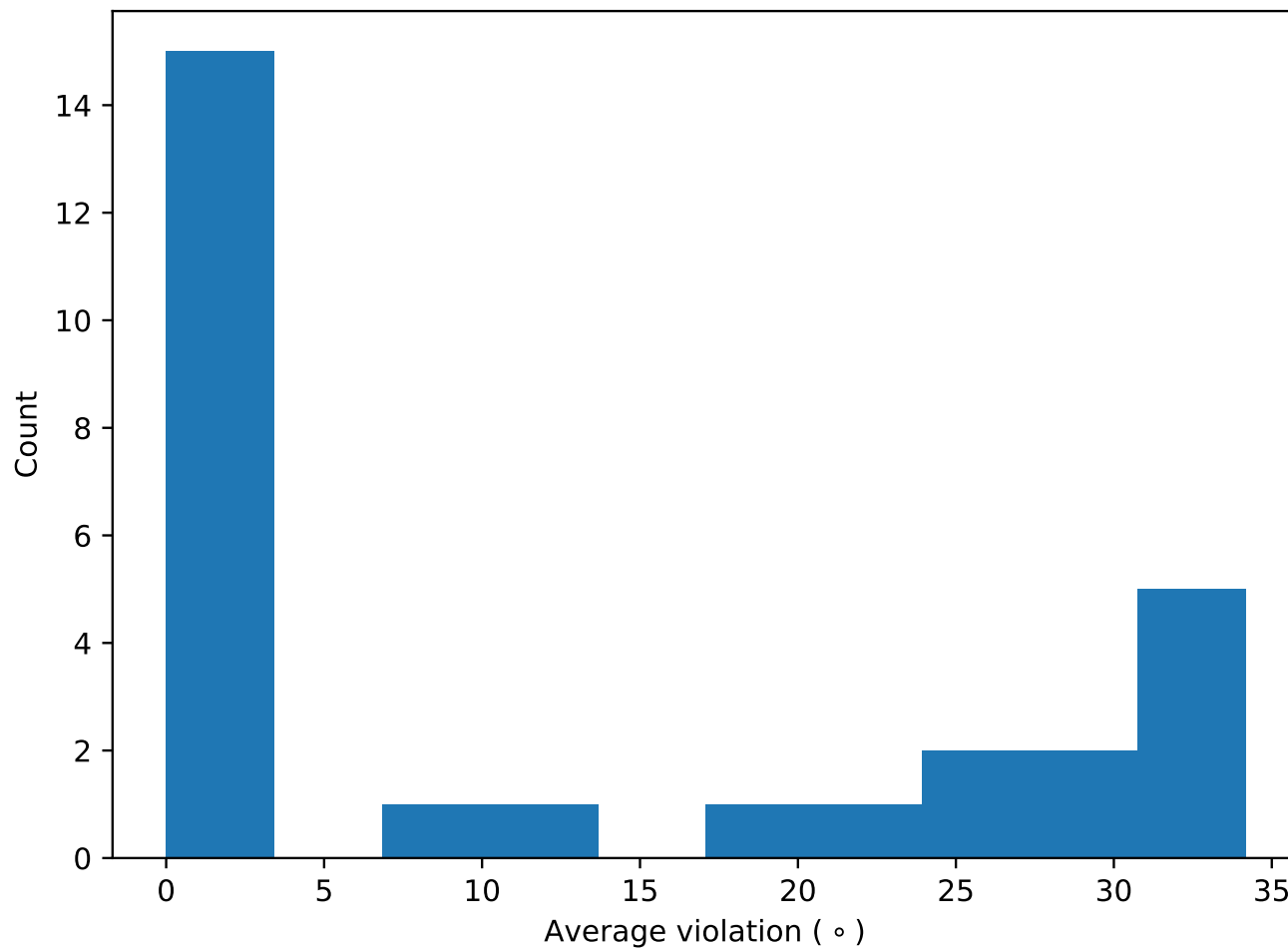




## 9.7 Most violated dihedral angle restraints

### 9.7.1 Histogram : Distribution of mean dihedral angle violations

The following histogram shows the distribution of average violation of each restraint



### 9.7.2 Table: Most violated dihedral angle restraints

The following table lists the average violation of each restraint sorted by number of violated models

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models	Mean ( ° )	Max ( ° )
(1,54)	1:A:85:VAL:N	1:A:85:VAL:CA	1:A:85:VAL:C	1:A:86:THR:N	20	34.17	39.9
(1,38)	1:A:63:HIS:N	1:A:63:HIS:CA	1:A:63:HIS:C	1:A:64:ASP:N	20	33.16	39.81
(1,8)	1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:CA	1:A:13:LEU:C	1:A:14:SER:N	20	27.46	39.69
(1,48)	1:A:75:ILE:N	1:A:75:ILE:CA	1:A:75:ILE:C	1:A:76:LYS:N	20	32.36	39.32
(1,26)	1:A:37:THR:N	1:A:37:THR:CA	1:A:37:THR:C	1:A:38:GLU:N	20	26.34	39.19
(1,40)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:TYR:N	20	23.61	39.16
(1,18)	1:A:33:VAL:N	1:A:33:VAL:CA	1:A:33:VAL:C	1:A:34:ARG:N	20	33.98	39.15
(1,32)	1:A:52:TYR:N	1:A:52:TYR:CA	1:A:52:TYR:C	1:A:53:VAL:N	20	33.07	39.09
(1,58)	1:A:87:LEU:N	1:A:87:LEU:CA	1:A:87:LEU:C	1:A:88:GLN:N	20	24.09	38.14
(1,30)	1:A:51:ALA:N	1:A:51:ALA:CA	1:A:51:ALA:C	1:A:52:TYR:N	20	27.47	37.95

*Continued on next page...*

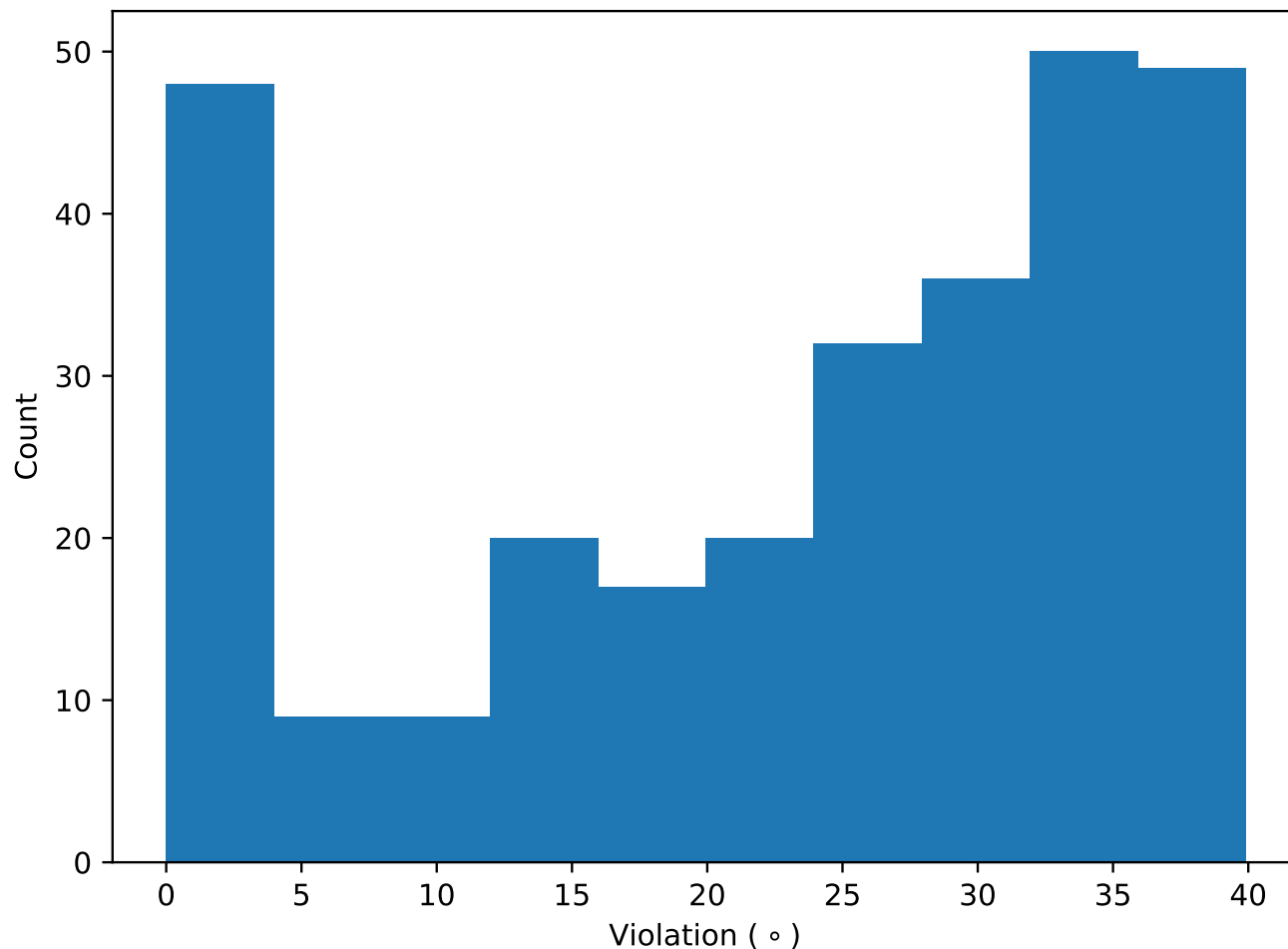
*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models	Mean ( ° )	Max ( ° )
(1,14)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:C	1:A:26:ILE:N	20	20.32	34.17
(1,34)	1:A:53:VAL:N	1:A:53:VAL:CA	1:A:53:VAL:C	1:A:54:ASP:N	16	10.34	26.41
(1,52)	1:A:84:VAL:N	1:A:84:VAL:CA	1:A:84:VAL:C	1:A:85:VAL:N	18	10.24	26.39
(1,64)	1:A:90:GLU:N	1:A:90:GLU:CA	1:A:90:GLU:C	1:A:91:HIS:N	1	0.19	0.19
(1,20)	1:A:34:ARG:N	1:A:34:ARG:CA	1:A:34:ARG:C	1:A:35:VAL:N	1	0.15	0.15
(1,66)	1:A:91:HIS:N	1:A:91:HIS:CA	1:A:91:HIS:C	1:A:92:HIS:N	1	0.07	0.07
(1,45)	1:A:71:PRO:C	1:A:72:ILE:N	1:A:72:ILE:CA	1:A:72:ILE:C	4	0.22	0.5
(1,43)	1:A:68:LYS:C	1:A:69:VAL:N	1:A:69:VAL:CA	1:A:69:VAL:C	4	0.21	0.37
(1,33)	1:A:52:TYR:C	1:A:53:VAL:N	1:A:53:VAL:CA	1:A:53:VAL:C	9	0.17	0.33
(1,65)	1:A:90:GLU:C	1:A:91:HIS:N	1:A:91:HIS:CA	1:A:91:HIS:C	1	0.29	0.29
(1,39)	1:A:63:HIS:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	2	0.18	0.29
(1,3)	1:A:10:THR:C	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:C	1	0.24	0.24
(1,13)	1:A:24:SER:C	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:C	5	0.11	0.2
(1,53)	1:A:84:VAL:C	1:A:85:VAL:N	1:A:85:VAL:CA	1:A:85:VAL:C	2	0.16	0.2
(1,1)	1:A:9:PRO:C	1:A:10:THR:N	1:A:10:THR:CA	1:A:10:THR:C	1	0.18	0.18
(1,63)	1:A:89:LEU:C	1:A:90:GLU:N	1:A:90:GLU:CA	1:A:90:GLU:C	2	0.16	0.18
(1,49)	1:A:75:ILE:C	1:A:76:LYS:N	1:A:76:LYS:CA	1:A:76:LYS:C	1	0.04	0.04
(1,23)	1:A:35:VAL:C	1:A:36:LYS:N	1:A:36:LYS:CA	1:A:36:LYS:C	1	0.01	0.01

## 9.8 All violated dihedral angle restraints

### 9.8.1 Histogram : Distribution of violations

The following histogram shows the distribution of violations in the ensemble.



### 9.8.2 Table: All violated dihedral angle restraints

The following table lists the violations in the ensemble sorted by violation value

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation ( ° )
(1,54)	1:A:85:VAL:N	1:A:85:VAL:CA	1:A:85:VAL:C	1:A:86:THR:N	18	39.9
(1,38)	1:A:63:HIS:N	1:A:63:HIS:CA	1:A:63:HIS:C	1:A:64:ASP:N	14	39.81
(1,38)	1:A:63:HIS:N	1:A:63:HIS:CA	1:A:63:HIS:C	1:A:64:ASP:N	4	39.7
(1,8)	1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:CA	1:A:13:LEU:C	1:A:14:SER:N	7	39.69
(1,54)	1:A:85:VAL:N	1:A:85:VAL:CA	1:A:85:VAL:C	1:A:86:THR:N	5	39.51
(1,48)	1:A:75:ILE:N	1:A:75:ILE:CA	1:A:75:ILE:C	1:A:76:LYS:N	20	39.32
(1,26)	1:A:37:THR:N	1:A:37:THR:CA	1:A:37:THR:C	1:A:38:GLU:N	7	39.19
(1,40)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:TYR:N	13	39.16
(1,18)	1:A:33:VAL:N	1:A:33:VAL:CA	1:A:33:VAL:C	1:A:34:ARG:N	8	39.15
(1,32)	1:A:52:TYR:N	1:A:52:TYR:CA	1:A:52:TYR:C	1:A:53:VAL:N	12	39.09

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation ( ° )
(1,32)	1:A:52:TYR:N	1:A:52:TYR:CA	1:A:52:TYR:C	1:A:53:VAL:N	7	38.88
(1,38)	1:A:63:HIS:N	1:A:63:HIS:CA	1:A:63:HIS:C	1:A:64:ASP:N	17	38.81
(1,54)	1:A:85:VAL:N	1:A:85:VAL:CA	1:A:85:VAL:C	1:A:86:THR:N	20	38.73
(1,18)	1:A:33:VAL:N	1:A:33:VAL:CA	1:A:33:VAL:C	1:A:34:ARG:N	17	38.53
(1,18)	1:A:33:VAL:N	1:A:33:VAL:CA	1:A:33:VAL:C	1:A:34:ARG:N	2	38.48
(1,18)	1:A:33:VAL:N	1:A:33:VAL:CA	1:A:33:VAL:C	1:A:34:ARG:N	7	38.48
(1,58)	1:A:87:LEU:N	1:A:87:LEU:CA	1:A:87:LEU:C	1:A:88:GLN:N	8	38.14
(1,18)	1:A:33:VAL:N	1:A:33:VAL:CA	1:A:33:VAL:C	1:A:34:ARG:N	19	38.06
(1,48)	1:A:75:ILE:N	1:A:75:ILE:CA	1:A:75:ILE:C	1:A:76:LYS:N	17	38.05
(1,54)	1:A:85:VAL:N	1:A:85:VAL:CA	1:A:85:VAL:C	1:A:86:THR:N	3	38.04
(1,30)	1:A:51:ALA:N	1:A:51:ALA:CA	1:A:51:ALA:C	1:A:52:TYR:N	13	37.95
(1,32)	1:A:52:TYR:N	1:A:52:TYR:CA	1:A:52:TYR:C	1:A:53:VAL:N	17	37.94
(1,32)	1:A:52:TYR:N	1:A:52:TYR:CA	1:A:52:TYR:C	1:A:53:VAL:N	18	37.84
(1,26)	1:A:37:THR:N	1:A:37:THR:CA	1:A:37:THR:C	1:A:38:GLU:N	9	37.8
(1,18)	1:A:33:VAL:N	1:A:33:VAL:CA	1:A:33:VAL:C	1:A:34:ARG:N	9	37.79
(1,48)	1:A:75:ILE:N	1:A:75:ILE:CA	1:A:75:ILE:C	1:A:76:LYS:N	6	37.68
(1,26)	1:A:37:THR:N	1:A:37:THR:CA	1:A:37:THR:C	1:A:38:GLU:N	20	37.65
(1,40)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:TYR:N	7	37.63
(1,58)	1:A:87:LEU:N	1:A:87:LEU:CA	1:A:87:LEU:C	1:A:88:GLN:N	7	37.61
(1,54)	1:A:85:VAL:N	1:A:85:VAL:CA	1:A:85:VAL:C	1:A:86:THR:N	2	37.56
(1,30)	1:A:51:ALA:N	1:A:51:ALA:CA	1:A:51:ALA:C	1:A:52:TYR:N	9	37.56
(1,58)	1:A:87:LEU:N	1:A:87:LEU:CA	1:A:87:LEU:C	1:A:88:GLN:N	11	37.54
(1,38)	1:A:63:HIS:N	1:A:63:HIS:CA	1:A:63:HIS:C	1:A:64:ASP:N	8	37.42
(1,18)	1:A:33:VAL:N	1:A:33:VAL:CA	1:A:33:VAL:C	1:A:34:ARG:N	10	37.38
(1,38)	1:A:63:HIS:N	1:A:63:HIS:CA	1:A:63:HIS:C	1:A:64:ASP:N	16	37.27
(1,18)	1:A:33:VAL:N	1:A:33:VAL:CA	1:A:33:VAL:C	1:A:34:ARG:N	4	37.2
(1,32)	1:A:52:TYR:N	1:A:52:TYR:CA	1:A:52:TYR:C	1:A:53:VAL:N	6	37.13
(1,38)	1:A:63:HIS:N	1:A:63:HIS:CA	1:A:63:HIS:C	1:A:64:ASP:N	3	36.86
(1,48)	1:A:75:ILE:N	1:A:75:ILE:CA	1:A:75:ILE:C	1:A:76:LYS:N	12	36.77
(1,48)	1:A:75:ILE:N	1:A:75:ILE:CA	1:A:75:ILE:C	1:A:76:LYS:N	10	36.6
(1,18)	1:A:33:VAL:N	1:A:33:VAL:CA	1:A:33:VAL:C	1:A:34:ARG:N	1	36.5
(1,38)	1:A:63:HIS:N	1:A:63:HIS:CA	1:A:63:HIS:C	1:A:64:ASP:N	11	36.42
(1,32)	1:A:52:TYR:N	1:A:52:TYR:CA	1:A:52:TYR:C	1:A:53:VAL:N	19	36.32
(1,48)	1:A:75:ILE:N	1:A:75:ILE:CA	1:A:75:ILE:C	1:A:76:LYS:N	9	36.24
(1,30)	1:A:51:ALA:N	1:A:51:ALA:CA	1:A:51:ALA:C	1:A:52:TYR:N	6	36.2
(1,32)	1:A:52:TYR:N	1:A:52:TYR:CA	1:A:52:TYR:C	1:A:53:VAL:N	3	36.03
(1,32)	1:A:52:TYR:N	1:A:52:TYR:CA	1:A:52:TYR:C	1:A:53:VAL:N	14	35.99
(1,48)	1:A:75:ILE:N	1:A:75:ILE:CA	1:A:75:ILE:C	1:A:76:LYS:N	18	35.98
(1,8)	1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:CA	1:A:13:LEU:C	1:A:14:SER:N	20	35.94
(1,48)	1:A:75:ILE:N	1:A:75:ILE:CA	1:A:75:ILE:C	1:A:76:LYS:N	5	35.86
(1,32)	1:A:52:TYR:N	1:A:52:TYR:CA	1:A:52:TYR:C	1:A:53:VAL:N	11	35.79
(1,32)	1:A:52:TYR:N	1:A:52:TYR:CA	1:A:52:TYR:C	1:A:53:VAL:N	15	35.78
(1,30)	1:A:51:ALA:N	1:A:51:ALA:CA	1:A:51:ALA:C	1:A:52:TYR:N	7	35.74
(1,54)	1:A:85:VAL:N	1:A:85:VAL:CA	1:A:85:VAL:C	1:A:86:THR:N	7	35.71
(1,18)	1:A:33:VAL:N	1:A:33:VAL:CA	1:A:33:VAL:C	1:A:34:ARG:N	3	35.7
(1,18)	1:A:33:VAL:N	1:A:33:VAL:CA	1:A:33:VAL:C	1:A:34:ARG:N	15	35.7
(1,38)	1:A:63:HIS:N	1:A:63:HIS:CA	1:A:63:HIS:C	1:A:64:ASP:N	12	35.46
(1,48)	1:A:75:ILE:N	1:A:75:ILE:CA	1:A:75:ILE:C	1:A:76:LYS:N	3	35.31
(1,8)	1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:CA	1:A:13:LEU:C	1:A:14:SER:N	6	35.3
(1,8)	1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:CA	1:A:13:LEU:C	1:A:14:SER:N	1	35.28
(1,48)	1:A:75:ILE:N	1:A:75:ILE:CA	1:A:75:ILE:C	1:A:76:LYS:N	11	35.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation ( ° )
(1,30)	1:A:51:ALA:N	1:A:51:ALA:CA	1:A:51:ALA:C	1:A:52:TYR:N	19	35.12
(1,54)	1:A:85:VAL:N	1:A:85:VAL:CA	1:A:85:VAL:C	1:A:86:THR:N	9	34.84
(1,38)	1:A:63:HIS:N	1:A:63:HIS:CA	1:A:63:HIS:C	1:A:64:ASP:N	2	34.71
(1,30)	1:A:51:ALA:N	1:A:51:ALA:CA	1:A:51:ALA:C	1:A:52:TYR:N	20	34.63
(1,54)	1:A:85:VAL:N	1:A:85:VAL:CA	1:A:85:VAL:C	1:A:86:THR:N	11	34.56
(1,58)	1:A:87:LEU:N	1:A:87:LEU:CA	1:A:87:LEU:C	1:A:88:GLN:N	6	34.49
(1,54)	1:A:85:VAL:N	1:A:85:VAL:CA	1:A:85:VAL:C	1:A:86:THR:N	4	34.3
(1,14)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:C	1:A:26:ILE:N	7	34.17
(1,54)	1:A:85:VAL:N	1:A:85:VAL:CA	1:A:85:VAL:C	1:A:86:THR:N	16	34.15
(1,48)	1:A:75:ILE:N	1:A:75:ILE:CA	1:A:75:ILE:C	1:A:76:LYS:N	19	34.09
(1,54)	1:A:85:VAL:N	1:A:85:VAL:CA	1:A:85:VAL:C	1:A:86:THR:N	19	34.08
(1,48)	1:A:75:ILE:N	1:A:75:ILE:CA	1:A:75:ILE:C	1:A:76:LYS:N	15	34.07
(1,30)	1:A:51:ALA:N	1:A:51:ALA:CA	1:A:51:ALA:C	1:A:52:TYR:N	4	34.03
(1,26)	1:A:37:THR:N	1:A:37:THR:CA	1:A:37:THR:C	1:A:38:GLU:N	11	33.85
(1,26)	1:A:37:THR:N	1:A:37:THR:CA	1:A:37:THR:C	1:A:38:GLU:N	17	33.85
(1,38)	1:A:63:HIS:N	1:A:63:HIS:CA	1:A:63:HIS:C	1:A:64:ASP:N	18	33.7
(1,54)	1:A:85:VAL:N	1:A:85:VAL:CA	1:A:85:VAL:C	1:A:86:THR:N	13	33.63
(1,8)	1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:CA	1:A:13:LEU:C	1:A:14:SER:N	2	33.56
(1,32)	1:A:52:TYR:N	1:A:52:TYR:CA	1:A:52:TYR:C	1:A:53:VAL:N	10	33.41
(1,54)	1:A:85:VAL:N	1:A:85:VAL:CA	1:A:85:VAL:C	1:A:86:THR:N	17	33.39
(1,8)	1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:CA	1:A:13:LEU:C	1:A:14:SER:N	18	32.98
(1,48)	1:A:75:ILE:N	1:A:75:ILE:CA	1:A:75:ILE:C	1:A:76:LYS:N	7	32.93
(1,38)	1:A:63:HIS:N	1:A:63:HIS:CA	1:A:63:HIS:C	1:A:64:ASP:N	13	32.92
(1,26)	1:A:37:THR:N	1:A:37:THR:CA	1:A:37:THR:C	1:A:38:GLU:N	6	32.91
(1,40)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:TYR:N	6	32.89
(1,8)	1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:CA	1:A:13:LEU:C	1:A:14:SER:N	15	32.87
(1,38)	1:A:63:HIS:N	1:A:63:HIS:CA	1:A:63:HIS:C	1:A:64:ASP:N	10	32.86
(1,40)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:TYR:N	9	32.84
(1,18)	1:A:33:VAL:N	1:A:33:VAL:CA	1:A:33:VAL:C	1:A:34:ARG:N	16	32.83
(1,54)	1:A:85:VAL:N	1:A:85:VAL:CA	1:A:85:VAL:C	1:A:86:THR:N	14	32.81
(1,8)	1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:CA	1:A:13:LEU:C	1:A:14:SER:N	11	32.68
(1,18)	1:A:33:VAL:N	1:A:33:VAL:CA	1:A:33:VAL:C	1:A:34:ARG:N	13	32.68
(1,8)	1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:CA	1:A:13:LEU:C	1:A:14:SER:N	10	32.43
(1,40)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:TYR:N	8	32.38
(1,30)	1:A:51:ALA:N	1:A:51:ALA:CA	1:A:51:ALA:C	1:A:52:TYR:N	18	32.28
(1,54)	1:A:85:VAL:N	1:A:85:VAL:CA	1:A:85:VAL:C	1:A:86:THR:N	15	32.14
(1,18)	1:A:33:VAL:N	1:A:33:VAL:CA	1:A:33:VAL:C	1:A:34:ARG:N	6	32.12
(1,54)	1:A:85:VAL:N	1:A:85:VAL:CA	1:A:85:VAL:C	1:A:86:THR:N	1	31.96
(1,54)	1:A:85:VAL:N	1:A:85:VAL:CA	1:A:85:VAL:C	1:A:86:THR:N	10	31.9
(1,38)	1:A:63:HIS:N	1:A:63:HIS:CA	1:A:63:HIS:C	1:A:64:ASP:N	1	31.85
(1,30)	1:A:51:ALA:N	1:A:51:ALA:CA	1:A:51:ALA:C	1:A:52:TYR:N	2	31.65
(1,38)	1:A:63:HIS:N	1:A:63:HIS:CA	1:A:63:HIS:C	1:A:64:ASP:N	19	31.64
(1,26)	1:A:37:THR:N	1:A:37:THR:CA	1:A:37:THR:C	1:A:38:GLU:N	4	31.56
(1,38)	1:A:63:HIS:N	1:A:63:HIS:CA	1:A:63:HIS:C	1:A:64:ASP:N	7	31.54
(1,26)	1:A:37:THR:N	1:A:37:THR:CA	1:A:37:THR:C	1:A:38:GLU:N	8	31.54
(1,38)	1:A:63:HIS:N	1:A:63:HIS:CA	1:A:63:HIS:C	1:A:64:ASP:N	5	31.37
(1,32)	1:A:52:TYR:N	1:A:52:TYR:CA	1:A:52:TYR:C	1:A:53:VAL:N	9	31.25
(1,8)	1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:CA	1:A:13:LEU:C	1:A:14:SER:N	9	31.19
(1,48)	1:A:75:ILE:N	1:A:75:ILE:CA	1:A:75:ILE:C	1:A:76:LYS:N	14	31.07
(1,8)	1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:CA	1:A:13:LEU:C	1:A:14:SER:N	5	30.95
(1,58)	1:A:87:LEU:N	1:A:87:LEU:CA	1:A:87:LEU:C	1:A:88:GLN:N	13	30.75

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation ( ° )
(1,58)	1:A:87:LEU:N	1:A:87:LEU:CA	1:A:87:LEU:C	1:A:88:GLN:N	15	30.73
(1,30)	1:A:51:ALA:N	1:A:51:ALA:CA	1:A:51:ALA:C	1:A:52:TYR:N	10	30.64
(1,30)	1:A:51:ALA:N	1:A:51:ALA:CA	1:A:51:ALA:C	1:A:52:TYR:N	14	30.62
(1,8)	1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:CA	1:A:13:LEU:C	1:A:14:SER:N	4	30.54
(1,32)	1:A:52:TYR:N	1:A:52:TYR:CA	1:A:52:TYR:C	1:A:53:VAL:N	8	30.51
(1,26)	1:A:37:THR:N	1:A:37:THR:CA	1:A:37:THR:C	1:A:38:GLU:N	13	30.31
(1,54)	1:A:85:VAL:N	1:A:85:VAL:CA	1:A:85:VAL:C	1:A:86:THR:N	12	30.03
(1,48)	1:A:75:ILE:N	1:A:75:ILE:CA	1:A:75:ILE:C	1:A:76:LYS:N	1	29.96
(1,32)	1:A:52:TYR:N	1:A:52:TYR:CA	1:A:52:TYR:C	1:A:53:VAL:N	20	29.92
(1,40)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:TYR:N	17	29.84
(1,40)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:TYR:N	11	29.76
(1,38)	1:A:63:HIS:N	1:A:63:HIS:CA	1:A:63:HIS:C	1:A:64:ASP:N	9	29.74
(1,38)	1:A:63:HIS:N	1:A:63:HIS:CA	1:A:63:HIS:C	1:A:64:ASP:N	15	29.73
(1,58)	1:A:87:LEU:N	1:A:87:LEU:CA	1:A:87:LEU:C	1:A:88:GLN:N	12	29.29
(1,48)	1:A:75:ILE:N	1:A:75:ILE:CA	1:A:75:ILE:C	1:A:76:LYS:N	16	29.2
(1,54)	1:A:85:VAL:N	1:A:85:VAL:CA	1:A:85:VAL:C	1:A:86:THR:N	6	28.78
(1,18)	1:A:33:VAL:N	1:A:33:VAL:CA	1:A:33:VAL:C	1:A:34:ARG:N	11	28.61
(1,32)	1:A:52:TYR:N	1:A:52:TYR:CA	1:A:52:TYR:C	1:A:53:VAL:N	1	28.59
(1,32)	1:A:52:TYR:N	1:A:52:TYR:CA	1:A:52:TYR:C	1:A:53:VAL:N	16	28.47
(1,18)	1:A:33:VAL:N	1:A:33:VAL:CA	1:A:33:VAL:C	1:A:34:ARG:N	18	28.44
(1,18)	1:A:33:VAL:N	1:A:33:VAL:CA	1:A:33:VAL:C	1:A:34:ARG:N	14	28.37
(1,18)	1:A:33:VAL:N	1:A:33:VAL:CA	1:A:33:VAL:C	1:A:34:ARG:N	5	28.14
(1,14)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:C	1:A:26:ILE:N	16	28.14
(1,18)	1:A:33:VAL:N	1:A:33:VAL:CA	1:A:33:VAL:C	1:A:34:ARG:N	12	27.93
(1,14)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:C	1:A:26:ILE:N	3	27.84
(1,32)	1:A:52:TYR:N	1:A:52:TYR:CA	1:A:52:TYR:C	1:A:53:VAL:N	5	27.71
(1,54)	1:A:85:VAL:N	1:A:85:VAL:CA	1:A:85:VAL:C	1:A:86:THR:N	8	27.47
(1,18)	1:A:33:VAL:N	1:A:33:VAL:CA	1:A:33:VAL:C	1:A:34:ARG:N	20	27.47
(1,32)	1:A:52:TYR:N	1:A:52:TYR:CA	1:A:52:TYR:C	1:A:53:VAL:N	4	27.13
(1,14)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:C	1:A:26:ILE:N	6	27.0
(1,32)	1:A:52:TYR:N	1:A:52:TYR:CA	1:A:52:TYR:C	1:A:53:VAL:N	2	26.98
(1,40)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:TYR:N	15	26.79
(1,32)	1:A:52:TYR:N	1:A:52:TYR:CA	1:A:52:TYR:C	1:A:53:VAL:N	13	26.69
(1,34)	1:A:53:VAL:N	1:A:53:VAL:CA	1:A:53:VAL:C	1:A:54:ASP:N	11	26.41
(1,58)	1:A:87:LEU:N	1:A:87:LEU:CA	1:A:87:LEU:C	1:A:88:GLN:N	1	26.39
(1,52)	1:A:84:VAL:N	1:A:84:VAL:CA	1:A:84:VAL:C	1:A:85:VAL:N	20	26.39
(1,30)	1:A:51:ALA:N	1:A:51:ALA:CA	1:A:51:ALA:C	1:A:52:TYR:N	15	26.21
(1,14)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:C	1:A:26:ILE:N	10	26.14
(1,8)	1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:CA	1:A:13:LEU:C	1:A:14:SER:N	14	25.96
(1,26)	1:A:37:THR:N	1:A:37:THR:CA	1:A:37:THR:C	1:A:38:GLU:N	1	25.91
(1,14)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:C	1:A:26:ILE:N	17	25.84
(1,48)	1:A:75:ILE:N	1:A:75:ILE:CA	1:A:75:ILE:C	1:A:76:LYS:N	13	25.5
(1,8)	1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:CA	1:A:13:LEU:C	1:A:14:SER:N	19	25.49
(1,30)	1:A:51:ALA:N	1:A:51:ALA:CA	1:A:51:ALA:C	1:A:52:TYR:N	8	25.43
(1,40)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:TYR:N	2	25.39
(1,26)	1:A:37:THR:N	1:A:37:THR:CA	1:A:37:THR:C	1:A:38:GLU:N	18	25.35
(1,40)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:TYR:N	18	25.27
(1,14)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:C	1:A:26:ILE:N	9	25.09
(1,26)	1:A:37:THR:N	1:A:37:THR:CA	1:A:37:THR:C	1:A:38:GLU:N	2	25.07
(1,58)	1:A:87:LEU:N	1:A:87:LEU:CA	1:A:87:LEU:C	1:A:88:GLN:N	16	24.89
(1,26)	1:A:37:THR:N	1:A:37:THR:CA	1:A:37:THR:C	1:A:38:GLU:N	12	24.85

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation ( ° )
(1,26)	1:A:37:THR:N	1:A:37:THR:CA	1:A:37:THR:C	1:A:38:GLU:N	14	24.58
(1,40)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:TYR:N	1	24.53
(1,30)	1:A:51:ALA:N	1:A:51:ALA:CA	1:A:51:ALA:C	1:A:52:TYR:N	3	24.53
(1,14)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:C	1:A:26:ILE:N	13	24.26
(1,34)	1:A:53:VAL:N	1:A:53:VAL:CA	1:A:53:VAL:C	1:A:54:ASP:N	20	23.68
(1,38)	1:A:63:HIS:N	1:A:63:HIS:CA	1:A:63:HIS:C	1:A:64:ASP:N	20	23.59
(1,8)	1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:CA	1:A:13:LEU:C	1:A:14:SER:N	13	23.28
(1,8)	1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:CA	1:A:13:LEU:C	1:A:14:SER:N	8	22.76
(1,48)	1:A:75:ILE:N	1:A:75:ILE:CA	1:A:75:ILE:C	1:A:76:LYS:N	4	22.76
(1,40)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:TYR:N	14	22.66
(1,8)	1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:CA	1:A:13:LEU:C	1:A:14:SER:N	16	22.57
(1,58)	1:A:87:LEU:N	1:A:87:LEU:CA	1:A:87:LEU:C	1:A:88:GLN:N	14	22.36
(1,40)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:TYR:N	3	22.31
(1,14)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:C	1:A:26:ILE:N	11	22.0
(1,14)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:C	1:A:26:ILE:N	2	21.92
(1,30)	1:A:51:ALA:N	1:A:51:ALA:CA	1:A:51:ALA:C	1:A:52:TYR:N	1	21.75
(1,14)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:C	1:A:26:ILE:N	14	21.64
(1,14)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:C	1:A:26:ILE:N	20	21.64
(1,48)	1:A:75:ILE:N	1:A:75:ILE:CA	1:A:75:ILE:C	1:A:76:LYS:N	2	21.63
(1,40)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:TYR:N	20	21.39
(1,34)	1:A:53:VAL:N	1:A:53:VAL:CA	1:A:53:VAL:C	1:A:54:ASP:N	16	21.18
(1,30)	1:A:51:ALA:N	1:A:51:ALA:CA	1:A:51:ALA:C	1:A:52:TYR:N	5	21.11
(1,58)	1:A:87:LEU:N	1:A:87:LEU:CA	1:A:87:LEU:C	1:A:88:GLN:N	4	20.98
(1,58)	1:A:87:LEU:N	1:A:87:LEU:CA	1:A:87:LEU:C	1:A:88:GLN:N	2	20.31
(1,52)	1:A:84:VAL:N	1:A:84:VAL:CA	1:A:84:VAL:C	1:A:85:VAL:N	14	19.91
(1,58)	1:A:87:LEU:N	1:A:87:LEU:CA	1:A:87:LEU:C	1:A:88:GLN:N	3	19.73
(1,14)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:C	1:A:26:ILE:N	19	19.7
(1,40)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:TYR:N	19	19.46
(1,52)	1:A:84:VAL:N	1:A:84:VAL:CA	1:A:84:VAL:C	1:A:85:VAL:N	5	19.26
(1,48)	1:A:75:ILE:N	1:A:75:ILE:CA	1:A:75:ILE:C	1:A:76:LYS:N	8	19.06
(1,14)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:C	1:A:26:ILE:N	5	19.04
(1,52)	1:A:84:VAL:N	1:A:84:VAL:CA	1:A:84:VAL:C	1:A:85:VAL:N	12	18.47
(1,26)	1:A:37:THR:N	1:A:37:THR:CA	1:A:37:THR:C	1:A:38:GLU:N	19	17.96
(1,38)	1:A:63:HIS:N	1:A:63:HIS:CA	1:A:63:HIS:C	1:A:64:ASP:N	6	17.82
(1,52)	1:A:84:VAL:N	1:A:84:VAL:CA	1:A:84:VAL:C	1:A:85:VAL:N	1	17.79
(1,26)	1:A:37:THR:N	1:A:37:THR:CA	1:A:37:THR:C	1:A:38:GLU:N	3	17.78
(1,26)	1:A:37:THR:N	1:A:37:THR:CA	1:A:37:THR:C	1:A:38:GLU:N	15	16.83
(1,58)	1:A:87:LEU:N	1:A:87:LEU:CA	1:A:87:LEU:C	1:A:88:GLN:N	20	16.78
(1,58)	1:A:87:LEU:N	1:A:87:LEU:CA	1:A:87:LEU:C	1:A:88:GLN:N	5	16.77
(1,30)	1:A:51:ALA:N	1:A:51:ALA:CA	1:A:51:ALA:C	1:A:52:TYR:N	12	16.55
(1,58)	1:A:87:LEU:N	1:A:87:LEU:CA	1:A:87:LEU:C	1:A:88:GLN:N	17	16.51
(1,58)	1:A:87:LEU:N	1:A:87:LEU:CA	1:A:87:LEU:C	1:A:88:GLN:N	10	15.95
(1,14)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:C	1:A:26:ILE:N	4	15.72
(1,40)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:TYR:N	12	15.6
(1,26)	1:A:37:THR:N	1:A:37:THR:CA	1:A:37:THR:C	1:A:38:GLU:N	5	15.43
(1,58)	1:A:87:LEU:N	1:A:87:LEU:CA	1:A:87:LEU:C	1:A:88:GLN:N	18	15.31
(1,34)	1:A:53:VAL:N	1:A:53:VAL:CA	1:A:53:VAL:C	1:A:54:ASP:N	12	15.14
(1,52)	1:A:84:VAL:N	1:A:84:VAL:CA	1:A:84:VAL:C	1:A:85:VAL:N	8	14.94
(1,40)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:TYR:N	10	14.61
(1,58)	1:A:87:LEU:N	1:A:87:LEU:CA	1:A:87:LEU:C	1:A:88:GLN:N	9	14.51
(1,14)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:C	1:A:26:ILE:N	12	14.39

Continued on next page...



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation ( ° )
(1,30)	1:A:51:ALA:N	1:A:51:ALA:CA	1:A:51:ALA:C	1:A:52:TYR:N	11	13.97
(1,52)	1:A:84:VAL:N	1:A:84:VAL:CA	1:A:84:VAL:C	1:A:85:VAL:N	18	13.42
(1,26)	1:A:37:THR:N	1:A:37:THR:CA	1:A:37:THR:C	1:A:38:GLU:N	10	13.39
(1,34)	1:A:53:VAL:N	1:A:53:VAL:CA	1:A:53:VAL:C	1:A:54:ASP:N	3	13.2
(1,58)	1:A:87:LEU:N	1:A:87:LEU:CA	1:A:87:LEU:C	1:A:88:GLN:N	19	12.85
(1,30)	1:A:51:ALA:N	1:A:51:ALA:CA	1:A:51:ALA:C	1:A:52:TYR:N	17	12.66
(1,14)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:C	1:A:26:ILE:N	8	12.53
(1,52)	1:A:84:VAL:N	1:A:84:VAL:CA	1:A:84:VAL:C	1:A:85:VAL:N	15	12.43
(1,34)	1:A:53:VAL:N	1:A:53:VAL:CA	1:A:53:VAL:C	1:A:54:ASP:N	7	12.36
(1,52)	1:A:84:VAL:N	1:A:84:VAL:CA	1:A:84:VAL:C	1:A:85:VAL:N	13	12.15
(1,34)	1:A:53:VAL:N	1:A:53:VAL:CA	1:A:53:VAL:C	1:A:54:ASP:N	8	11.48
(1,8)	1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:CA	1:A:13:LEU:C	1:A:14:SER:N	3	11.25
(1,26)	1:A:37:THR:N	1:A:37:THR:CA	1:A:37:THR:C	1:A:38:GLU:N	16	11.05
(1,8)	1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:CA	1:A:13:LEU:C	1:A:14:SER:N	17	10.95
(1,34)	1:A:53:VAL:N	1:A:53:VAL:CA	1:A:53:VAL:C	1:A:54:ASP:N	6	10.77
(1,30)	1:A:51:ALA:N	1:A:51:ALA:CA	1:A:51:ALA:C	1:A:52:TYR:N	16	10.67
(1,40)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:TYR:N	16	9.19
(1,52)	1:A:84:VAL:N	1:A:84:VAL:CA	1:A:84:VAL:C	1:A:85:VAL:N	3	8.41
(1,14)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:C	1:A:26:ILE:N	15	8.17
(1,40)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:TYR:N	5	7.74
(1,34)	1:A:53:VAL:N	1:A:53:VAL:CA	1:A:53:VAL:C	1:A:54:ASP:N	4	7.67
(1,34)	1:A:53:VAL:N	1:A:53:VAL:CA	1:A:53:VAL:C	1:A:54:ASP:N	14	7.62
(1,14)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:C	1:A:26:ILE:N	1	7.12
(1,34)	1:A:53:VAL:N	1:A:53:VAL:CA	1:A:53:VAL:C	1:A:54:ASP:N	1	5.24
(1,34)	1:A:53:VAL:N	1:A:53:VAL:CA	1:A:53:VAL:C	1:A:54:ASP:N	5	5.07
(1,52)	1:A:84:VAL:N	1:A:84:VAL:CA	1:A:84:VAL:C	1:A:85:VAL:N	2	4.98
(1,52)	1:A:84:VAL:N	1:A:84:VAL:CA	1:A:84:VAL:C	1:A:85:VAL:N	4	4.3
(1,52)	1:A:84:VAL:N	1:A:84:VAL:CA	1:A:84:VAL:C	1:A:85:VAL:N	10	4.25
(1,14)	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:C	1:A:26:ILE:N	18	3.97
(1,8)	1:A:13:LEU:N	1:A:13:LEU:CA	1:A:13:LEU:C	1:A:14:SER:N	12	3.53
(1,52)	1:A:84:VAL:N	1:A:84:VAL:CA	1:A:84:VAL:C	1:A:85:VAL:N	16	2.99
(1,34)	1:A:53:VAL:N	1:A:53:VAL:CA	1:A:53:VAL:C	1:A:54:ASP:N	17	2.79
(1,40)	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	1:A:65:TYR:N	4	2.77
(1,52)	1:A:84:VAL:N	1:A:84:VAL:CA	1:A:84:VAL:C	1:A:85:VAL:N	7	2.31
(1,52)	1:A:84:VAL:N	1:A:84:VAL:CA	1:A:84:VAL:C	1:A:85:VAL:N	17	1.47
(1,34)	1:A:53:VAL:N	1:A:53:VAL:CA	1:A:53:VAL:C	1:A:54:ASP:N	10	1.42
(1,34)	1:A:53:VAL:N	1:A:53:VAL:CA	1:A:53:VAL:C	1:A:54:ASP:N	15	1.24
(1,52)	1:A:84:VAL:N	1:A:84:VAL:CA	1:A:84:VAL:C	1:A:85:VAL:N	19	0.55
(1,45)	1:A:71:PRO:C	1:A:72:ILE:N	1:A:72:ILE:CA	1:A:72:ILE:C	15	0.5
(1,43)	1:A:68:LYS:C	1:A:69:VAL:N	1:A:69:VAL:CA	1:A:69:VAL:C	3	0.37
(1,33)	1:A:52:TYR:C	1:A:53:VAL:N	1:A:53:VAL:CA	1:A:53:VAL:C	9	0.33
(1,52)	1:A:84:VAL:N	1:A:84:VAL:CA	1:A:84:VAL:C	1:A:85:VAL:N	6	0.31
(1,65)	1:A:90:GLU:C	1:A:91:HIS:N	1:A:91:HIS:CA	1:A:91:HIS:C	7	0.29
(1,39)	1:A:63:HIS:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	19	0.29
(1,43)	1:A:68:LYS:C	1:A:69:VAL:N	1:A:69:VAL:CA	1:A:69:VAL:C	20	0.27
(1,33)	1:A:52:TYR:C	1:A:53:VAL:N	1:A:53:VAL:CA	1:A:53:VAL:C	14	0.26
(1,33)	1:A:52:TYR:C	1:A:53:VAL:N	1:A:53:VAL:CA	1:A:53:VAL:C	7	0.25
(1,3)	1:A:10:THR:C	1:A:11:LEU:N	1:A:11:LEU:CA	1:A:11:LEU:C	17	0.24
(1,45)	1:A:71:PRO:C	1:A:72:ILE:N	1:A:72:ILE:CA	1:A:72:ILE:C	14	0.23
(1,33)	1:A:52:TYR:C	1:A:53:VAL:N	1:A:53:VAL:CA	1:A:53:VAL:C	2	0.21
(1,33)	1:A:52:TYR:C	1:A:53:VAL:N	1:A:53:VAL:CA	1:A:53:VAL:C	5	0.21

Continued on next page...



Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model	Violation ( ° )
(1,53)	1:A:84:VAL:C	1:A:85:VAL:N	1:A:85:VAL:CA	1:A:85:VAL:C	6	0.2
(1,13)	1:A:24:SER:C	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:C	1	0.2
(1,13)	1:A:24:SER:C	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:C	10	0.2
(1,64)	1:A:90:GLU:N	1:A:90:GLU:CA	1:A:90:GLU:C	1:A:91:HIS:N	2	0.19
(1,63)	1:A:89:LEU:C	1:A:90:GLU:N	1:A:90:GLU:CA	1:A:90:GLU:C	7	0.18
(1,43)	1:A:68:LYS:C	1:A:69:VAL:N	1:A:69:VAL:CA	1:A:69:VAL:C	11	0.18
(1,1)	1:A:9:PRO:C	1:A:10:THR:N	1:A:10:THR:CA	1:A:10:THR:C	8	0.18
(1,63)	1:A:89:LEU:C	1:A:90:GLU:N	1:A:90:GLU:CA	1:A:90:GLU:C	18	0.15
(1,33)	1:A:52:TYR:C	1:A:53:VAL:N	1:A:53:VAL:CA	1:A:53:VAL:C	13	0.15
(1,20)	1:A:34:ARG:N	1:A:34:ARG:CA	1:A:34:ARG:C	1:A:35:VAL:N	19	0.15
(1,53)	1:A:84:VAL:C	1:A:85:VAL:N	1:A:85:VAL:CA	1:A:85:VAL:C	17	0.12
(1,34)	1:A:53:VAL:N	1:A:53:VAL:CA	1:A:53:VAL:C	1:A:54:ASP:N	2	0.1
(1,45)	1:A:71:PRO:C	1:A:72:ILE:N	1:A:72:ILE:CA	1:A:72:ILE:C	12	0.09
(1,13)	1:A:24:SER:C	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:C	18	0.09
(1,66)	1:A:91:HIS:N	1:A:91:HIS:CA	1:A:91:HIS:C	1:A:92:HIS:N	15	0.07
(1,39)	1:A:63:HIS:C	1:A:64:ASP:N	1:A:64:ASP:CA	1:A:64:ASP:C	7	0.07
(1,33)	1:A:52:TYR:C	1:A:53:VAL:N	1:A:53:VAL:CA	1:A:53:VAL:C	16	0.07
(1,45)	1:A:71:PRO:C	1:A:72:ILE:N	1:A:72:ILE:CA	1:A:72:ILE:C	11	0.06
(1,13)	1:A:24:SER:C	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:C	16	0.05
(1,49)	1:A:75:ILE:C	1:A:76:LYS:N	1:A:76:LYS:CA	1:A:76:LYS:C	2	0.04
(1,33)	1:A:52:TYR:C	1:A:53:VAL:N	1:A:53:VAL:CA	1:A:53:VAL:C	3	0.03
(1,33)	1:A:52:TYR:C	1:A:53:VAL:N	1:A:53:VAL:CA	1:A:53:VAL:C	20	0.03
(1,43)	1:A:68:LYS:C	1:A:69:VAL:N	1:A:69:VAL:CA	1:A:69:VAL:C	1	0.01
(1,23)	1:A:35:VAL:C	1:A:36:LYS:N	1:A:36:LYS:CA	1:A:36:LYS:C	2	0.01
(1,13)	1:A:24:SER:C	1:A:25:MET:N	1:A:25:MET:CA	1:A:25:MET:C	5	0.01