Full wwPDB NMR Structure Validation Report (i)

Jun 3, 2023 – 11:09 PM EDT

PDB ID	:	7KAA
BMRB ID	:	30801
Title	:	NMR solution structures of tirasemtiv drug bound to a fast skeletal troponin C-troponin I complex
Authors	:	Mercier, P.; Li, M.X.; Hartman, J.J.; Sykes, B.D.
Deposited on	:	2020-09-30

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

We welcome your comments at *validation@mail.wwpdb.org*
A user guide is available at
https://www.wwpdb.org/validation/2017/NMRValidationReportHelp
with specific help available everywhere you see the (i) symbol.

The types of validation reports are described at
http://www.wwpdb.org/validation/2017/FAQs#types.

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

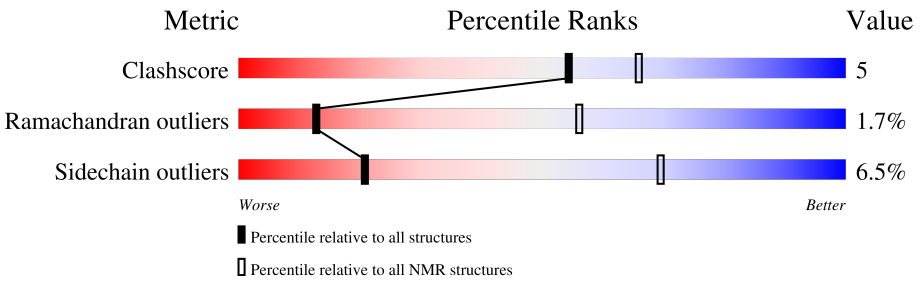
MolProbity	:	4.02b-467
Mogul	:	1.8.5 (274361), CSD as541be (2020)
buster-report	:	1.1.7 (2018)
Percentile statistics	:	20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
wwPDB-RCI	:	v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV	:	Wang et al. (2010)
wwPDB-ShiftChecker	:	v1.2
BMRB Restraints Analysis	:	v1.2
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP)	:	2.33

1 Overall quality at a glance (i)

The following experimental techniques were used to determine the structure:
SOLUTION NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment is 79%.

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	158937	12864
Ramachandran outliers	154571	11451
Sidechain outliers	154315	11428

The table below summarises the geometric issues observed across the polymeric chains and their fit to the experimental data. The red, orange, yellow and green segments indicate the fraction of residues that contain outliers for >=3, 2, 1 and 0 types of geometric quality criteria. A cyan segment indicates the fraction of residues that are not part of the well-defined cores, and a grey segment represents the fraction of residues that are not modelled. The numeric value for each fraction is indicated below the corresponding segment, with a dot representing fractions <=5%

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	152	58% 12% 30%

2 Ensemble composition and analysis (i)

This entry contains 25 models. Model 21 is the overall representative, medoid model (most similar to other models). The authors have identified model 1 as representative, based on the following criterion: *lowest energy*.

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

Well-defined (core) protein residues			
Well-defined core	**Residue range (total)**	**Backbone RMSD (Å)**	**Medoid model**
1	A:7-A:91, A:114-A:135 (107)	0.86	21

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

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

The models can be grouped into 5 clusters and 2 single-model clusters were found.

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

3 Entry composition (i)

There are 3 unique types of molecules in this entry. The entry contains 2406 atoms, of which 1199 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a protein called Troponin C, skeletal muscle,Troponin I, fast skeletal muscle chimera.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
			Total	C	H	N	O	S	
1	A	152	2374	736	1185	212	228	13	0

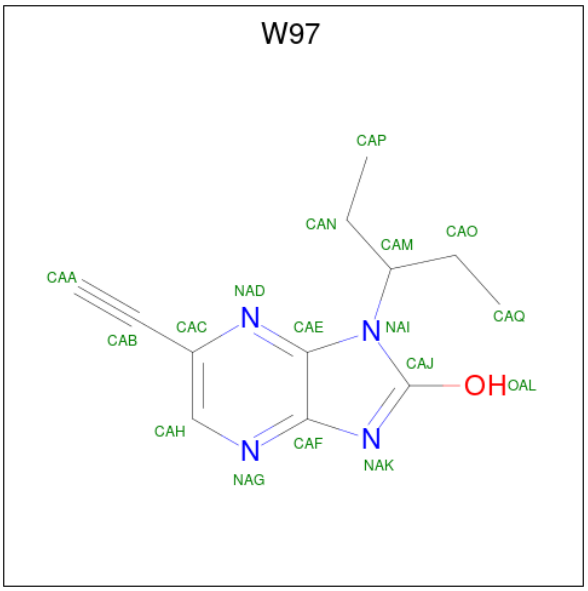
There are 14 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	1	MET	-	initiating methionine	UNP P02585
A	2	ALA	-	expression tag	UNP P02585
A	3	SER	-	expression tag	UNP P02585
A	92	GLY	-	linker	UNP P02585
A	93	GLY	-	linker	UNP P02585
A	94	ALA	-	linker	UNP P02585
A	95	GLY	-	linker	UNP P02585
A	96	GLY	-	linker	UNP P02585
A	147	HIS	-	expression tag	UNP P48788
A	148	HIS	-	expression tag	UNP P48788
A	149	HIS	-	expression tag	UNP P48788
A	150	HIS	-	expression tag	UNP P48788
A	151	HIS	-	expression tag	UNP P48788
A	152	HIS	-	expression tag	UNP P48788

- Molecule 2 is CALCIUM ION (three-letter code: CA) (formula: Ca).

Mol	Chain	Residues	Atoms	
			Total	Ca
2	A	1	1	1

- Molecule 3 is 6-ethynyl-1-(pentan-3-yl)-1H-imidazo[4,5-b]pyrazin-2-ol (three-letter code: W97) (formula: $C_{12}H_{14}N_4O$) (labeled as "Ligand of Interest" by depositor).



Mol	Chain	Residues	Atoms				
			Total	C	H	N	O
3	A	1	31	12	14	4	1

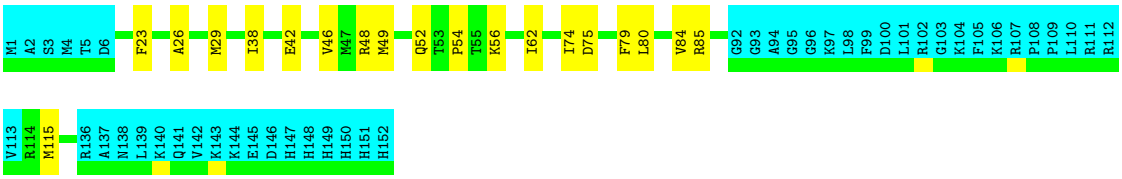
4 Residue-property plots (i)

4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

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

• Molecule 1: Troponin C, skeletal muscle,Troponin I, fast skeletal muscle chimera

Chain A: 58% 12% 30%



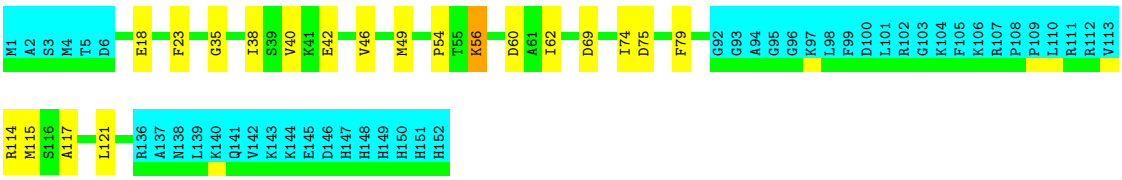
4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

• Molecule 1: Troponin C, skeletal muscle,Troponin I, fast skeletal muscle chimera

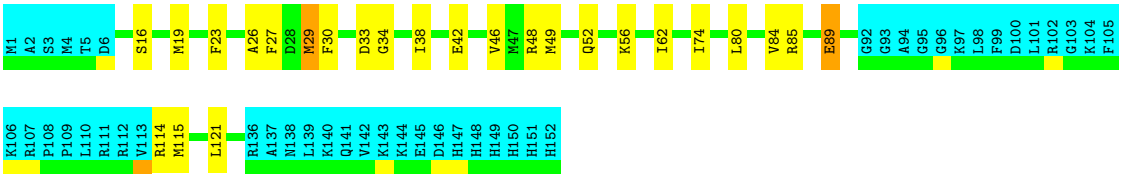
Chain A: 57% 12% • 30%



4.2.2 Score per residue for model 2

• Molecule 1: Troponin C, skeletal muscle,Troponin I, fast skeletal muscle chimera

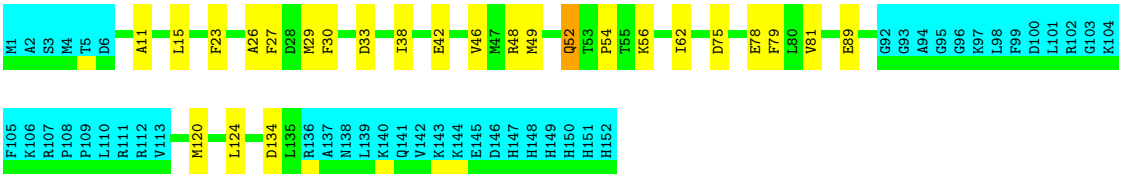
Chain A: 54% 15% • 30%



4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: Troponin C, skeletal muscle,Troponin I, fast skeletal muscle chimera

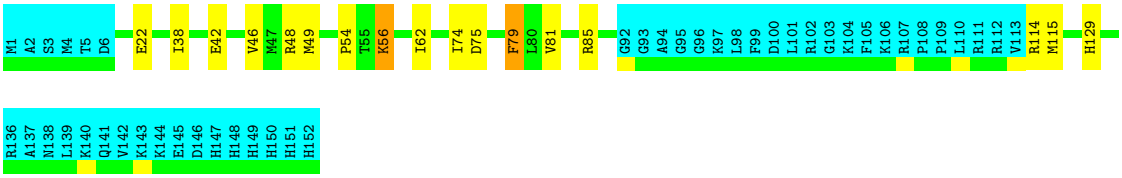
Chain A: 54% 16% • 30%



4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: Troponin C, skeletal muscle,Troponin I, fast skeletal muscle chimera

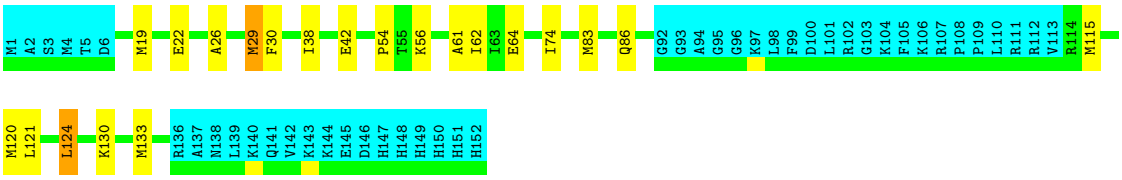
Chain A: 59% 10% • 30%



4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: Troponin C, skeletal muscle,Troponin I, fast skeletal muscle chimera

Chain A: 57% 12% • 30%



4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: Troponin C, skeletal muscle,Troponin I, fast skeletal muscle chimera

Chain A: 55% 15% • 30%

M1 A2 S3 M4 T5 D6 R12 F23 A26 M29 I38 E42 V46 M47 R48 M49 Q52 T53 P54 E58 I62 I74 D75 F79 V84 R85 Q86 M87 K88 G92 G93 A94 G95 G96 K97 L98 F99 D100 L101 R102 G103 K104 F105 K106 R107 P108 P109 L110 R111 R112 V113 D118 L121 L125 K128 M133 R136 A137 N138 L139 K140 Q141 V142 K143 K144 E145 D146 H147 H148 H149 H150 H151 H152

4.2.7 Score per residue for model 7

• Molecule 1: Troponin C, skeletal muscle,Troponin I, fast skeletal muscle chimera

Chain A: 55% 15% 30%

M1 A2 S3 M4 T5 D6 A11 Y14 L15 M29 F30 D31 A32 D33 I38 K41 E42 V46 L50 P54 T55 K56 I62 D75 F79 L80 V81 M82 R85 G92 G93 A94 G95 G96 K97 L98 F99 D100 L101 R102 G103 K104 F105 K106 R107 P108 P109 L110 R111 R112 V113 S116 M120 L125 L135 R136 A137 N138 L139 K140 Q141 V142 K143 K144 E145 D146 H147 H148 H149 H150 H151 H152

4.2.8 Score per residue for model 8

• Molecule 1: Troponin C, skeletal muscle,Troponin I, fast skeletal muscle chimera

Chain A: 58% 11% • 30%

M1 A2 S3 M4 T5 D6 A11 L15 S16 M19 A26 M29 D33 I38 E42 L43 G44 R48 Q52 T53 P54 I62 E65 D75 E78 F79 L80 V84 G92 G93 A94 G95 G96 K97 L98 F99 D100 L101 R102 G103 K104 F105 K106 R107 P108 P109 L110 R111 R112 V113 R136 A137 N138 L139 K140 Q141 V142 K143 K144 E145 D146 H147 H148 H149 H150 H151 H152

4.2.9 Score per residue for model 9

• Molecule 1: Troponin C, skeletal muscle,Troponin I, fast skeletal muscle chimera

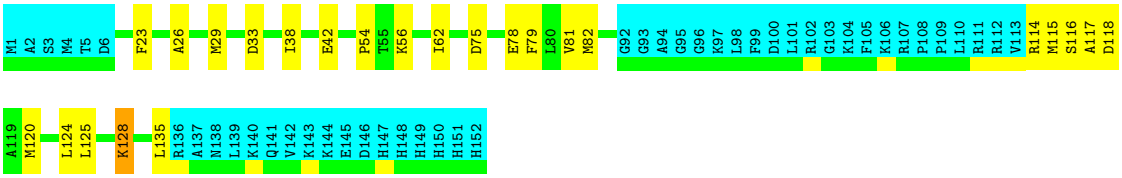
Chain A: 54% 15% • 30%

M1 A2 S3 M4 T5 D6 E22 F23 A26 M29 I38 E42 V46 M47 R48 M49 Q52 T53 P54 I62 I74 D75 F79 L80 V84 R85 G92 G93 A94 G95 G96 K97 L98 F99 D100 L101 R102 G103 K104 F105 K106 R107 P108 P109 L110 R111 R112 V113 R114 M115 L125 K128 H129 K130 V131 L135 R136 A137 N138 L139 K140 Q141 V142 K143 K144 E145 D146 H147 H148 H149 H150 H151 H152

4.2.10 Score per residue for model 10

• Molecule 1: Troponin C, skeletal muscle,Troponin I, fast skeletal muscle chimera

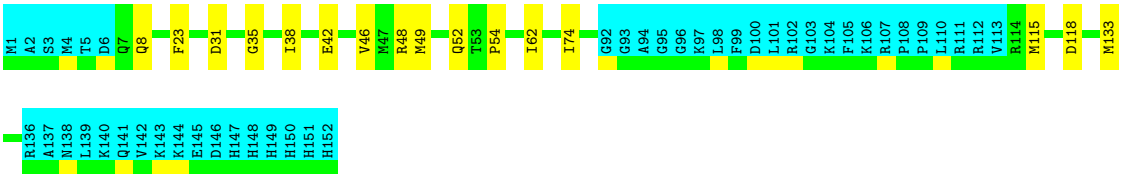
Chain A: 55% 15% • 30%



4.2.11 Score per residue for model 11

• Molecule 1: Troponin C, skeletal muscle,Troponin I, fast skeletal muscle chimera

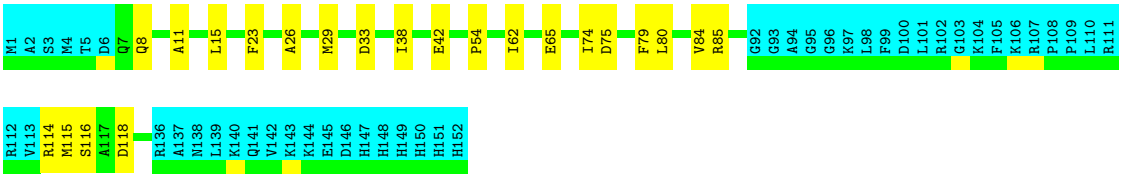
Chain A: 60% 11% 30%



4.2.12 Score per residue for model 12

• Molecule 1: Troponin C, skeletal muscle,Troponin I, fast skeletal muscle chimera

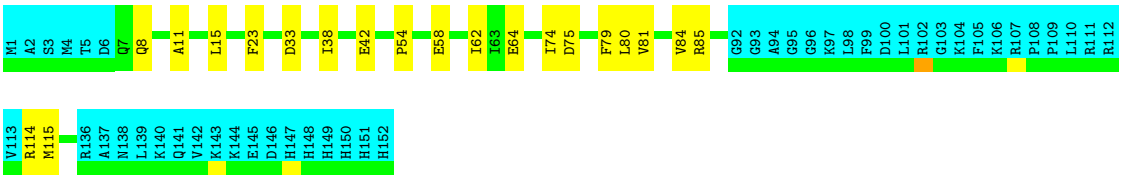
Chain A: 56% 14% 30%



4.2.13 Score per residue for model 13

• Molecule 1: Troponin C, skeletal muscle,Troponin I, fast skeletal muscle chimera

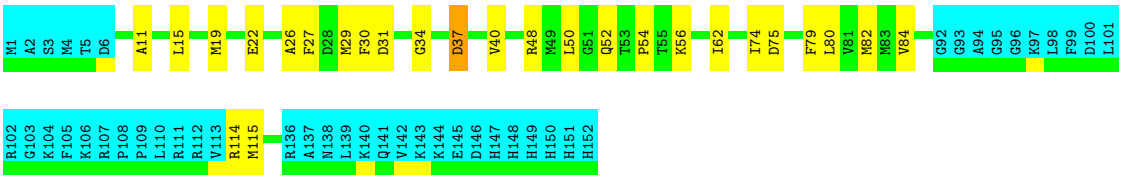
Chain A: 57% 13% 30%



4.2.14 Score per residue for model 14

• Molecule 1: Troponin C, skeletal muscle,Troponin I, fast skeletal muscle chimera

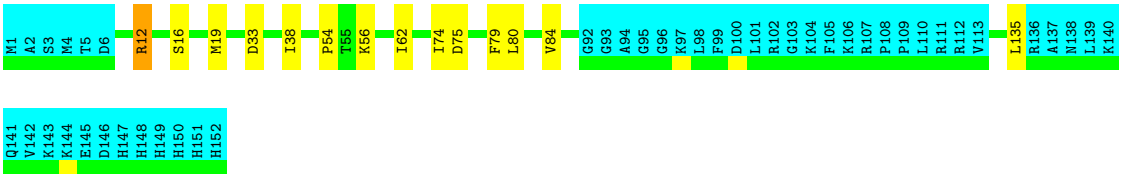
Chain A: 53% 16% • 30%



4.2.15 Score per residue for model 15

• Molecule 1: Troponin C, skeletal muscle,Troponin I, fast skeletal muscle chimera

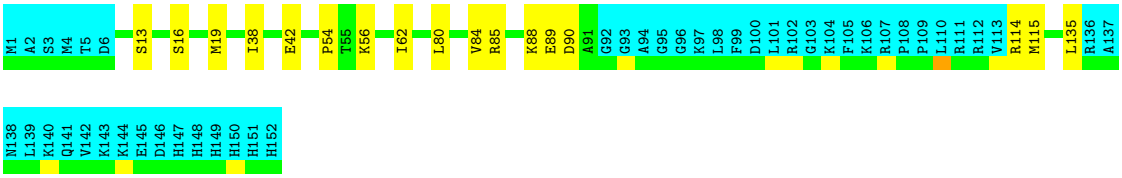
Chain A: 61% 9% • 30%



4.2.16 Score per residue for model 16

• Molecule 1: Troponin C, skeletal muscle,Troponin I, fast skeletal muscle chimera

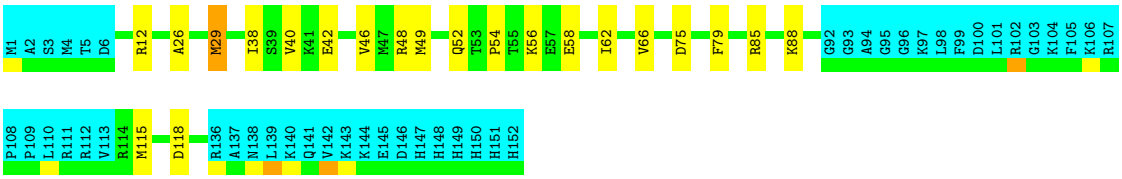
Chain A: 59% 11% 30%



4.2.17 Score per residue for model 17

• Molecule 1: Troponin C, skeletal muscle,Troponin I, fast skeletal muscle chimera

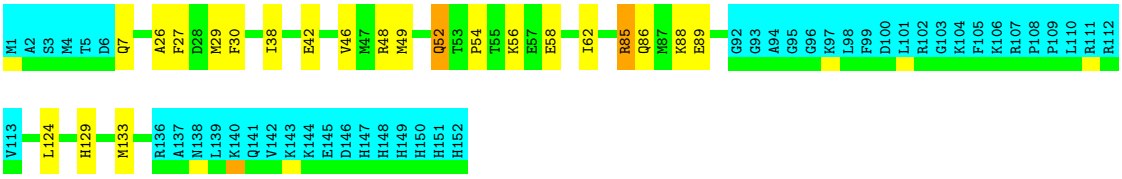
Chain A: 57% 13% • 30%



4.2.18 Score per residue for model 18

• Molecule 1: Troponin C, skeletal muscle,Troponin I, fast skeletal muscle chimera

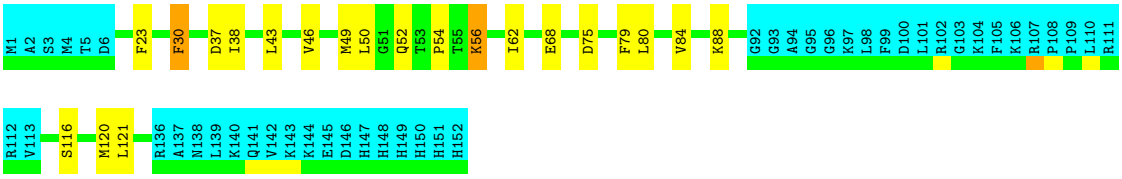
Chain A: 56% 13% • 30%



4.2.19 Score per residue for model 19

• Molecule 1: Troponin C, skeletal muscle,Troponin I, fast skeletal muscle chimera

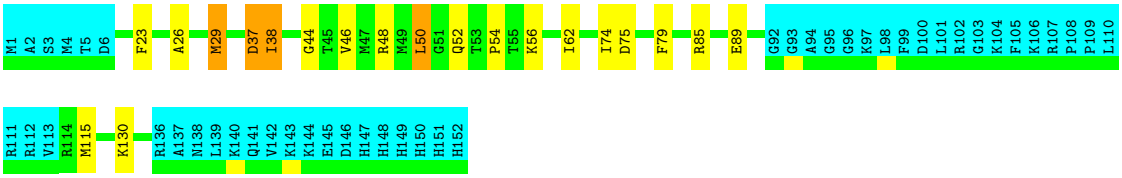
Chain A: 57% 12% • 30%



4.2.20 Score per residue for model 20

• Molecule 1: Troponin C, skeletal muscle,Troponin I, fast skeletal muscle chimera

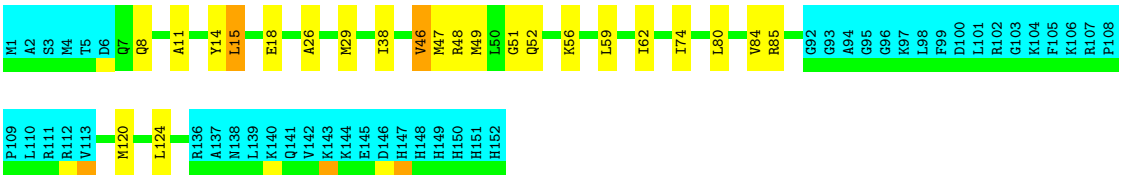
Chain A: 57% 11% • 30%



4.2.21 Score per residue for model 21 (medoid)

• Molecule 1: Troponin C, skeletal muscle,Troponin I, fast skeletal muscle chimera

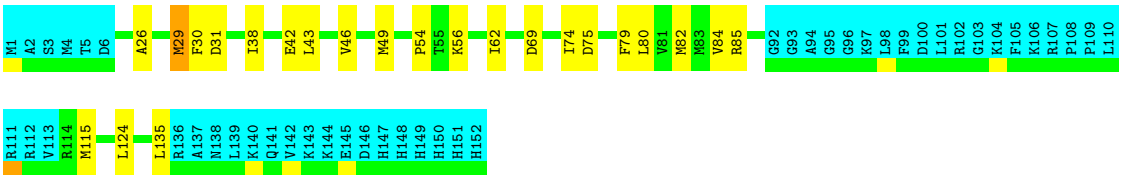
Chain A: 55% 14% • 30%



4.2.22 Score per residue for model 22

• Molecule 1: Troponin C, skeletal muscle,Troponin I, fast skeletal muscle chimera

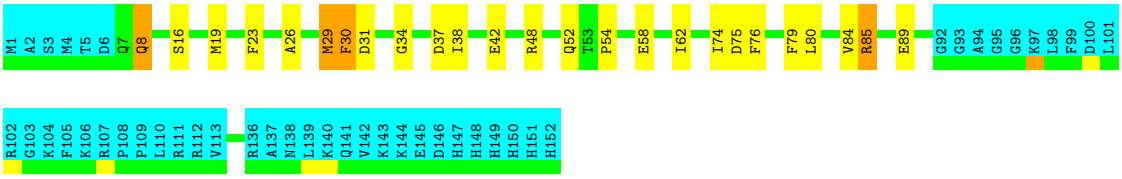
Chain A: 55% 14% • 30%



4.2.23 Score per residue for model 23

• Molecule 1: Troponin C, skeletal muscle,Troponin I, fast skeletal muscle chimera

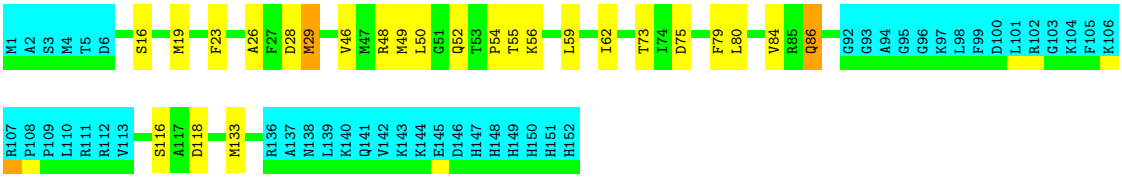
Chain A: 54% 14% • 30%



4.2.24 Score per residue for model 24

• Molecule 1: Troponin C, skeletal muscle,Troponin I, fast skeletal muscle chimera

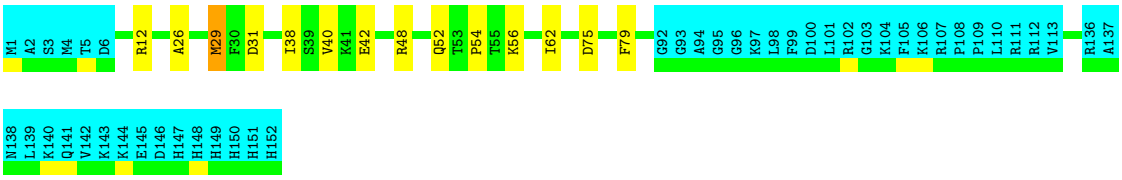
Chain A: 54% 15% • 30%



4.2.25 Score per residue for model 25

• Molecule 1: Troponin C, skeletal muscle,Troponin I, fast skeletal muscle chimera

Chain A: 61% 9% • 30%



5 Refinement protocol and experimental data overview (i)

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

Of the 100 calculated structures, 25 were deposited, based on the following criterion: *structures with the lowest energy*.

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

Software name	**Classification**	**Version**
CYANA	structure calculation	2.1
X-PLOR NIH	refinement	

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

Chemical shift file(s)	working_cs.cif
Number of chemical shift lists	2
Total number of shifts	1472
Number of shifts mapped to atoms	1472
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Assignment completeness (well-defined parts)	79%

6 Model quality (i)

6.1 Standard geometry (i)

Bond lengths and bond angles in the following residue types are not validated in this section: W97, CA

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	823	806	804	9±2
3	A	17	14	0	0±1
All	All	21025	20500	20100	222

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 5.

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

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:75:ASP:O	1:A:79:PHE:HB2	0.71	1.85	23	15
1:A:48:ARG:HA	1:A:52:GLN:O	0.70	1.86	25	14
1:A:26:ALA:HA	1:A:29:MET:SD	0.68	2.27	20	11
1:A:11:ALA:O	1:A:15:LEU:HG	0.64	1.93	14	4
1:A:81:VAL:O	1:A:85:ARG:HG3	0.63	1.94	13	3
1:A:84:VAL:O	1:A:88:LYS:HB2	0.63	1.93	19	2
1:A:16:SER:O	1:A:19:MET:HG2	0.61	1.95	2	6
1:A:38:ILE:CG1	1:A:74:ILE:HB	0.61	2.25	20	1
1:A:80:LEU:O	1:A:84:VAL:HG23	0.61	1.95	8	8
1:A:118:ASP:HA	1:A:133:MET:SD	0.61	2.35	11	2
1:A:38:ILE:HG23	1:A:42:GLU:HB2	0.58	1.75	5	19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:11:ALA:O	1:A:15:LEU:HD23	0.58	1.98	13	2
1:A:43:LEU:HD12	1:A:74:ILE:HD11	0.57	1.76	22	1
1:A:80:LEU:O	1:A:84:VAL:HG13	0.56	2.01	22	5
1:A:27:PHE:HA	1:A:30:PHE:CE2	0.56	2.35	2	4
1:A:26:ALA:HB1	1:A:79:PHE:CZ	0.54	2.37	20	2
1:A:22:GLU:OE2	1:A:130:LYS:HG2	0.54	2.03	5	2
1:A:125:LEU:O	1:A:128:LYS:HB2	0.54	2.03	10	3
1:A:15:LEU:HD22	1:A:19:MET:SD	0.53	2.43	14	1
1:A:85:ARG:O	1:A:89:GLU:HG2	0.53	2.04	20	5
1:A:85:ARG:NH1	1:A:85:ARG:HB3	0.53	2.17	7	1
1:A:37:ASP:HA	1:A:74:ILE:O	0.53	2.03	23	3
1:A:75:ASP:O	1:A:79:PHE:HB3	0.52	2.04	4	1
1:A:14:TYR:CE2	1:A:135:LEU:HA	0.52	2.38	7	1
1:A:38:ILE:HB	1:A:74:ILE:HB	0.52	1.82	20	12
1:A:86:GLN:NE2	1:A:116:SER:HA	0.52	2.20	24	1
1:A:79:PHE:O	1:A:82:MET:HG2	0.52	2.05	10	1
1:A:56:LYS:HD2	1:A:56:LYS:O	0.52	2.05	10	6
1:A:26:ALA:HA	1:A:29:MET:CE	0.50	2.36	17	1
1:A:135:LEU:O	1:A:135:LEU:HD12	0.50	2.06	10	1
1:A:22:GLU:OE1	1:A:131:VAL:HG22	0.49	2.08	9	1
1:A:22:GLU:OE2	1:A:129:HIS:HA	0.49	2.07	4	1
1:A:120:MET:SD	1:A:124:LEU:HD13	0.48	2.49	5	3
1:A:86:GLN:HB2	3:A:202:W97:NAG	0.48	2.23	6	1
1:A:38:ILE:CB	1:A:74:ILE:HB	0.48	2.38	20	1
1:A:27:PHE:CE1	1:A:34:GLY:HA2	0.48	2.44	2	1
1:A:26:ALA:O	1:A:29:MET:HG2	0.48	2.09	12	5
1:A:46:VAL:O	1:A:49:MET:HB3	0.48	2.09	21	13
1:A:61:ALA:O	1:A:64:GLU:HG2	0.47	2.09	5	1
1:A:129:HIS:HE1	1:A:133:MET:SD	0.47	2.32	18	1
1:A:47:MET:SD	1:A:59:LEU:HD22	0.47	2.49	21	1
3:A:202:W97:NAD	3:A:202:W97:CAO	0.47	2.78	4	1
1:A:46:VAL:O	1:A:50:LEU:HD22	0.47	2.10	19	4
1:A:120:MET:SD	1:A:121:LEU:HG	0.46	2.51	19	1
1:A:40:VAL:HG21	1:A:56:LYS:HD2	0.46	1.88	17	2
1:A:29:MET:HE2	1:A:124:LEU:HB3	0.46	1.87	22	1
1:A:62:ILE:HA	1:A:65:GLU:OE2	0.46	2.11	8	1
1:A:75:ASP:N	1:A:78:GLU:HB2	0.46	2.25	8	1
1:A:78:GLU:O	1:A:81:VAL:HG22	0.46	2.10	3	2
1:A:30:PHE:CD2	1:A:43:LEU:HA	0.46	2.46	19	1
1:A:83:MET:SD	1:A:121:LEU:HD21	0.45	2.52	5	1
1:A:12:ARG:HD3	1:A:12:ARG:O	0.45	2.12	15	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:15:LEU:HD22	1:A:15:LEU:N	0.45	2.26	21	1
3:A:202:W97:NAD	3:A:202:W97:CAN	0.45	2.80	21	1
1:A:117:ALA:O	1:A:121:LEU:HG	0.44	2.13	1	1
1:A:79:PHE:O	1:A:82:MET:HB3	0.44	2.13	7	1
1:A:26:ALA:HA	1:A:29:MET:HG2	0.44	1.87	18	1
1:A:19:MET:SD	1:A:133:MET:HA	0.44	2.53	5	1
1:A:118:ASP:HA	1:A:133:MET:CE	0.44	2.43	24	1
1:A:44:GLY:O	1:A:48:ARG:HG2	0.43	2.13	8	2
1:A:30:PHE:HB2	1:A:38:ILE:HD13	0.43	1.90	19	1
1:A:38:ILE:HG23	1:A:42:GLU:CB	0.43	2.41	1	2
1:A:116:SER:O	1:A:120:MET:HG2	0.43	2.13	7	1
1:A:85:ARG:O	1:A:88:LYS:HG2	0.43	2.14	16	1
1:A:15:LEU:HD21	1:A:84:VAL:HG12	0.43	1.90	12	1
1:A:11:ALA:HA	1:A:14:TYR:CD1	0.43	2.49	21	1
1:A:116:SER:HB3	1:A:118:ASP:OD2	0.43	2.14	10	2
1:A:30:PHE:CD1	1:A:30:PHE:N	0.42	2.87	23	1
1:A:43:LEU:C	1:A:43:LEU:HD23	0.42	2.34	22	1
3:A:202:W97:NAD	3:A:202:W97:CAQ	0.42	2.81	4	1
1:A:129:HIS:CE1	1:A:133:MET:SD	0.42	3.13	18	1
1:A:8:GLN:HG2	1:A:80:LEU:HD12	0.42	1.92	23	1
1:A:40:VAL:HG21	1:A:56:LYS:HD3	0.42	1.91	1	1
1:A:55:THR:O	1:A:59:LEU:HG	0.41	2.15	24	1
1:A:75:ASP:CG	1:A:76:PHE:H	0.41	2.18	23	1
1:A:114:ARG:NH1	3:A:202:W97:NAK	0.41	2.68	13	1
1:A:65:GLU:OE2	1:A:85:ARG:HD3	0.41	2.16	12	1
1:A:116:SER:O	1:A:120:MET:HG3	0.41	2.16	19	1
1:A:56:LYS:C	1:A:56:LYS:HD2	0.41	2.35	5	1
1:A:29:MET:CE	1:A:125:LEU:HG	0.41	2.46	7	1
1:A:118:ASP:HA	1:A:133:MET:HE2	0.41	1.92	24	1
1:A:117:ALA:HA	1:A:120:MET:SD	0.41	2.56	10	1
1:A:46:VAL:CG1	1:A:124:LEU:HD11	0.41	2.46	18	1
1:A:66:VAL:HG12	1:A:85:ARG:CD	0.41	2.46	17	1
1:A:40:VAL:HG23	1:A:56:LYS:HE2	0.40	1.92	14	1
1:A:86:GLN:HG2	3:A:202:W97:NAK	0.40	2.31	18	1
1:A:29:MET:SD	1:A:29:MET:N	0.40	2.94	22	1
1:A:75:ASP:H	1:A:78:GLU:HB2	0.40	1.76	8	1

6.3 Torsion angles (i)

6.3.1 Protein backbone (i)

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

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	107/152 (70%)	97±3 (90±2%)	8±3 (8±2%)	2±1 (2±1%)	13	56
All	All	2675/3800 (70%)	2420 (90%)	210 (8%)	45 (2%)	13	56

All 8 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	54	PRO	23
1	A	33	ASP	8
1	A	31	ASP	6
1	A	35	GLY	2
1	A	75	ASP	2
1	A	34	GLY	2
1	A	114	ARG	1
1	A	51	GLY	1

6.3.2 Protein sidechains (i)

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

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles	
1	A	88/125 (70%)	82±2 (94±2%)	6±2 (6±2%)	21	69
All	All	2200/3125 (70%)	2058 (94%)	142 (6%)	21	69

All 41 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	62	ILE	25
1	A	23	PHE	13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Models (Total)
1	A	115	MET	13
1	A	56	LYS	11
1	A	29	MET	11
1	A	58	GLU	5
1	A	85	ARG	5
1	A	52	GLN	4
1	A	30	PHE	4
1	A	12	ARG	4
1	A	135	LEU	4
1	A	37	ASP	3
1	A	18	GLU	2
1	A	69	ASP	2
1	A	89	GLU	2
1	A	121	LEU	2
1	A	79	PHE	2
1	A	114	ARG	2
1	A	86	GLN	2
1	A	124	LEU	2
1	A	8	GLN	2
1	A	50	LEU	2
1	A	82	MET	2
1	A	60	ASP	1
1	A	134	ASP	1
1	A	48	ARG	1
1	A	41	LYS	1
1	A	128	LYS	1
1	A	64	GLU	1
1	A	22	GLU	1
1	A	90	ASP	1
1	A	88	LYS	1
1	A	118	ASP	1
1	A	7	GLN	1
1	A	68	GLU	1
1	A	38	ILE	1
1	A	130	LYS	1
1	A	15	LEU	1
1	A	46	VAL	1
1	A	28	ASP	1
1	A	73	THR	1

6.3.3 RNA (i)

There are no RNA molecules in this entry.

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

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

6.5 Carbohydrates (i)

There are no monosaccharides in this entry.

6.6 Ligand geometry (i)

Of 2 ligands modelled in this entry, 1 is monoatomic - leaving 1 for Mogul analysis.

In the following table, the Counts columns list the number of bonds for which Mogul statistics could be retrieved, the number of bonds that are observed in the model and the number of bonds that are defined in the chemical component dictionary. The Link column lists molecule types, if any, to which the group is linked. The Z score for a bond length is the number of standard deviations the observed value is removed from the expected value. A bond length with $|Z| > 2$ is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the average root-mean-square of all Z scores of the bond lengths.

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths		
					Counts	RMSZ	#Z>2
3	W97	A	202	-	14,18,18	1.91±0.02	3±1 (23±4%)

In the following table, the Counts columns list the number of angles for which Mogul statistics could be retrieved, the number of angles that are observed in the model and the number of angles that are defined in the chemical component dictionary. The Link column lists molecule types, if any, to which the group is linked. The Z score for a bond angle is the number of standard deviations the observed value is removed from the expected value. A bond angle with $|Z| > 2$ is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the average root-mean-square of all Z scores of the bond angles.

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond angles		
					Counts	RMSZ	#Z>2
3	W97	A	202	-	8,25,25	2.43±0.02	3±0 (37±0%)

In the following table, the Chirals column lists the number of chiral outliers, the number of chiral centers analysed, the number of these observed in the model and the number defined in the chemical component dictionary. Similar counts are reported in the Torsion and Rings columns. '-' means

no outliers of that kind were identified.

Mol	Type	Chain	Res	Link	Chirals	Torsions	Rings
3	W97	A	202	-	-	0±0,4,10,10	0±0,2,2,2

All unique bond outliers are listed below. They are sorted according to the Z-score of the worst occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
3	A	202	W97	CAH-NAG	5.11	1.40	1.31	10	25
3	A	202	W97	CAF-CAE	2.96	1.36	1.44	19	25
3	A	202	W97	OAL-CAJ	2.58	1.36	1.25	7	25
3	A	202	W97	CAJ-NAK	2.17	1.31	1.34	19	3
3	A	202	W97	CAF-NAG	2.05	1.34	1.37	17	4

All unique angle outliers are listed below. They are sorted according to the Z-score of the worst occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(^{o})	Ideal(^{o})	Models	
								Worst	Total
3	A	202	W97	CAE-CAF-NAK	5.61	107.68	114.14	5	25
3	A	202	W97	CAH-NAG-CAF	3.00	119.71	116.69	8	25
3	A	202	W97	CAB-CAC-NAD	2.32	120.27	116.54	25	25

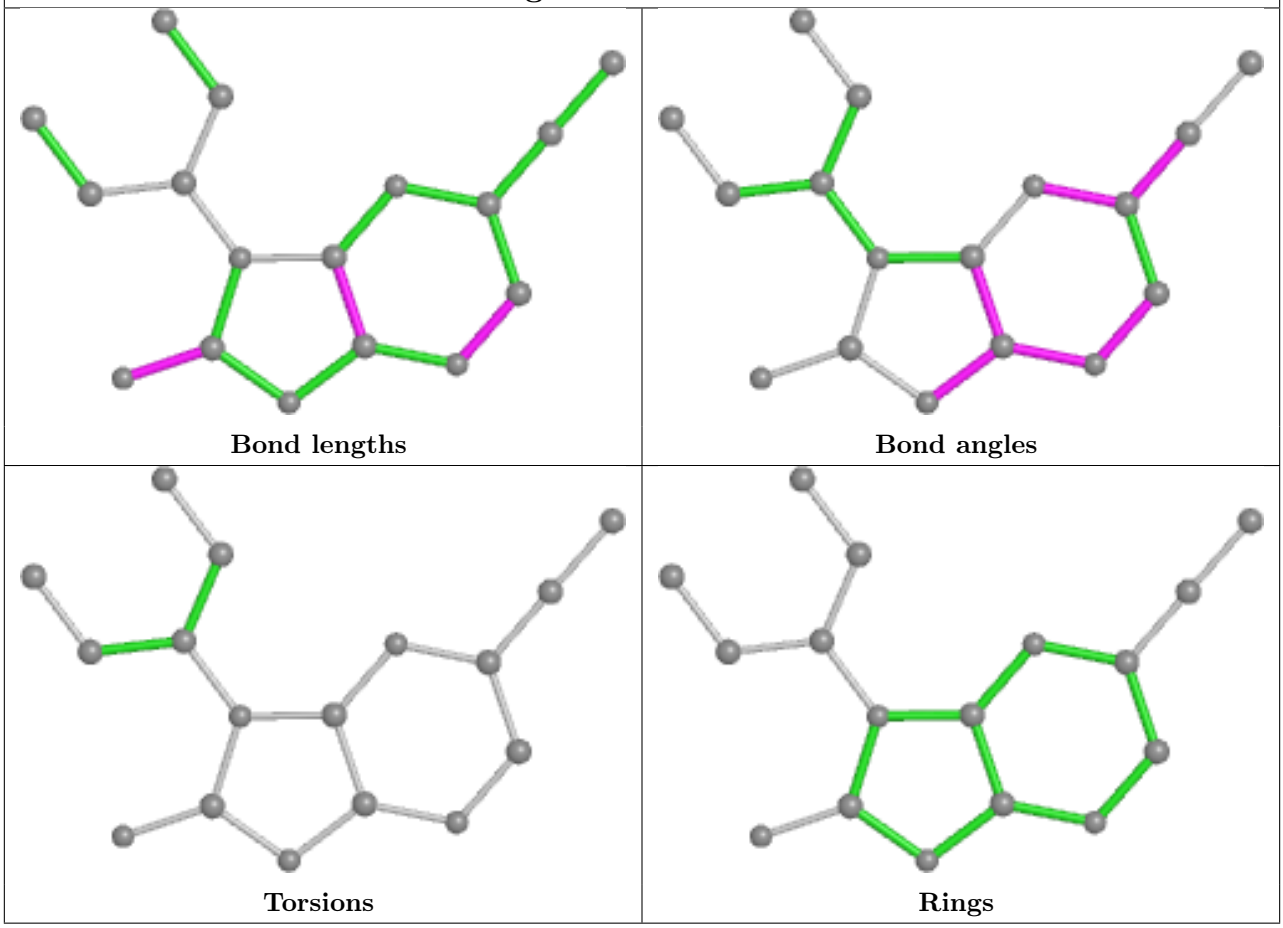
There are no chirality outliers.

There are no torsion outliers.

There are no ring outliers.

The following is a two-dimensional graphical depiction of Mogul quality analysis of bond lengths, bond angles, torsion angles, and ring geometry for all instances of the Ligand of Interest. In addition, ligands with molecular weight > 250 and outliers as shown on the validation Tables will also be included. For torsion angles, if less then 5% of the Mogul distribution of torsion angles is within 10 degrees of the torsion angle in question, then that torsion angle is considered an outlier. Any bond that is central to one or more torsion angles identified as an outlier by Mogul will be highlighted in the graph. For rings, the root-mean-square deviation (RMSD) between the ring in question and similar rings identified by Mogul is calculated over all ring torsion angles. If the average RMSD is greater than 60 degrees and the minimal RMSD between the ring in question and any Mogul-identified rings is also greater than 60 degrees, then that ring is considered an outlier. The outliers are highlighted in purple. The color gray indicates Mogul did not find sufficient equivalents in the CSD to analyse the geometry.

Ligand W97 A 202



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 (i)

The completeness of assignment taking into account all chemical shift lists is 79% for the well-defined parts and 69% for the entire structure.

7.1 Chemical shift list 1

File name: working_cs.cif

Chemical shift list name: *assigned_chem_shift_list_0*

7.1.1 Bookkeeping (i)

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

Total number of shifts	1089
Number of shifts mapped to atoms	1089
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Number of shift outliers (ShiftChecker)	3

7.1.2 Chemical shift referencing (i)

The following table shows the suggested chemical shift referencing corrections.

Nucleus	# values	Correction ± precision, *ppm*	Suggested action
$^{13}C_{\alpha}$	107	-0.37 ± 0.06	None needed (< 0.5 ppm)
$^{13}C_{\beta}$	95	0.08 ± 0.04	None needed (< 0.5 ppm)
$^{13}C'$	0	—	None (insufficient data)
^{15}N	106	0.06 ± 0.18	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. 896 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1407. 0 out of 15 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	^{1}H	^{13}C	^{15}N
Backbone	348/541 (64%)	177/221 (80%)	86/214 (40%)	85/106 (80%)
Sidechain	545/799 (68%)	369/519 (71%)	172/257 (67%)	4/23 (17%)

Continued on next page...

Continued from previous page...

	Total	^{1}H	^{13}C	^{15}N
Aromatic	3/67 (4%)	3/33 (9%)	0/32 (0%)	0/2 (0%)
Overall	896/1407 (64%)	549/773 (71%)	258/503 (51%)	89/131 (68%)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 53%, i.e. 1089 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 2060. 0 out of 21 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	^{1}H	^{13}C	^{15}N
Backbone	434/767 (57%)	221/314 (70%)	107/304 (35%)	106/149 (71%)
Sidechain	652/1158 (56%)	435/749 (58%)	213/363 (59%)	4/46 (9%)
Aromatic	3/135 (2%)	3/67 (4%)	0/54 (0%)	0/14 (0%)
Overall	1089/2060 (53%)	659/1130 (58%)	320/721 (44%)	110/209 (53%)

7.1.4 Statistically unusual chemical shifts (i)

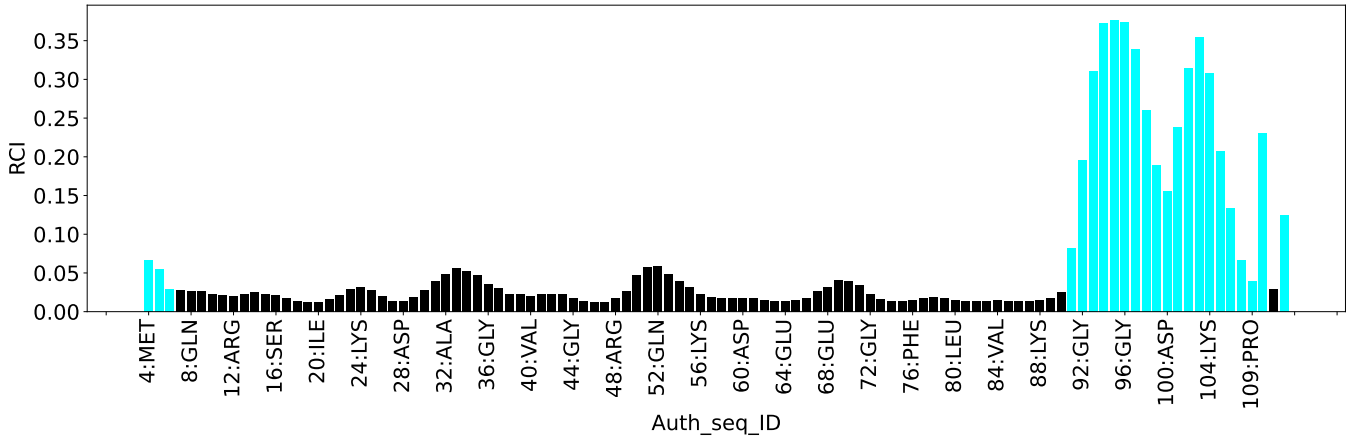
The following table lists the statistically unusual chemical shifts. These are statistical measures, and large deviations from the mean do not necessarily imply incorrect assignments. Molecules containing paramagnetic centres or hemes are expected to give rise to anomalous chemical shifts.

List Id	Chain	Res	Type	Atom	Shift, *ppm*	Expected range, *ppm*	Z-score
1	A	67	ASP	CG	2.68	149.18 – 208.82	-29.6
1	A	24	LYS	HD2	0.03	0.58 – 2.64	-7.7
1	A	31	ASP	HB3	1.29	1.32 – 4.00	-5.1

7.1.5 Random Coil Index (RCI) plots (i)

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

Random coil index (RCI) for chain A:



7.2 Chemical shift list 2

File name: working_cs.cif

Chemical shift list name: *assigned_chem_shift_list_1*

7.2.1 Bookkeeping (i)

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

Total number of shifts	383
Number of shifts mapped to atoms	383
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Number of shift outliers (ShiftChecker)	0

7.2.2 Chemical shift referencing (i)

The following table shows the suggested chemical shift referencing corrections.

Nucleus	# values	Correction ± precision, *ppm*	Suggested action
$^{13}C_{\alpha}$	35	-0.28 ± 0.12	None needed (< 0.5 ppm)
$^{13}C_{\beta}$	34	0.06 ± 0.18	None needed (< 0.5 ppm)
$^{13}C'$	0	—	None (insufficient data)
^{15}N	33	-0.93 ± 0.75	None needed (imprecise)

7.2.3 Completeness of resonance assignments (i)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the well-defined regions of the structure. The overall completeness is 16%, i.e. 224 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 1407. 0 out of 15 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	^{1}H	^{13}C	^{15}N
Backbone	82/541 (15%)	41/221 (19%)	21/214 (10%)	20/106 (19%)
Sidechain	142/799 (18%)	95/519 (18%)	47/257 (18%)	0/23 (0%)
Aromatic	0/67 (0%)	0/33 (0%)	0/32 (0%)	0/2 (0%)
Overall	224/1407 (16%)	136/773 (18%)	68/503 (14%)	20/131 (15%)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 19%, i.e. 383 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 2060. 0 out of 21 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	^{1}H	^{13}C	^{15}N
Backbone	136/767 (18%)	68/314 (22%)	35/304 (12%)	33/149 (22%)
Sidechain	247/1158 (21%)	160/749 (21%)	85/363 (23%)	2/46 (4%)
Aromatic	0/135 (0%)	0/67 (0%)	0/54 (0%)	0/14 (0%)
Overall	383/2060 (19%)	228/1130 (20%)	120/721 (17%)	35/209 (17%)

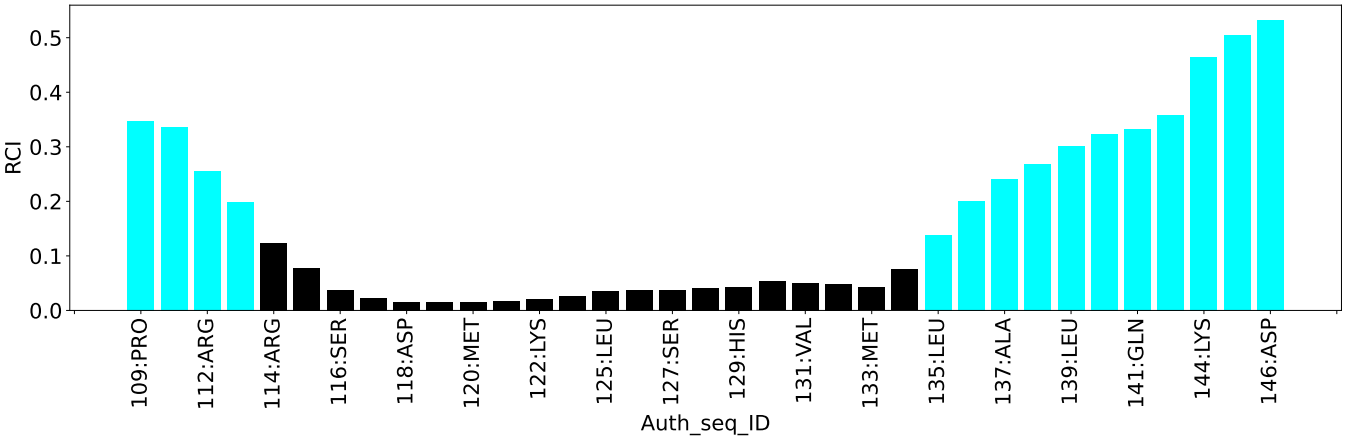
7.2.4 Statistically unusual chemical shifts (i)

There are no statistically unusual chemical shifts.

7.2.5 Random Coil Index (RCI) plots (i)

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

Random coil index (RCI) for chain A:


RCI
0.0
0.1
0.2
0.3
0.4
0.5
109:PRO
112:ARG
114:ARG
116:SER
118:ASP
120:MET
122:LYS
125:LEU
127:SER
129:HIS
131:VAL
133:MET
135:LEU
137:ALA
139:LEU
141:GLN
144:LYS
146:ASP
Auth_seq_ID

8 NMR restraints analysis (i)

8.1 Conformationally restricting restraints (i)

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

Description	Value
Total distance restraints	2243
Intra-residue (|i-j|=0)	703
Sequential (|i-j|=1)	660
Medium range (|i-j|>1 and |i-j|<5)	469
Long range (|i-j|≥5)	410
Inter-chain	0
Hydrogen bond restraints	1
Disulfide bond restraints	0
Total dihedral-angle restraints	112
Number of unmapped restraints	0
Number of restraints per residue	15.5
Number of long range restraints per residue[1]	2.7

[1]Long range hydrogen bonds and disulfide bonds are counted as long range restraints while calculating the number of long range restraints per residue

8.2 Residual restraint violations (i)

This section provides the overview of the restraint violations analysis. The violations are binned as small, medium and large violations based on its absolute value. Average number of violations per model is calculated by dividing the total number of violations in each bin by the size of the ensemble.

8.2.1 Average number of distance violations per model (i)

Distance violations less than 0.1 Å are not included in the calculation.

Bins (Å)	Average number of violations per model	Max (Å)
0.1-0.2 (Small)	36.8	0.2
0.2-0.5 (Medium)	13.6	0.47
>0.5 (Large)	0.2	0.66

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

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

Bins (°)	Average number of violations per model	Max (°)
1.0-10.0 (Small)	10.6	10.0
10.0-20.0 (Medium)	1.0	16.2
>20.0 (Large)	1.0	23.8

9 Distance violation analysis (i)

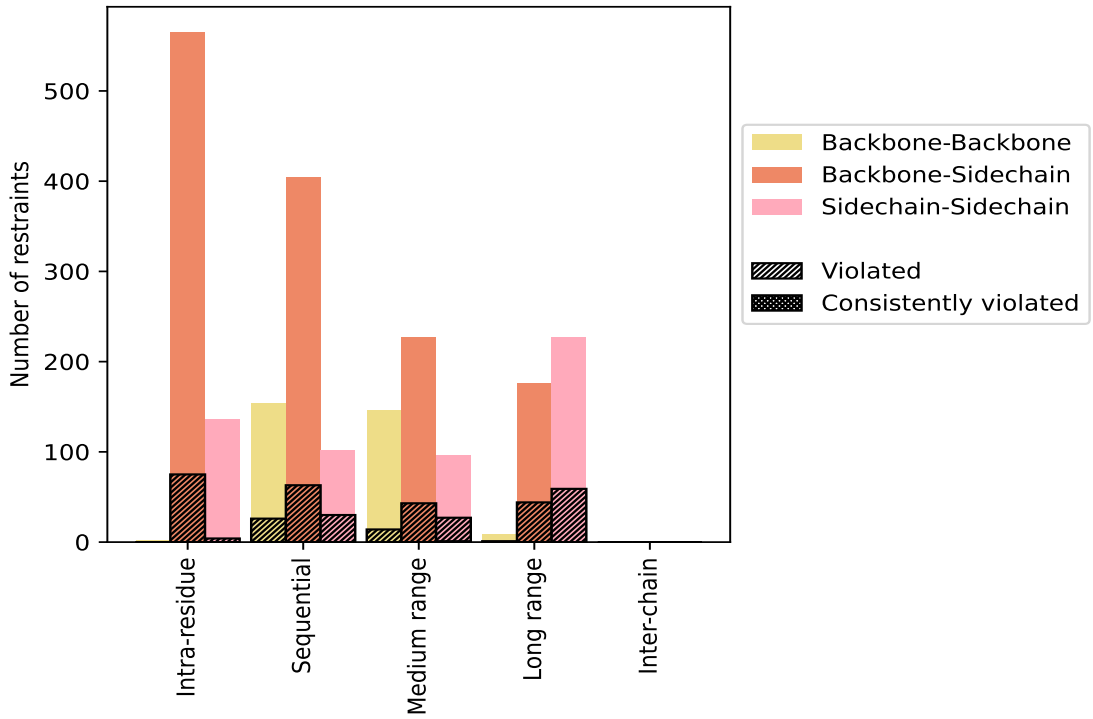
9.1 Summary of distance violations (i)

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

Restraints type	Count	%[1]	Violated[3]			Consistently Violated[4]		
			Count	%[2]	%[1]	Count	%[2]	%[1]
Intra-residue (|i-j|=0)	703	31.3	79	11.2	3.5	0	0.0	0.0
Backbone-Backbone	2	0.1	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	565	25.2	75	13.3	3.3	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	136	6.1	4	2.9	0.2	0	0.0	0.0
Sequential (|i-j|=1)	660	29.4	119	18.0	5.3	0	0.0	0.0
Backbone-Backbone	154	6.9	26	16.9	1.2	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	404	18.0	63	15.6	2.8	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	102	4.5	30	29.4	1.3	0	0.0	0.0
Medium range (|i-j|>1 & |i-j|<5)	469	20.9	84	17.9	3.7	1	0.2	0.0
Backbone-Backbone	146	6.5	14	9.6	0.6	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	227	10.1	43	18.9	1.9	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	96	4.3	27	28.1	1.2	1	1.0	0.0
Long range (|i-j|≥5)	410	18.3	104	25.4	4.6	0	0.0	0.0
Backbone-Backbone	7	0.3	1	14.3	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	176	7.8	44	25.0	2.0	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	227	10.1	59	26.0	2.6	0	0.0	0.0
Inter-chain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Backbone	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Hydrogen bond	1	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Disulfide bond	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Total	2243	100.0	386	17.2	17.2	1	0.0	0.0
Backbone-Backbone	310	13.8	41	13.2	1.8	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	1372	61.2	225	16.4	10.0	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	561	25.0	120	21.4	5.3	1	0.2	0.0

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

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



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

9.2 Distance violation statistics for each model (i)

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

Model ID	Number of violations						Mean (Å)	Max (Å)	SD[6] (Å)	Median (Å)
	IR[1]	SQ[2]	MR[3]	LR[4]	IC[5]	Total				
1	8	12	8	14	0	42	0.17	0.3	0.05	0.16
2	6	11	11	17	0	45	0.18	0.34	0.06	0.16
3	9	8	9	11	0	37	0.19	0.47	0.08	0.17
4	12	16	14	12	0	54	0.17	0.38	0.06	0.16
5	11	13	7	20	0	51	0.18	0.4	0.07	0.15
6	8	13	14	12	0	47	0.18	0.47	0.08	0.14
7	12	11	12	14	0	49	0.18	0.31	0.05	0.18
8	9	11	13	9	0	42	0.19	0.58	0.09	0.16
9	14	16	17	18	0	65	0.17	0.36	0.05	0.15
10	8	12	14	15	0	49	0.18	0.52	0.09	0.15
11	11	12	11	13	0	47	0.2	0.47	0.07	0.19

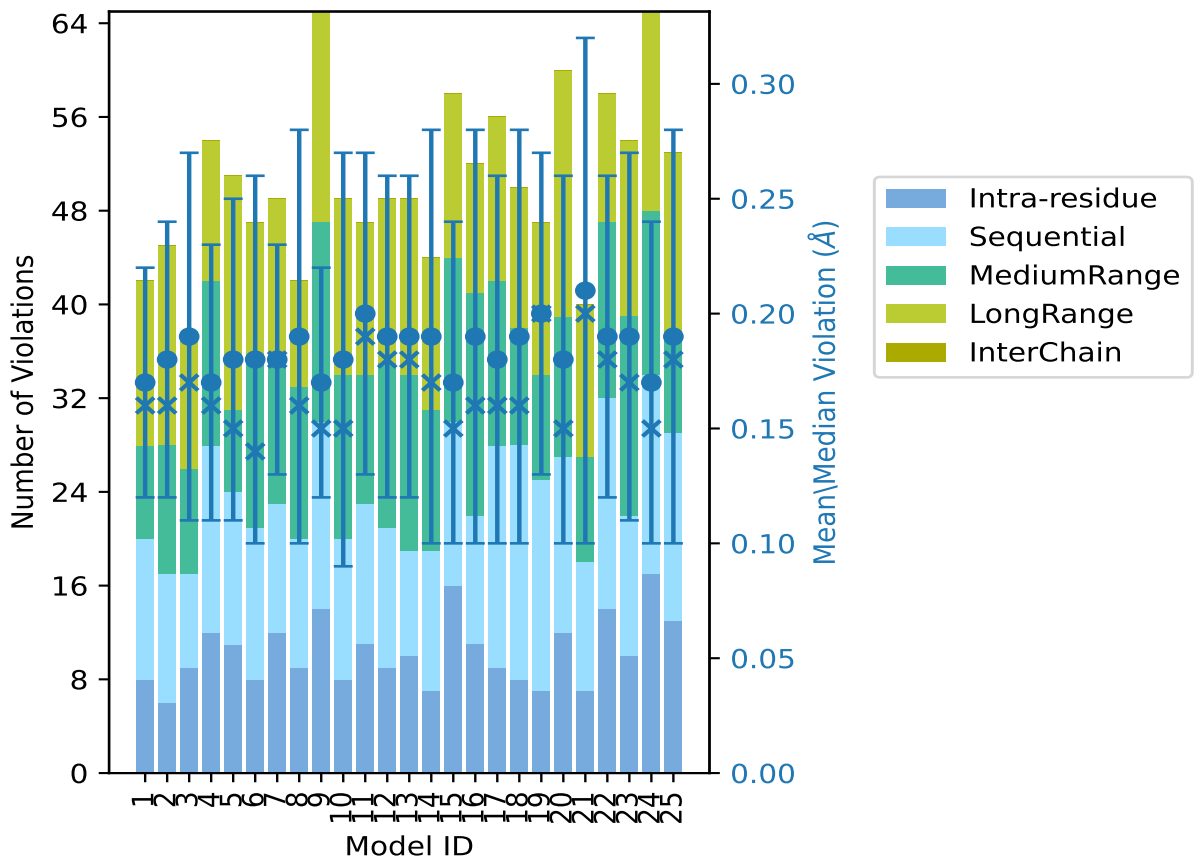
Continued on next page...

Continued from previous page...

Model ID	Number of violations						Mean (Å)	Max (Å)	SD[6] (Å)	Median (Å)
	IR[1]	SQ[2]	MR[3]	LR[4]	IC[5]	Total				
12	9	12	14	14	0	49	0.19	0.37	0.07	0.18
13	10	9	15	15	0	49	0.19	0.47	0.07	0.18
14	7	12	12	13	0	44	0.19	0.63	0.09	0.17
15	16	14	14	14	0	58	0.17	0.45	0.07	0.15
16	11	11	19	11	0	52	0.19	0.43	0.09	0.16
17	9	19	14	14	0	56	0.18	0.47	0.08	0.16
18	8	20	10	12	0	50	0.19	0.46	0.09	0.16
19	7	18	9	13	0	47	0.2	0.42	0.07	0.2
20	12	15	12	21	0	60	0.18	0.45	0.08	0.15
21	7	11	9	13	0	40	0.21	0.66	0.11	0.2
22	14	18	15	11	0	58	0.19	0.4	0.07	0.18
23	10	12	17	15	0	54	0.19	0.45	0.08	0.17
24	17	17	14	17	0	65	0.17	0.46	0.07	0.15
25	13	16	8	16	0	53	0.19	0.66	0.09	0.18

[1]Intra-residue restraints, [2]Sequential restraints, [3]Medium range restraints, [4]Long range restraints, [5]Inter-chain restraints, [6]Standard deviation

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



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

9.3 Distance violation statistics for the ensemble (i)

Violation analysis may find that some restraints are violated in few models and some are violated in most of models. The following table provides this information as number of violated restraints for a given fraction of the ensemble. In total, 1856(IR:624, SQ:541, MR:385, LR:306, IC:0) restraints are not violated in the ensemble.

Number of violated restraints						Fraction of the ensemble	
IR[1]	SQ[2]	MR[3]	LR[4]	IC[5]	Total	Count[6]	%
32	44	36	41	0	153	1	4.0
17	31	16	22	0	86	2	8.0
7	16	5	13	0	41	3	12.0
7	10	7	6	0	30	4	16.0
3	6	4	6	0	19	5	20.0
2	2	1	4	0	9	6	24.0

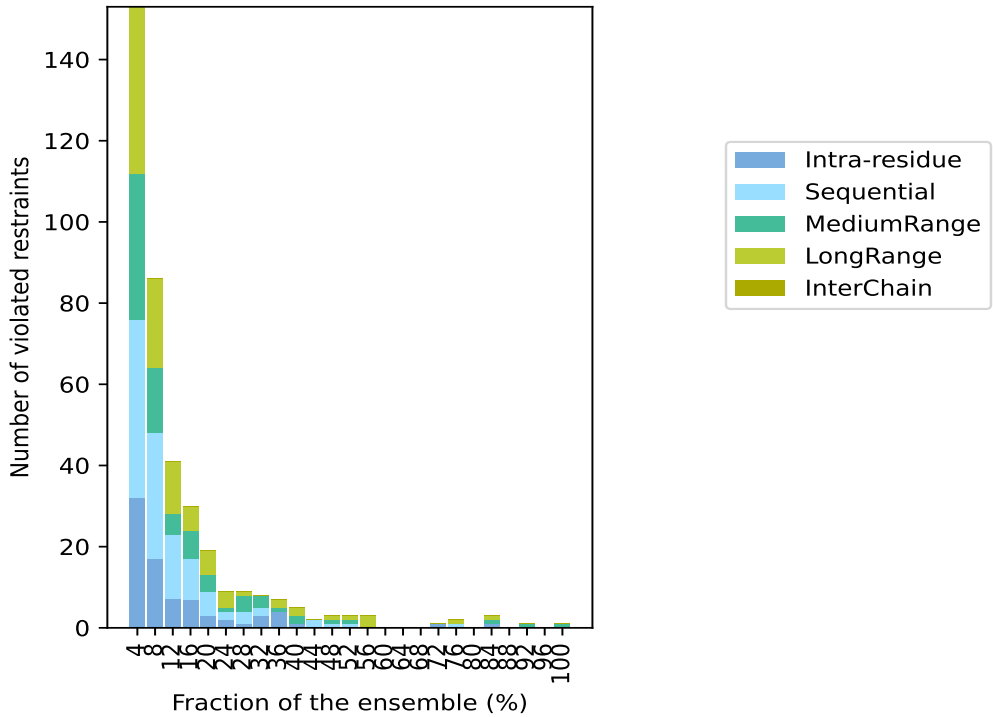
Continued on next page...

Continued from previous page...

Number of violated restraints						Fraction of the ensemble	
IR[1]	SQ[2]	MR[3]	LR[4]	IC[5]	Total	Count[6]	%
1	3	4	1	0	9	7	28.0
3	2	3	0	0	8	8	32.0
4	0	1	2	0	7	9	36.0
1	0	2	2	0	5	10	40.0
0	2	0	0	0	2	11	44.0
0	1	1	1	0	3	12	48.0
0	1	1	1	0	3	13	52.0
0	0	0	3	0	3	14	56.0
0	0	0	0	0	0	15	60.0
0	0	0	0	0	0	16	64.0
0	0	0	0	0	0	17	68.0
1	0	0	0	0	1	18	72.0
0	1	0	1	0	2	19	76.0
0	0	0	0	0	0	20	80.0
1	0	1	1	0	3	21	84.0
0	0	0	0	0	0	22	88.0
0	0	1	0	0	1	23	92.0
0	0	0	0	0	0	24	96.0
0	0	1	0	0	1	25	100.0

[1]Intra-residue restraints, [2]Sequential restraints, [3]Medium range restraints, [4]Long range restraints, [5]Inter-chain restraints, [6] Number of models with violations

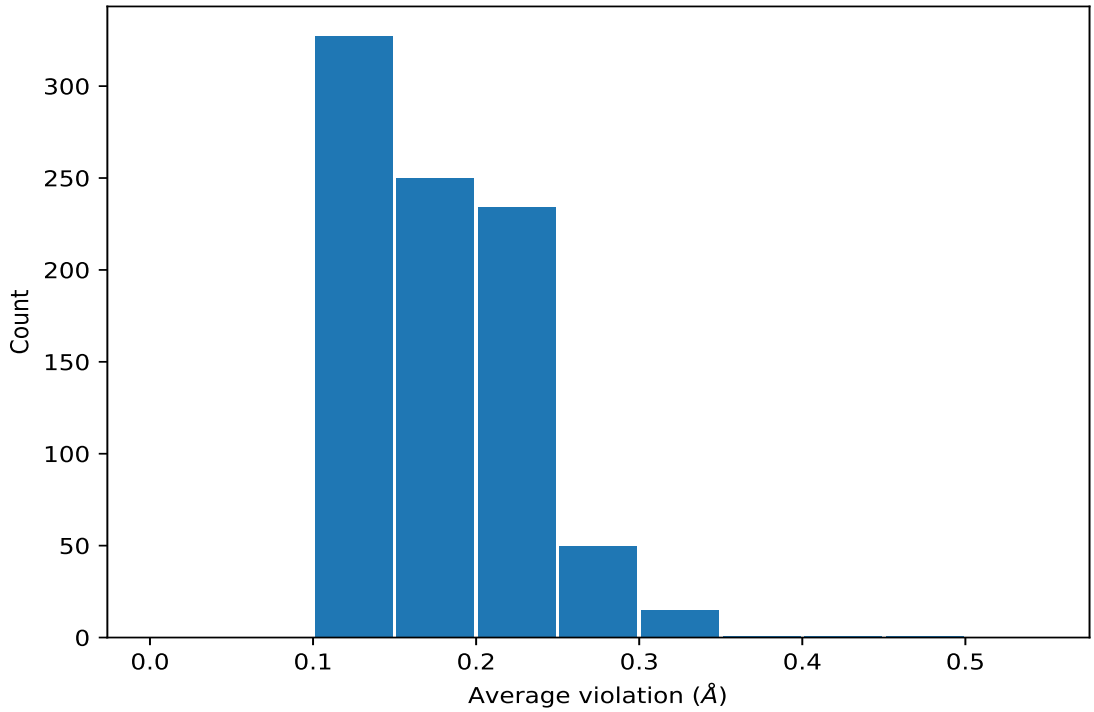
9.3.1 Bar graph : Distance violation statistics for the ensemble (i)



9.4 Most violated distance restraints in the ensemble (i)

9.4.1 Histogram : Distribution of mean distance violations (i)

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



9.4.2 Table: Most violated distance restraints (i)

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

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(3,880)	1:A:45:THR:HG21	1:A:49:MET:HB3	25	0.17	0.03	0.17
(3,880)	1:A:45:THR:HG22	1:A:49:MET:HB3	25	0.17	0.03	0.17
(3,880)	1:A:45:THR:HG23	1:A:49:MET:HB3	25	0.17	0.03	0.17
(3,1498)	1:A:64:GLU:HA	1:A:66:VAL:HG21	23	0.17	0.03	0.17
(3,1498)	1:A:64:GLU:HA	1:A:66:VAL:HG22	23	0.17	0.03	0.17
(3,1498)	1:A:64:GLU:HA	1:A:66:VAL:HG23	23	0.17	0.03	0.17
(3,811)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD21	21	0.35	0.05	0.36
(3,811)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD22	21	0.35	0.05	0.36
(3,811)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD23	21	0.35	0.05	0.36
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD11	21	0.23	0.05	0.22
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD12	21	0.23	0.05	0.22
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD13	21	0.23	0.05	0.22
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD21	21	0.23	0.05	0.22
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD22	21	0.23	0.05	0.22
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD23	21	0.23	0.05	0.22
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD11	21	0.23	0.05	0.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD12	21	0.23	0.05	0.22
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD13	21	0.23	0.05	0.22
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD21	21	0.23	0.05	0.22
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD22	21	0.23	0.05	0.22
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD23	21	0.23	0.05	0.22
(3,167)	1:A:64:GLU:H	1:A:67:ASP:H	21	0.16	0.03	0.17
(3,524)	1:A:71:SER:H	1:A:72:GLY:H	19	0.38	0.14	0.46
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:124:LEU:HA	19	0.18	0.06	0.16
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG12	1:A:124:LEU:HA	19	0.18	0.06	0.16
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:124:LEU:HA	19	0.18	0.06	0.16
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:124:LEU:HA	19	0.18	0.06	0.16
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:124:LEU:HA	19	0.18	0.06	0.16
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:124:LEU:HA	19	0.18	0.06	0.16
(3,1331)	1:A:47:MET:HA	1:A:47:MET:HG2	18	0.2	0.02	0.2
(3,1066)	1:A:29:MET:HE1	1:A:83:MET:HE1	14	0.24	0.09	0.24
(3,1066)	1:A:29:MET:HE1	1:A:83:MET:HE2	14	0.24	0.09	0.24
(3,1066)	1:A:29:MET:HE1	1:A:83:MET:HE3	14	0.24	0.09	0.24
(3,1066)	1:A:29:MET:HE2	1:A:83:MET:HE1	14	0.24	0.09	0.24
(3,1066)	1:A:29:MET:HE2	1:A:83:MET:HE2	14	0.24	0.09	0.24
(3,1066)	1:A:29:MET:HE2	1:A:83:MET:HE3	14	0.24	0.09	0.24
(3,1066)	1:A:29:MET:HE3	1:A:83:MET:HE1	14	0.24	0.09	0.24
(3,1066)	1:A:29:MET:HE3	1:A:83:MET:HE2	14	0.24	0.09	0.24
(3,1066)	1:A:29:MET:HE3	1:A:83:MET:HE3	14	0.24	0.09	0.24
(3,825)	1:A:39:SER:H	1:A:73:THR:HG21	14	0.2	0.09	0.17
(3,825)	1:A:39:SER:H	1:A:73:THR:HG22	14	0.2	0.09	0.17
(3,825)	1:A:39:SER:H	1:A:73:THR:HG23	14	0.2	0.09	0.17
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB2	1:A:83:MET:HE1	14	0.16	0.04	0.16
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB2	1:A:83:MET:HE2	14	0.16	0.04	0.16
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB2	1:A:83:MET:HE3	14	0.16	0.04	0.16
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB3	1:A:83:MET:HE1	14	0.16	0.04	0.16
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB3	1:A:83:MET:HE2	14	0.16	0.04	0.16
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB3	1:A:83:MET:HE3	14	0.16	0.04	0.16
(3,1745)	1:A:30:PHE:HB2	1:A:46:VAL:H	13	0.21	0.06	0.23
(3,1745)	1:A:30:PHE:HB3	1:A:46:VAL:H	13	0.21	0.06	0.23
(3,1378)	1:A:109:PRO:HB3	1:A:111:ARG:H	13	0.17	0.05	0.18
(3,258)	1:A:82:MET:H	1:A:83:MET:HG2	13	0.15	0.03	0.15
(3,258)	1:A:82:MET:H	1:A:83:MET:HG3	13	0.15	0.03	0.15
(3,1732)	1:A:29:MET:HG2	1:A:83:MET:HE1	12	0.2	0.06	0.2
(3,1732)	1:A:29:MET:HG2	1:A:83:MET:HE2	12	0.2	0.06	0.2
(3,1732)	1:A:29:MET:HG2	1:A:83:MET:HE3	12	0.2	0.06	0.2
(3,1732)	1:A:29:MET:HG3	1:A:83:MET:HE1	12	0.2	0.06	0.2
(3,1732)	1:A:29:MET:HG3	1:A:83:MET:HE2	12	0.2	0.06	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(3,1732)	1:A:29:MET:HG3	1:A:83:MET:HE3	12	0.2	0.06	0.2
(3,752)	1:A:41:LYS:HG3	1:A:42:GLU:H	12	0.2	0.05	0.2
(3,243)	1:A:120:MET:HE1	1:A:122:LYS:H	12	0.15	0.03	0.15
(3,243)	1:A:120:MET:HE2	1:A:122:LYS:H	12	0.15	0.03	0.15
(3,243)	1:A:120:MET:HE3	1:A:122:LYS:H	12	0.15	0.03	0.15
(3,467)	1:A:19:MET:HG3	1:A:20:ILE:H	11	0.17	0.04	0.16
(3,1065)	1:A:82:MET:HG2	1:A:83:MET:HE1	11	0.17	0.03	0.17
(3,1065)	1:A:82:MET:HG2	1:A:83:MET:HE2	11	0.17	0.03	0.17
(3,1065)	1:A:82:MET:HG2	1:A:83:MET:HE3	11	0.17	0.03	0.17
(3,1065)	1:A:82:MET:HG3	1:A:83:MET:HE1	11	0.17	0.03	0.17
(3,1065)	1:A:82:MET:HG3	1:A:83:MET:HE2	11	0.17	0.03	0.17
(3,1065)	1:A:82:MET:HG3	1:A:83:MET:HE3	11	0.17	0.03	0.17
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB1	1:A:82:MET:HE1	10	0.16	0.03	0.18
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB1	1:A:82:MET:HE2	10	0.16	0.03	0.18
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB1	1:A:82:MET:HE3	10	0.16	0.03	0.18
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB2	1:A:82:MET:HE1	10	0.16	0.03	0.18
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB2	1:A:82:MET:HE2	10	0.16	0.03	0.18
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB2	1:A:82:MET:HE3	10	0.16	0.03	0.18
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB3	1:A:82:MET:HE1	10	0.16	0.03	0.18
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB3	1:A:82:MET:HE2	10	0.16	0.03	0.18
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB3	1:A:82:MET:HE3	10	0.16	0.03	0.18
(3,115)	1:A:39:SER:H	1:A:42:GLU:HB3	10	0.16	0.05	0.14
(3,2068)	1:A:102:ARG:HD2	1:A:107:ARG:HB2	10	0.15	0.03	0.15
(3,2068)	1:A:102:ARG:HD2	1:A:107:ARG:HB3	10	0.15	0.03	0.15
(3,2068)	1:A:102:ARG:HD3	1:A:107:ARG:HB2	10	0.15	0.03	0.15
(3,2068)	1:A:102:ARG:HD3	1:A:107:ARG:HB3	10	0.15	0.03	0.15
(3,1524)	1:A:140:LYS:HA	1:A:140:LYS:HD2	10	0.15	0.03	0.16
(3,1524)	1:A:140:LYS:HA	1:A:140:LYS:HD3	10	0.15	0.03	0.16
(3,328)	1:A:81:VAL:H	1:A:83:MET:HG2	10	0.14	0.02	0.14
(3,328)	1:A:81:VAL:H	1:A:83:MET:HG3	10	0.14	0.02	0.14
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG11	1:A:88:LYS:HG2	9	0.27	0.08	0.28
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG11	1:A:88:LYS:HG3	9	0.27	0.08	0.28
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG12	1:A:88:LYS:HG2	9	0.27	0.08	0.28
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG12	1:A:88:LYS:HG3	9	0.27	0.08	0.28
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG13	1:A:88:LYS:HG2	9	0.27	0.08	0.28
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG13	1:A:88:LYS:HG3	9	0.27	0.08	0.28
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG21	1:A:88:LYS:HG2	9	0.27	0.08	0.28
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG21	1:A:88:LYS:HG3	9	0.27	0.08	0.28
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG22	1:A:88:LYS:HG2	9	0.27	0.08	0.28
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG22	1:A:88:LYS:HG3	9	0.27	0.08	0.28
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG23	1:A:88:LYS:HG2	9	0.27	0.08	0.28
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG23	1:A:88:LYS:HG3	9	0.27	0.08	0.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(3,691)	1:A:143:LYS:HA	1:A:143:LYS:HE2	9	0.22	0.08	0.18
(3,691)	1:A:143:LYS:HA	1:A:143:LYS:HE3	9	0.22	0.08	0.18
(3,868)	1:A:40:VAL:HG21	1:A:56:LYS:HA	9	0.19	0.04	0.19
(3,868)	1:A:40:VAL:HG22	1:A:56:LYS:HA	9	0.19	0.04	0.19
(3,868)	1:A:40:VAL:HG23	1:A:56:LYS:HA	9	0.19	0.04	0.19
(3,1054)	1:A:83:MET:HA	1:A:83:MET:HE1	9	0.17	0.03	0.16
(3,1054)	1:A:83:MET:HA	1:A:83:MET:HE2	9	0.17	0.03	0.16
(3,1054)	1:A:83:MET:HA	1:A:83:MET:HE3	9	0.17	0.03	0.16
(3,32)	1:A:52:GLN:H	1:A:52:GLN:HE22	9	0.17	0.06	0.15
(3,1245)	1:A:68:GLU:HA	1:A:68:GLU:HG3	9	0.16	0.03	0.15
(3,1855)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD11	9	0.13	0.03	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD12	9	0.13	0.03	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD13	9	0.13	0.03	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD21	9	0.13	0.03	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD22	9	0.13	0.03	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD23	9	0.13	0.03	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD11	9	0.13	0.03	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD12	9	0.13	0.03	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD13	9	0.13	0.03	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD21	9	0.13	0.03	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD22	9	0.13	0.03	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD23	9	0.13	0.03	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD11	9	0.13	0.03	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD12	9	0.13	0.03	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD13	9	0.13	0.03	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD21	9	0.13	0.03	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD22	9	0.13	0.03	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD23	9	0.13	0.03	0.12
(3,1977)	1:A:84:VAL:HB	1:A:88:LYS:HB2	8	0.3	0.04	0.29
(3,1977)	1:A:84:VAL:HB	1:A:88:LYS:HB3	8	0.3	0.04	0.29
(3,1153)	1:A:114:ARG:HA	1:A:114:ARG:HD3	8	0.3	0.11	0.35
(3,773)	1:A:83:MET:H	1:A:84:VAL:HG11	8	0.26	0.01	0.26
(3,773)	1:A:83:MET:H	1:A:84:VAL:HG12	8	0.26	0.01	0.26
(3,773)	1:A:83:MET:H	1:A:84:VAL:HG13	8	0.26	0.01	0.26
(3,365)	1:A:84:VAL:HB	1:A:88:LYS:H	8	0.22	0.04	0.21
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG11	1:A:85:ARG:HD2	8	0.2	0.09	0.2
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG11	1:A:85:ARG:HD3	8	0.2	0.09	0.2
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG12	1:A:85:ARG:HD2	8	0.2	0.09	0.2
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG12	1:A:85:ARG:HD3	8	0.2	0.09	0.2
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG13	1:A:85:ARG:HD2	8	0.2	0.09	0.2
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG13	1:A:85:ARG:HD3	8	0.2	0.09	0.2
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG21	1:A:85:ARG:HD2	8	0.2	0.09	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG21	1:A:85:ARG:HD3	8	0.2	0.09	0.2
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG22	1:A:85:ARG:HD2	8	0.2	0.09	0.2
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG22	1:A:85:ARG:HD3	8	0.2	0.09	0.2
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG23	1:A:85:ARG:HD2	8	0.2	0.09	0.2
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG23	1:A:85:ARG:HD3	8	0.2	0.09	0.2
(3,772)	1:A:84:VAL:H	1:A:84:VAL:HG11	8	0.17	0.0	0.17
(3,772)	1:A:84:VAL:H	1:A:84:VAL:HG12	8	0.17	0.0	0.17
(3,772)	1:A:84:VAL:H	1:A:84:VAL:HG13	8	0.17	0.0	0.17
(3,888)	1:A:142:VAL:HG11	1:A:143:LYS:HE2	8	0.16	0.03	0.15
(3,888)	1:A:142:VAL:HG11	1:A:143:LYS:HE3	8	0.16	0.03	0.15
(3,888)	1:A:142:VAL:HG12	1:A:143:LYS:HE2	8	0.16	0.03	0.15
(3,888)	1:A:142:VAL:HG12	1:A:143:LYS:HE3	8	0.16	0.03	0.15
(3,888)	1:A:142:VAL:HG13	1:A:143:LYS:HE2	8	0.16	0.03	0.15
(3,888)	1:A:142:VAL:HG13	1:A:143:LYS:HE3	8	0.16	0.03	0.15
(3,1703)	1:A:24:LYS:HA	1:A:24:LYS:HD2	8	0.16	0.05	0.13
(3,1703)	1:A:24:LYS:HA	1:A:24:LYS:HD3	8	0.16	0.05	0.13
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG11	1:A:88:LYS:HE2	7	0.19	0.07	0.18
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG11	1:A:88:LYS:HE3	7	0.19	0.07	0.18
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG12	1:A:88:LYS:HE2	7	0.19	0.07	0.18
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG12	1:A:88:LYS:HE3	7	0.19	0.07	0.18
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG13	1:A:88:LYS:HE2	7	0.19	0.07	0.18
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG13	1:A:88:LYS:HE3	7	0.19	0.07	0.18
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG21	1:A:88:LYS:HE2	7	0.19	0.07	0.18
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG21	1:A:88:LYS:HE3	7	0.19	0.07	0.18
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG22	1:A:88:LYS:HE2	7	0.19	0.07	0.18
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG22	1:A:88:LYS:HE3	7	0.19	0.07	0.18
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG23	1:A:88:LYS:HE2	7	0.19	0.07	0.18
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG23	1:A:88:LYS:HE3	7	0.19	0.07	0.18
(3,519)	1:A:138:ASN:H	1:A:139:LEU:H	7	0.18	0.08	0.16
(3,2058)	1:A:100:ASP:HB2	1:A:101:LEU:H	7	0.16	0.02	0.17
(3,2058)	1:A:100:ASP:HB3	1:A:101:LEU:H	7	0.16	0.02	0.17
(3,1608)	1:A:14:TYR:H	1:A:80:LEU:HD11	7	0.16	0.05	0.14
(3,1608)	1:A:14:TYR:H	1:A:80:LEU:HD12	7	0.16	0.05	0.14
(3,1608)	1:A:14:TYR:H	1:A:80:LEU:HD13	7	0.16	0.05	0.14
(3,1608)	1:A:14:TYR:H	1:A:80:LEU:HD21	7	0.16	0.05	0.14
(3,1608)	1:A:14:TYR:H	1:A:80:LEU:HD22	7	0.16	0.05	0.14
(3,1608)	1:A:14:TYR:H	1:A:80:LEU:HD23	7	0.16	0.05	0.14
(3,873)	1:A:53:THR:HG21	1:A:54:PRO:HD2	7	0.15	0.03	0.14
(3,873)	1:A:53:THR:HG22	1:A:54:PRO:HD2	7	0.15	0.03	0.14
(3,873)	1:A:53:THR:HG23	1:A:54:PRO:HD2	7	0.15	0.03	0.14
(3,1206)	1:A:59:LEU:HB2	1:A:63:ILE:HD11	7	0.15	0.02	0.14
(3,1206)	1:A:59:LEU:HB2	1:A:63:ILE:HD12	7	0.15	0.02	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(3,1206)	1:A:59:LEU:HB2	1:A:63:ILE:HD13	7	0.15	0.02	0.14
(3,1318)	1:A:7:GLN:HG3	1:A:10:GLU:HB2	7	0.14	0.03	0.13
(3,1318)	1:A:7:GLN:HG3	1:A:10:GLU:HB3	7	0.14	0.03	0.13
(3,82)	1:A:24:LYS:H	1:A:24:LYS:HB3	7	0.13	0.01	0.13
(3,1004)	1:A:117:ALA:HA	1:A:120:MET:HE1	7	0.13	0.02	0.13
(3,1004)	1:A:117:ALA:HA	1:A:120:MET:HE2	7	0.13	0.02	0.13
(3,1004)	1:A:117:ALA:HA	1:A:120:MET:HE3	7	0.13	0.02	0.13
(3,1396)	1:A:83:MET:HB3	1:A:83:MET:HE1	6	0.23	0.04	0.24
(3,1396)	1:A:83:MET:HB3	1:A:83:MET:HE2	6	0.23	0.04	0.24
(3,1396)	1:A:83:MET:HB3	1:A:83:MET:HE3	6	0.23	0.04	0.24
(3,10)	1:A:52:GLN:HB2	1:A:53:THR:H	6	0.2	0.08	0.19
(3,1910)	1:A:61:ALA:HA	1:A:64:GLU:HG2	6	0.19	0.06	0.18
(3,1910)	1:A:61:ALA:HA	1:A:64:GLU:HG3	6	0.19	0.06	0.18
(3,1583)	1:A:10:GLU:H	1:A:81:VAL:HG11	6	0.19	0.04	0.2
(3,1583)	1:A:10:GLU:H	1:A:81:VAL:HG12	6	0.19	0.04	0.2
(3,1583)	1:A:10:GLU:H	1:A:81:VAL:HG13	6	0.19	0.04	0.2
(3,1583)	1:A:10:GLU:H	1:A:81:VAL:HG21	6	0.19	0.04	0.2
(3,1583)	1:A:10:GLU:H	1:A:81:VAL:HG22	6	0.19	0.04	0.2
(3,1583)	1:A:10:GLU:H	1:A:81:VAL:HG23	6	0.19	0.04	0.2
(3,1125)	1:A:30:PHE:H	1:A:38:ILE:HD11	6	0.18	0.03	0.2
(3,1125)	1:A:30:PHE:H	1:A:38:ILE:HD12	6	0.18	0.03	0.2
(3,1125)	1:A:30:PHE:H	1:A:38:ILE:HD13	6	0.18	0.03	0.2
(3,1614)	1:A:14:TYR:HB2	1:A:87:MET:HE1	6	0.17	0.04	0.16
(3,1614)	1:A:14:TYR:HB2	1:A:87:MET:HE2	6	0.17	0.04	0.16
(3,1614)	1:A:14:TYR:HB2	1:A:87:MET:HE3	6	0.17	0.04	0.16
(3,1614)	1:A:14:TYR:HB3	1:A:87:MET:HE1	6	0.17	0.04	0.16
(3,1614)	1:A:14:TYR:HB3	1:A:87:MET:HE2	6	0.17	0.04	0.16
(3,1614)	1:A:14:TYR:HB3	1:A:87:MET:HE3	6	0.17	0.04	0.16
(3,1246)	1:A:137:ALA:HB1	1:A:138:ASN:HB3	6	0.15	0.03	0.14
(3,1246)	1:A:137:ALA:HB2	1:A:138:ASN:HB3	6	0.15	0.03	0.14
(3,1246)	1:A:137:ALA:HB3	1:A:138:ASN:HB3	6	0.15	0.03	0.14
(3,1147)	1:A:38:ILE:H	1:A:74:ILE:HD11	6	0.15	0.04	0.14
(3,1147)	1:A:38:ILE:H	1:A:74:ILE:HD12	6	0.15	0.04	0.14
(3,1147)	1:A:38:ILE:H	1:A:74:ILE:HD13	6	0.15	0.04	0.14
(3,672)	1:A:140:LYS:HA	1:A:140:LYS:HG2	6	0.12	0.01	0.12
(3,672)	1:A:140:LYS:HA	1:A:140:LYS:HG3	6	0.12	0.01	0.12
(3,55)	1:A:113:VAL:HA	1:A:114:ARG:H	5	0.42	0.18	0.4
(3,2061)	1:A:101:LEU:HA	1:A:101:LEU:HD11	5	0.34	0.01	0.34
(3,2061)	1:A:101:LEU:HA	1:A:101:LEU:HD12	5	0.34	0.01	0.34
(3,2061)	1:A:101:LEU:HA	1:A:101:LEU:HD13	5	0.34	0.01	0.34
(3,2061)	1:A:101:LEU:HA	1:A:101:LEU:HD21	5	0.34	0.01	0.34
(3,2061)	1:A:101:LEU:HA	1:A:101:LEU:HD22	5	0.34	0.01	0.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(3,2061)	1:A:101:LEU:HA	1:A:101:LEU:HD23	5	0.34	0.01	0.34
(3,1803)	1:A:43:LEU:HD11	1:A:44:GLY:HA3	5	0.28	0.03	0.29
(3,1803)	1:A:43:LEU:HD12	1:A:44:GLY:HA3	5	0.28	0.03	0.29
(3,1803)	1:A:43:LEU:HD13	1:A:44:GLY:HA3	5	0.28	0.03	0.29
(3,1803)	1:A:43:LEU:HD21	1:A:44:GLY:HA3	5	0.28	0.03	0.29
(3,1803)	1:A:43:LEU:HD22	1:A:44:GLY:HA3	5	0.28	0.03	0.29
(3,1803)	1:A:43:LEU:HD23	1:A:44:GLY:HA3	5	0.28	0.03	0.29
(3,1987)	1:A:84:VAL:HG11	1:A:88:LYS:HB2	5	0.24	0.04	0.23
(3,1987)	1:A:84:VAL:HG11	1:A:88:LYS:HB3	5	0.24	0.04	0.23
(3,1987)	1:A:84:VAL:HG12	1:A:88:LYS:HB2	5	0.24	0.04	0.23
(3,1987)	1:A:84:VAL:HG12	1:A:88:LYS:HB3	5	0.24	0.04	0.23
(3,1987)	1:A:84:VAL:HG13	1:A:88:LYS:HB2	5	0.24	0.04	0.23
(3,1987)	1:A:84:VAL:HG13	1:A:88:LYS:HB3	5	0.24	0.04	0.23
(3,1987)	1:A:84:VAL:HG21	1:A:88:LYS:HB2	5	0.24	0.04	0.23
(3,1987)	1:A:84:VAL:HG21	1:A:88:LYS:HB3	5	0.24	0.04	0.23
(3,1987)	1:A:84:VAL:HG22	1:A:88:LYS:HB2	5	0.24	0.04	0.23
(3,1987)	1:A:84:VAL:HG22	1:A:88:LYS:HB3	5	0.24	0.04	0.23
(3,1987)	1:A:84:VAL:HG23	1:A:88:LYS:HB2	5	0.24	0.04	0.23
(3,1987)	1:A:84:VAL:HG23	1:A:88:LYS:HB3	5	0.24	0.04	0.23
(3,1012)	1:A:38:ILE:HG21	1:A:43:LEU:HG	5	0.21	0.04	0.23
(3,1012)	1:A:38:ILE:HG22	1:A:43:LEU:HG	5	0.21	0.04	0.23
(3,1012)	1:A:38:ILE:HG23	1:A:43:LEU:HG	5	0.21	0.04	0.23
(3,629)	1:A:83:MET:HA	1:A:117:ALA:HB1	5	0.2	0.05	0.21
(3,629)	1:A:83:MET:HA	1:A:117:ALA:HB2	5	0.2	0.05	0.21
(3,629)	1:A:83:MET:HA	1:A:117:ALA:HB3	5	0.2	0.05	0.21
(3,1983)	1:A:84:VAL:HG11	1:A:86:GLN:H	5	0.18	0.04	0.17
(3,1983)	1:A:84:VAL:HG12	1:A:86:GLN:H	5	0.18	0.04	0.17
(3,1983)	1:A:84:VAL:HG13	1:A:86:GLN:H	5	0.18	0.04	0.17
(3,1983)	1:A:84:VAL:HG21	1:A:86:GLN:H	5	0.18	0.04	0.17
(3,1983)	1:A:84:VAL:HG22	1:A:86:GLN:H	5	0.18	0.04	0.17
(3,1983)	1:A:84:VAL:HG23	1:A:86:GLN:H	5	0.18	0.04	0.17
(3,646)	1:A:101:LEU:HG	1:A:102:ARG:H	5	0.17	0.04	0.19
(3,885)	1:A:142:VAL:HG11	1:A:143:LYS:HG2	5	0.17	0.04	0.17
(3,885)	1:A:142:VAL:HG11	1:A:143:LYS:HG3	5	0.17	0.04	0.17
(3,885)	1:A:142:VAL:HG12	1:A:143:LYS:HG2	5	0.17	0.04	0.17
(3,885)	1:A:142:VAL:HG12	1:A:143:LYS:HG3	5	0.17	0.04	0.17
(3,885)	1:A:142:VAL:HG13	1:A:143:LYS:HG2	5	0.17	0.04	0.17
(3,885)	1:A:142:VAL:HG13	1:A:143:LYS:HG3	5	0.17	0.04	0.17
(3,922)	1:A:19:MET:HE1	1:A:135:LEU:HA	5	0.17	0.05	0.14
(3,922)	1:A:19:MET:HE2	1:A:135:LEU:HA	5	0.17	0.05	0.14
(3,922)	1:A:19:MET:HE3	1:A:135:LEU:HA	5	0.17	0.05	0.14
(3,813)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD21	5	0.16	0.05	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(3,813)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD22	5	0.16	0.05	0.14
(3,813)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD23	5	0.16	0.05	0.14
(3,813)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD21	5	0.16	0.05	0.14
(3,813)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD22	5	0.16	0.05	0.14
(3,813)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD23	5	0.16	0.05	0.14
(3,813)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD21	5	0.16	0.05	0.14
(3,813)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD22	5	0.16	0.05	0.14
(3,813)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD23	5	0.16	0.05	0.14
(3,1414)	1:A:30:PHE:HA	1:A:46:VAL:HB	5	0.16	0.04	0.15
(3,460)	1:A:27:PHE:HA	1:A:31:ASP:H	5	0.16	0.03	0.15
(3,1298)	1:A:64:GLU:HG2	1:A:65:GLU:H	5	0.15	0.04	0.14
(3,517)	1:A:15:LEU:HB2	1:A:16:SER:H	5	0.14	0.02	0.14
(3,1406)	1:A:115:MET:HG2	1:A:120:MET:H	5	0.14	0.02	0.13
(3,776)	1:A:81:VAL:HA	1:A:84:VAL:HG11	5	0.13	0.01	0.12
(3,776)	1:A:81:VAL:HA	1:A:84:VAL:HG12	5	0.13	0.01	0.12
(3,776)	1:A:81:VAL:HA	1:A:84:VAL:HG13	5	0.13	0.01	0.12
(3,675)	1:A:24:LYS:HA	1:A:24:LYS:HD3	5	0.12	0.02	0.11
(3,414)	1:A:87:MET:H	1:A:87:MET:HE1	5	0.11	0.0	0.11
(3,414)	1:A:87:MET:H	1:A:87:MET:HE2	5	0.11	0.0	0.11
(3,414)	1:A:87:MET:H	1:A:87:MET:HE3	5	0.11	0.0	0.11
(3,688)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD11	4	0.33	0.01	0.32
(3,688)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD12	4	0.33	0.01	0.32
(3,688)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD13	4	0.33	0.01	0.32
(3,2089)	1:A:113:VAL:HG11	1:A:114:ARG:HB2	4	0.29	0.11	0.27
(3,2089)	1:A:113:VAL:HG11	1:A:114:ARG:HB3	4	0.29	0.11	0.27
(3,2089)	1:A:113:VAL:HG12	1:A:114:ARG:HB2	4	0.29	0.11	0.27
(3,2089)	1:A:113:VAL:HG12	1:A:114:ARG:HB3	4	0.29	0.11	0.27
(3,2089)	1:A:113:VAL:HG13	1:A:114:ARG:HB2	4	0.29	0.11	0.27
(3,2089)	1:A:113:VAL:HG13	1:A:114:ARG:HB3	4	0.29	0.11	0.27
(3,2089)	1:A:113:VAL:HG21	1:A:114:ARG:HB2	4	0.29	0.11	0.27
(3,2089)	1:A:113:VAL:HG21	1:A:114:ARG:HB3	4	0.29	0.11	0.27
(3,2089)	1:A:113:VAL:HG22	1:A:114:ARG:HB2	4	0.29	0.11	0.27
(3,2089)	1:A:113:VAL:HG22	1:A:114:ARG:HB3	4	0.29	0.11	0.27
(3,2089)	1:A:113:VAL:HG23	1:A:114:ARG:HB2	4	0.29	0.11	0.27
(3,2089)	1:A:113:VAL:HG23	1:A:114:ARG:HB3	4	0.29	0.11	0.27
(3,225)	1:A:58:GLU:H	1:A:58:GLU:HB3	4	0.24	0.03	0.26
(3,1152)	1:A:114:ARG:HA	1:A:114:ARG:HD2	4	0.22	0.04	0.22
(3,1434)	1:A:57:GLU:HA	1:A:57:GLU:HG3	4	0.22	0.04	0.24
(3,1154)	1:A:111:ARG:HA	1:A:111:ARG:HD2	4	0.21	0.05	0.22
(3,1154)	1:A:111:ARG:HA	1:A:111:ARG:HD3	4	0.21	0.05	0.22
(3,2055)	1:A:98:LEU:HD11	1:A:99:PHE:HA	4	0.2	0.06	0.18
(3,2055)	1:A:98:LEU:HD12	1:A:99:PHE:HA	4	0.2	0.06	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(3,2055)	1:A:98:LEU:HD13	1:A:99:PHE:HA	4	0.2	0.06	0.18
(3,2055)	1:A:98:LEU:HD21	1:A:99:PHE:HA	4	0.2	0.06	0.18
(3,2055)	1:A:98:LEU:HD22	1:A:99:PHE:HA	4	0.2	0.06	0.18
(3,2055)	1:A:98:LEU:HD23	1:A:99:PHE:HA	4	0.2	0.06	0.18
(3,1100)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD11	4	0.2	0.03	0.22
(3,1100)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD12	4	0.2	0.03	0.22
(3,1100)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD13	4	0.2	0.03	0.22
(3,1100)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD11	4	0.2	0.03	0.22
(3,1100)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD12	4	0.2	0.03	0.22
(3,1100)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD13	4	0.2	0.03	0.22
(3,1100)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD11	4	0.2	0.03	0.22
(3,1100)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD12	4	0.2	0.03	0.22
(3,1100)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD13	4	0.2	0.03	0.22
(1,2)	1:A:69:ASP:OD1	2:A:201:CA:CA	4	0.2	0.04	0.22
(1,2)	1:A:69:ASP:OD2	2:A:201:CA:CA	4	0.2	0.04	0.22
(3,2046)	1:A:97:LYS:HB2	1:A:98:LEU:H	4	0.18	0.02	0.18
(3,2046)	1:A:97:LYS:HB3	1:A:98:LEU:H	4	0.18	0.02	0.18
(3,1560)	1:A:115:MET:HE1	1:A:119:ALA:HB1	4	0.17	0.06	0.16
(3,1560)	1:A:115:MET:HE1	1:A:119:ALA:HB2	4	0.17	0.06	0.16
(3,1560)	1:A:115:MET:HE1	1:A:119:ALA:HB3	4	0.17	0.06	0.16
(3,1560)	1:A:115:MET:HE2	1:A:119:ALA:HB1	4	0.17	0.06	0.16
(3,1560)	1:A:115:MET:HE2	1:A:119:ALA:HB2	4	0.17	0.06	0.16
(3,1560)	1:A:115:MET:HE2	1:A:119:ALA:HB3	4	0.17	0.06	0.16
(3,1560)	1:A:115:MET:HE3	1:A:119:ALA:HB1	4	0.17	0.06	0.16
(3,1560)	1:A:115:MET:HE3	1:A:119:ALA:HB2	4	0.17	0.06	0.16
(3,1560)	1:A:115:MET:HE3	1:A:119:ALA:HB3	4	0.17	0.06	0.16
(3,607)	1:A:125:LEU:HG	1:A:126:GLY:H	4	0.17	0.05	0.16
(3,665)	1:A:144:LYS:HA	1:A:144:LYS:HE2	4	0.17	0.04	0.18
(3,665)	1:A:144:LYS:HA	1:A:144:LYS:HE3	4	0.17	0.04	0.18
(3,751)	1:A:41:LYS:HG2	1:A:42:GLU:H	4	0.16	0.02	0.16
(3,854)	1:A:4:MET:HB2	1:A:5:THR:HG21	4	0.16	0.02	0.17
(3,854)	1:A:4:MET:HB2	1:A:5:THR:HG22	4	0.16	0.02	0.17
(3,854)	1:A:4:MET:HB2	1:A:5:THR:HG23	4	0.16	0.02	0.17
(3,854)	1:A:4:MET:HB3	1:A:5:THR:HG21	4	0.16	0.02	0.17
(3,854)	1:A:4:MET:HB3	1:A:5:THR:HG22	4	0.16	0.02	0.17
(3,854)	1:A:4:MET:HB3	1:A:5:THR:HG23	4	0.16	0.02	0.17
(3,1008)	1:A:83:MET:HG2	1:A:120:MET:HE1	4	0.16	0.05	0.16
(3,1008)	1:A:83:MET:HG2	1:A:120:MET:HE2	4	0.16	0.05	0.16
(3,1008)	1:A:83:MET:HG2	1:A:120:MET:HE3	4	0.16	0.05	0.16
(3,1008)	1:A:83:MET:HG3	1:A:120:MET:HE1	4	0.16	0.05	0.16
(3,1008)	1:A:83:MET:HG3	1:A:120:MET:HE2	4	0.16	0.05	0.16
(3,1008)	1:A:83:MET:HG3	1:A:120:MET:HE3	4	0.16	0.05	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(3,1404)	1:A:115:MET:HG2	1:A:116:SER:H	4	0.15	0.02	0.15
(3,1831)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:50:LEU:HG	4	0.15	0.04	0.15
(3,1831)	1:A:46:VAL:HG12	1:A:50:LEU:HG	4	0.15	0.04	0.15
(3,1831)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:50:LEU:HG	4	0.15	0.04	0.15
(3,1831)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:50:LEU:HG	4	0.15	0.04	0.15
(3,1831)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:50:LEU:HG	4	0.15	0.04	0.15
(3,1831)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:50:LEU:HG	4	0.15	0.04	0.15
(3,2105)	1:A:116:SER:HB2	1:A:117:ALA:HB1	4	0.15	0.02	0.15
(3,2105)	1:A:116:SER:HB2	1:A:117:ALA:HB2	4	0.15	0.02	0.15
(3,2105)	1:A:116:SER:HB2	1:A:117:ALA:HB3	4	0.15	0.02	0.15
(3,2105)	1:A:116:SER:HB3	1:A:117:ALA:HB1	4	0.15	0.02	0.15
(3,2105)	1:A:116:SER:HB3	1:A:117:ALA:HB2	4	0.15	0.02	0.15
(3,2105)	1:A:116:SER:HB3	1:A:117:ALA:HB3	4	0.15	0.02	0.15
(3,1607)	1:A:14:TYR:H	1:A:15:LEU:HD11	4	0.15	0.03	0.14
(3,1607)	1:A:14:TYR:H	1:A:15:LEU:HD12	4	0.15	0.03	0.14
(3,1607)	1:A:14:TYR:H	1:A:15:LEU:HD13	4	0.15	0.03	0.14
(3,1607)	1:A:14:TYR:H	1:A:15:LEU:HD21	4	0.15	0.03	0.14
(3,1607)	1:A:14:TYR:H	1:A:15:LEU:HD22	4	0.15	0.03	0.14
(3,1607)	1:A:14:TYR:H	1:A:15:LEU:HD23	4	0.15	0.03	0.14
(3,1845)	1:A:47:MET:HE1	1:A:59:LEU:HD11	4	0.14	0.04	0.14
(3,1845)	1:A:47:MET:HE1	1:A:59:LEU:HD12	4	0.14	0.04	0.14
(3,1845)	1:A:47:MET:HE1	1:A:59:LEU:HD13	4	0.14	0.04	0.14
(3,1845)	1:A:47:MET:HE1	1:A:59:LEU:HD21	4	0.14	0.04	0.14
(3,1845)	1:A:47:MET:HE1	1:A:59:LEU:HD22	4	0.14	0.04	0.14
(3,1845)	1:A:47:MET:HE1	1:A:59:LEU:HD23	4	0.14	0.04	0.14
(3,1845)	1:A:47:MET:HE2	1:A:59:LEU:HD11	4	0.14	0.04	0.14
(3,1845)	1:A:47:MET:HE2	1:A:59:LEU:HD12	4	0.14	0.04	0.14
(3,1845)	1:A:47:MET:HE2	1:A:59:LEU:HD13	4	0.14	0.04	0.14
(3,1845)	1:A:47:MET:HE2	1:A:59:LEU:HD21	4	0.14	0.04	0.14
(3,1845)	1:A:47:MET:HE2	1:A:59:LEU:HD22	4	0.14	0.04	0.14
(3,1845)	1:A:47:MET:HE2	1:A:59:LEU:HD23	4	0.14	0.04	0.14
(3,1845)	1:A:47:MET:HE3	1:A:59:LEU:HD11	4	0.14	0.04	0.14
(3,1845)	1:A:47:MET:HE3	1:A:59:LEU:HD12	4	0.14	0.04	0.14
(3,1845)	1:A:47:MET:HE3	1:A:59:LEU:HD13	4	0.14	0.04	0.14
(3,1845)	1:A:47:MET:HE3	1:A:59:LEU:HD21	4	0.14	0.04	0.14
(3,1845)	1:A:47:MET:HE3	1:A:59:LEU:HD22	4	0.14	0.04	0.14
(3,1845)	1:A:47:MET:HE3	1:A:59:LEU:HD23	4	0.14	0.04	0.14
(3,1399)	1:A:22:GLU:HA	1:A:22:GLU:HG2	4	0.14	0.02	0.14
(3,1445)	1:A:56:LYS:HA	1:A:59:LEU:HD21	4	0.14	0.02	0.14
(3,1445)	1:A:56:LYS:HA	1:A:59:LEU:HD22	4	0.14	0.02	0.14
(3,1445)	1:A:56:LYS:HA	1:A:59:LEU:HD23	4	0.14	0.02	0.14
(3,2032)	1:A:88:LYS:HE2	1:A:135:LEU:HD11	4	0.14	0.02	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(3,2032)	1:A:88:LYS:HE2	1:A:135:LEU:HD12	4	0.14	0.02	0.14
(3,2032)	1:A:88:LYS:HE2	1:A:135:LEU:HD13	4	0.14	0.02	0.14
(3,2032)	1:A:88:LYS:HE2	1:A:135:LEU:HD21	4	0.14	0.02	0.14
(3,2032)	1:A:88:LYS:HE2	1:A:135:LEU:HD22	4	0.14	0.02	0.14
(3,2032)	1:A:88:LYS:HE2	1:A:135:LEU:HD23	4	0.14	0.02	0.14
(3,2032)	1:A:88:LYS:HE3	1:A:135:LEU:HD11	4	0.14	0.02	0.14
(3,2032)	1:A:88:LYS:HE3	1:A:135:LEU:HD12	4	0.14	0.02	0.14
(3,2032)	1:A:88:LYS:HE3	1:A:135:LEU:HD13	4	0.14	0.02	0.14
(3,2032)	1:A:88:LYS:HE3	1:A:135:LEU:HD21	4	0.14	0.02	0.14
(3,2032)	1:A:88:LYS:HE3	1:A:135:LEU:HD22	4	0.14	0.02	0.14
(3,2032)	1:A:88:LYS:HE3	1:A:135:LEU:HD23	4	0.14	0.02	0.14
(3,998)	1:A:120:MET:HE1	1:A:124:LEU:H	4	0.14	0.02	0.14
(3,998)	1:A:120:MET:HE2	1:A:124:LEU:H	4	0.14	0.02	0.14
(3,998)	1:A:120:MET:HE3	1:A:124:LEU:H	4	0.14	0.02	0.14
(3,920)	1:A:15:LEU:HA	1:A:19:MET:HE1	4	0.13	0.02	0.12
(3,920)	1:A:15:LEU:HA	1:A:19:MET:HE2	4	0.13	0.02	0.12
(3,920)	1:A:15:LEU:HA	1:A:19:MET:HE3	4	0.13	0.02	0.12
(3,1393)	1:A:81:VAL:HA	1:A:84:VAL:HB	4	0.13	0.02	0.12
(4,13)	1:A:38:ILE:HB	1:A:73:THR:HB	4	0.13	0.01	0.12
(3,1181)	1:A:56:LYS:HD3	1:A:59:LEU:HB2	4	0.12	0.01	0.12
(3,1518)	1:A:140:LYS:HD2	1:A:141:GLN:H	4	0.12	0.0	0.12
(3,1518)	1:A:140:LYS:HD3	1:A:141:GLN:H	4	0.12	0.0	0.12
(3,47)	1:A:142:VAL:HA	1:A:143:LYS:H	3	0.33	0.07	0.36
(3,197)	1:A:109:PRO:HA	1:A:110:LEU:H	3	0.31	0.04	0.33
(3,907)	1:A:32:ALA:HB1	1:A:33:ASP:HA	3	0.28	0.1	0.33
(3,907)	1:A:32:ALA:HB2	1:A:33:ASP:HA	3	0.28	0.1	0.33
(3,907)	1:A:32:ALA:HB3	1:A:33:ASP:HA	3	0.28	0.1	0.33
(3,879)	1:A:142:VAL:HG21	1:A:143:LYS:HE2	3	0.24	0.09	0.31
(3,879)	1:A:142:VAL:HG21	1:A:143:LYS:HE3	3	0.24	0.09	0.31
(3,879)	1:A:142:VAL:HG22	1:A:143:LYS:HE2	3	0.24	0.09	0.31
(3,879)	1:A:142:VAL:HG22	1:A:143:LYS:HE3	3	0.24	0.09	0.31
(3,879)	1:A:142:VAL:HG23	1:A:143:LYS:HE2	3	0.24	0.09	0.31
(3,879)	1:A:142:VAL:HG23	1:A:143:LYS:HE3	3	0.24	0.09	0.31
(3,2216)	1:A:142:VAL:HG11	1:A:143:LYS:HG2	3	0.23	0.07	0.25
(3,2216)	1:A:142:VAL:HG11	1:A:143:LYS:HG3	3	0.23	0.07	0.25
(3,2216)	1:A:142:VAL:HG12	1:A:143:LYS:HG2	3	0.23	0.07	0.25
(3,2216)	1:A:142:VAL:HG12	1:A:143:LYS:HG3	3	0.23	0.07	0.25
(3,2216)	1:A:142:VAL:HG13	1:A:143:LYS:HG2	3	0.23	0.07	0.25
(3,2216)	1:A:142:VAL:HG13	1:A:143:LYS:HG3	3	0.23	0.07	0.25
(3,2216)	1:A:142:VAL:HG21	1:A:143:LYS:HG2	3	0.23	0.07	0.25
(3,2216)	1:A:142:VAL:HG21	1:A:143:LYS:HG3	3	0.23	0.07	0.25
(3,2216)	1:A:142:VAL:HG22	1:A:143:LYS:HG2	3	0.23	0.07	0.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(3,2216)	1:A:142:VAL:HG22	1:A:143:LYS:HG3	3	0.23	0.07	0.25
(3,2216)	1:A:142:VAL:HG23	1:A:143:LYS:HG2	3	0.23	0.07	0.25
(3,2216)	1:A:142:VAL:HG23	1:A:143:LYS:HG3	3	0.23	0.07	0.25
(3,178)	1:A:144:LYS:H	1:A:146:ASP:H	3	0.23	0.04	0.24
(3,1135)	1:A:37:ASP:HB3	1:A:73:THR:HB	3	0.23	0.04	0.21
(3,200)	1:A:109:PRO:HB3	1:A:110:LEU:H	3	0.23	0.06	0.2
(3,664)	1:A:102:ARG:HA	1:A:102:ARG:HD2	3	0.2	0.06	0.23
(3,664)	1:A:102:ARG:HA	1:A:102:ARG:HD3	3	0.2	0.06	0.23
(3,876)	1:A:142:VAL:HG21	1:A:143:LYS:HG2	3	0.19	0.03	0.18
(3,876)	1:A:142:VAL:HG21	1:A:143:LYS:HG3	3	0.19	0.03	0.18
(3,876)	1:A:142:VAL:HG22	1:A:143:LYS:HG2	3	0.19	0.03	0.18
(3,876)	1:A:142:VAL:HG22	1:A:143:LYS:HG3	3	0.19	0.03	0.18
(3,876)	1:A:142:VAL:HG23	1:A:143:LYS:HG2	3	0.19	0.03	0.18
(3,876)	1:A:142:VAL:HG23	1:A:143:LYS:HG3	3	0.19	0.03	0.18
(3,902)	1:A:136:ARG:H	1:A:137:ALA:HB1	3	0.19	0.05	0.21
(3,902)	1:A:136:ARG:H	1:A:137:ALA:HB2	3	0.19	0.05	0.21
(3,902)	1:A:136:ARG:H	1:A:137:ALA:HB3	3	0.19	0.05	0.21
(3,1149)	1:A:136:ARG:HA	1:A:136:ARG:HD2	3	0.19	0.01	0.18
(3,1149)	1:A:136:ARG:HA	1:A:136:ARG:HD3	3	0.19	0.01	0.18
(3,2207)	1:A:140:LYS:HB2	1:A:141:GLN:H	3	0.18	0.05	0.2
(3,2207)	1:A:140:LYS:HB3	1:A:141:GLN:H	3	0.18	0.05	0.2
(3,1053)	1:A:87:MET:HE1	1:A:134:ASP:HA	3	0.18	0.08	0.13
(3,1053)	1:A:87:MET:HE2	1:A:134:ASP:HA	3	0.18	0.08	0.13
(3,1053)	1:A:87:MET:HE3	1:A:134:ASP:HA	3	0.18	0.08	0.13
(3,954)	1:A:122:LYS:H	1:A:133:MET:HE1	3	0.17	0.03	0.17
(3,954)	1:A:122:LYS:H	1:A:133:MET:HE2	3	0.17	0.03	0.17
(3,954)	1:A:122:LYS:H	1:A:133:MET:HE3	3	0.17	0.03	0.17
(3,676)	1:A:24:LYS:HA	1:A:24:LYS:HD2	3	0.16	0.02	0.17
(3,817)	1:A:83:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD21	3	0.16	0.02	0.17
(3,817)	1:A:83:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD22	3	0.16	0.02	0.17
(3,817)	1:A:83:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD23	3	0.16	0.02	0.17
(3,817)	1:A:83:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD21	3	0.16	0.02	0.17
(3,817)	1:A:83:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD22	3	0.16	0.02	0.17
(3,817)	1:A:83:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD23	3	0.16	0.02	0.17
(3,817)	1:A:83:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD21	3	0.16	0.02	0.17
(3,817)	1:A:83:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD22	3	0.16	0.02	0.17
(3,817)	1:A:83:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD23	3	0.16	0.02	0.17
(3,915)	1:A:19:MET:HE1	1:A:135:LEU:H	3	0.16	0.02	0.15
(3,915)	1:A:19:MET:HE2	1:A:135:LEU:H	3	0.16	0.02	0.15
(3,915)	1:A:19:MET:HE3	1:A:135:LEU:H	3	0.16	0.02	0.15
(3,271)	1:A:39:SER:HA	1:A:41:LYS:H	3	0.16	0.04	0.16
(3,707)	1:A:83:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD11	3	0.16	0.05	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(3,707)	1:A:83:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD12	3	0.16	0.05	0.13
(3,707)	1:A:83:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD13	3	0.16	0.05	0.13
(3,707)	1:A:83:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD11	3	0.16	0.05	0.13
(3,707)	1:A:83:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD12	3	0.16	0.05	0.13
(3,707)	1:A:83:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD13	3	0.16	0.05	0.13
(3,707)	1:A:83:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD11	3	0.16	0.05	0.13
(3,707)	1:A:83:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD12	3	0.16	0.05	0.13
(3,707)	1:A:83:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD13	3	0.16	0.05	0.13
(3,37)	1:A:52:GLN:HE21	1:A:115:MET:HB2	3	0.16	0.04	0.15
(3,37)	1:A:52:GLN:HE21	1:A:115:MET:HB3	3	0.16	0.04	0.15
(3,1032)	1:A:29:MET:HE1	1:A:124:LEU:HB2	3	0.16	0.02	0.15
(3,1032)	1:A:29:MET:HE2	1:A:124:LEU:HB2	3	0.16	0.02	0.15
(3,1032)	1:A:29:MET:HE3	1:A:124:LEU:HB2	3	0.16	0.02	0.15
(3,1175)	1:A:135:LEU:H	1:A:135:LEU:HB2	3	0.15	0.01	0.16
(3,120)	1:A:101:LEU:H	1:A:101:LEU:HB3	3	0.15	0.0	0.15
(3,128)	1:A:107:ARG:H	1:A:107:ARG:HD2	3	0.14	0.03	0.14
(3,128)	1:A:107:ARG:H	1:A:107:ARG:HD3	3	0.14	0.03	0.14
(3,2066)	1:A:102:ARG:HG2	1:A:107:ARG:HB2	3	0.14	0.03	0.14
(3,2066)	1:A:102:ARG:HG2	1:A:107:ARG:HB3	3	0.14	0.03	0.14
(3,2066)	1:A:102:ARG:HG3	1:A:107:ARG:HB2	3	0.14	0.03	0.14
(3,2066)	1:A:102:ARG:HG3	1:A:107:ARG:HB3	3	0.14	0.03	0.14
(3,1468)	1:A:88:LYS:HD2	1:A:89:GLU:HA	3	0.14	0.02	0.12
(3,1468)	1:A:88:LYS:HD3	1:A:89:GLU:HA	3	0.14	0.02	0.12
(3,2072)	1:A:104:LYS:HG2	1:A:105:PHE:H	3	0.14	0.03	0.12
(3,2072)	1:A:104:LYS:HG3	1:A:105:PHE:H	3	0.14	0.03	0.12
(3,1299)	1:A:64:GLU:HG3	1:A:65:GLU:H	3	0.13	0.01	0.13
(3,1521)	1:A:18:GLU:HB3	1:A:19:MET:H	3	0.13	0.01	0.13
(3,1872)	1:A:52:GLN:HB2	1:A:53:THR:HB	3	0.13	0.01	0.12
(3,1872)	1:A:52:GLN:HB3	1:A:53:THR:HB	3	0.13	0.01	0.12
(3,28)	1:A:35:GLY:H	1:A:36:GLY:HA2	3	0.13	0.01	0.13
(3,1340)	1:A:144:LYS:HB2	1:A:146:ASP:HB2	3	0.13	0.01	0.12
(3,1340)	1:A:144:LYS:HB2	1:A:146:ASP:HB3	3	0.13	0.01	0.12
(3,1666)	1:A:19:MET:HB2	1:A:131:VAL:HG11	3	0.13	0.01	0.12
(3,1666)	1:A:19:MET:HB2	1:A:131:VAL:HG12	3	0.13	0.01	0.12
(3,1666)	1:A:19:MET:HB2	1:A:131:VAL:HG13	3	0.13	0.01	0.12
(3,1666)	1:A:19:MET:HB3	1:A:131:VAL:HG11	3	0.13	0.01	0.12
(3,1666)	1:A:19:MET:HB3	1:A:131:VAL:HG12	3	0.13	0.01	0.12
(3,1666)	1:A:19:MET:HB3	1:A:131:VAL:HG13	3	0.13	0.01	0.12
(3,2014)	1:A:87:MET:HB2	1:A:135:LEU:HD11	3	0.13	0.01	0.13
(3,2014)	1:A:87:MET:HB2	1:A:135:LEU:HD12	3	0.13	0.01	0.13
(3,2014)	1:A:87:MET:HB2	1:A:135:LEU:HD13	3	0.13	0.01	0.13
(3,2014)	1:A:87:MET:HB2	1:A:135:LEU:HD21	3	0.13	0.01	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(3,2014)	1:A:87:MET:HB2	1:A:135:LEU:HD22	3	0.13	0.01	0.13
(3,2014)	1:A:87:MET:HB2	1:A:135:LEU:HD23	3	0.13	0.01	0.13
(3,2014)	1:A:87:MET:HB3	1:A:135:LEU:HD11	3	0.13	0.01	0.13
(3,2014)	1:A:87:MET:HB3	1:A:135:LEU:HD12	3	0.13	0.01	0.13
(3,2014)	1:A:87:MET:HB3	1:A:135:LEU:HD13	3	0.13	0.01	0.13
(3,2014)	1:A:87:MET:HB3	1:A:135:LEU:HD21	3	0.13	0.01	0.13
(3,2014)	1:A:87:MET:HB3	1:A:135:LEU:HD22	3	0.13	0.01	0.13
(3,2014)	1:A:87:MET:HB3	1:A:135:LEU:HD23	3	0.13	0.01	0.13
(3,1120)	1:A:38:ILE:HD11	1:A:43:LEU:HA	3	0.12	0.01	0.12
(3,1120)	1:A:38:ILE:HD12	1:A:43:LEU:HA	3	0.12	0.01	0.12
(3,1120)	1:A:38:ILE:HD13	1:A:43:LEU:HA	3	0.12	0.01	0.12
(3,1658)	1:A:18:GLU:HG2	1:A:19:MET:HB2	3	0.12	0.02	0.11
(3,1658)	1:A:18:GLU:HG2	1:A:19:MET:HB3	3	0.12	0.02	0.11
(3,1658)	1:A:18:GLU:HG3	1:A:19:MET:HB2	3	0.12	0.02	0.11
(3,1658)	1:A:18:GLU:HG3	1:A:19:MET:HB3	3	0.12	0.02	0.11
(3,424)	1:A:43:LEU:HA	1:A:45:THR:H	3	0.12	0.0	0.12
(3,1005)	1:A:120:MET:HA	1:A:120:MET:HE1	3	0.12	0.01	0.12
(3,1005)	1:A:120:MET:HA	1:A:120:MET:HE2	3	0.12	0.01	0.12
(3,1005)	1:A:120:MET:HA	1:A:120:MET:HE3	3	0.12	0.01	0.12
(3,1595)	1:A:12:ARG:H	1:A:15:LEU:HD11	3	0.12	0.0	0.12
(3,1595)	1:A:12:ARG:H	1:A:15:LEU:HD12	3	0.12	0.0	0.12
(3,1595)	1:A:12:ARG:H	1:A:15:LEU:HD13	3	0.12	0.0	0.12
(3,1595)	1:A:12:ARG:H	1:A:15:LEU:HD21	3	0.12	0.0	0.12
(3,1595)	1:A:12:ARG:H	1:A:15:LEU:HD22	3	0.12	0.0	0.12
(3,1595)	1:A:12:ARG:H	1:A:15:LEU:HD23	3	0.12	0.0	0.12
(3,1861)	1:A:50:LEU:HD11	1:A:120:MET:HE1	3	0.12	0.0	0.12
(3,1861)	1:A:50:LEU:HD11	1:A:120:MET:HE2	3	0.12	0.0	0.12
(3,1861)	1:A:50:LEU:HD11	1:A:120:MET:HE3	3	0.12	0.0	0.12
(3,1861)	1:A:50:LEU:HD12	1:A:120:MET:HE1	3	0.12	0.0	0.12
(3,1861)	1:A:50:LEU:HD12	1:A:120:MET:HE2	3	0.12	0.0	0.12
(3,1861)	1:A:50:LEU:HD12	1:A:120:MET:HE3	3	0.12	0.0	0.12
(3,1861)	1:A:50:LEU:HD13	1:A:120:MET:HE1	3	0.12	0.0	0.12
(3,1861)	1:A:50:LEU:HD13	1:A:120:MET:HE2	3	0.12	0.0	0.12
(3,1861)	1:A:50:LEU:HD13	1:A:120:MET:HE3	3	0.12	0.0	0.12
(3,1861)	1:A:50:LEU:HD21	1:A:120:MET:HE1	3	0.12	0.0	0.12
(3,1861)	1:A:50:LEU:HD21	1:A:120:MET:HE2	3	0.12	0.0	0.12
(3,1861)	1:A:50:LEU:HD21	1:A:120:MET:HE3	3	0.12	0.0	0.12
(3,1861)	1:A:50:LEU:HD22	1:A:120:MET:HE1	3	0.12	0.0	0.12
(3,1861)	1:A:50:LEU:HD22	1:A:120:MET:HE2	3	0.12	0.0	0.12
(3,1861)	1:A:50:LEU:HD22	1:A:120:MET:HE3	3	0.12	0.0	0.12
(3,1861)	1:A:50:LEU:HD23	1:A:120:MET:HE1	3	0.12	0.0	0.12
(3,1861)	1:A:50:LEU:HD23	1:A:120:MET:HE2	3	0.12	0.0	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(3,1861)	1:A:50:LEU:HD23	1:A:120:MET:HE3	3	0.12	0.0	0.12
(3,659)	1:A:101:LEU:H	1:A:101:LEU:HG	2	0.48	0.16	0.48
(3,662)	1:A:136:ARG:HA	1:A:137:ALA:H	2	0.33	0.07	0.33
(3,1503)	1:A:7:GLN:HA	1:A:7:GLN:HG3	2	0.28	0.02	0.28
(3,179)	1:A:139:LEU:H	1:A:140:LYS:H	2	0.27	0.14	0.27
(3,790)	1:A:40:VAL:HG11	1:A:56:LYS:HE2	2	0.26	0.1	0.26
(3,790)	1:A:40:VAL:HG11	1:A:56:LYS:HE3	2	0.26	0.1	0.26
(3,790)	1:A:40:VAL:HG12	1:A:56:LYS:HE2	2	0.26	0.1	0.26
(3,790)	1:A:40:VAL:HG12	1:A:56:LYS:HE3	2	0.26	0.1	0.26
(3,790)	1:A:40:VAL:HG13	1:A:56:LYS:HE2	2	0.26	0.1	0.26
(3,790)	1:A:40:VAL:HG13	1:A:56:LYS:HE3	2	0.26	0.1	0.26
(3,1487)	1:A:61:ALA:HA	1:A:64:GLU:HB2	2	0.26	0.05	0.26
(3,27)	1:A:35:GLY:H	1:A:36:GLY:H	2	0.25	0.14	0.25
(3,644)	1:A:132:CYS:H	1:A:132:CYS:HB2	2	0.25	0.01	0.25
(3,29)	1:A:35:GLY:H	1:A:36:GLY:HA3	2	0.24	0.01	0.24
(3,905)	1:A:31:ASP:H	1:A:32:ALA:HB1	2	0.24	0.05	0.24
(3,905)	1:A:31:ASP:H	1:A:32:ALA:HB2	2	0.24	0.05	0.24
(3,905)	1:A:31:ASP:H	1:A:32:ALA:HB3	2	0.24	0.05	0.24
(3,348)	1:A:101:LEU:HA	1:A:102:ARG:H	2	0.24	0.0	0.24
(3,381)	1:A:98:LEU:HA	1:A:99:PHE:H	2	0.24	0.0	0.24
(3,2045)	1:A:97:LYS:HA	1:A:98:LEU:HD11	2	0.24	0.02	0.24
(3,2045)	1:A:97:LYS:HA	1:A:98:LEU:HD12	2	0.24	0.02	0.24
(3,2045)	1:A:97:LYS:HA	1:A:98:LEU:HD13	2	0.24	0.02	0.24
(3,2045)	1:A:97:LYS:HA	1:A:98:LEU:HD21	2	0.24	0.02	0.24
(3,2045)	1:A:97:LYS:HA	1:A:98:LEU:HD22	2	0.24	0.02	0.24
(3,2045)	1:A:97:LYS:HA	1:A:98:LEU:HD23	2	0.24	0.02	0.24
(3,2152)	1:A:125:LEU:HA	1:A:125:LEU:HD11	2	0.23	0.0	0.23
(3,2152)	1:A:125:LEU:HA	1:A:125:LEU:HD12	2	0.23	0.0	0.23
(3,2152)	1:A:125:LEU:HA	1:A:125:LEU:HD13	2	0.23	0.0	0.23
(3,2152)	1:A:125:LEU:HA	1:A:125:LEU:HD21	2	0.23	0.0	0.23
(3,2152)	1:A:125:LEU:HA	1:A:125:LEU:HD22	2	0.23	0.0	0.23
(3,2152)	1:A:125:LEU:HA	1:A:125:LEU:HD23	2	0.23	0.0	0.23
(3,2059)	1:A:101:LEU:H	1:A:101:LEU:HB2	2	0.23	0.08	0.23
(3,2059)	1:A:101:LEU:H	1:A:101:LEU:HB3	2	0.23	0.08	0.23
(3,2210)	1:A:141:GLN:HG2	1:A:142:VAL:HG11	2	0.22	0.08	0.22
(3,2210)	1:A:141:GLN:HG2	1:A:142:VAL:HG12	2	0.22	0.08	0.22
(3,2210)	1:A:141:GLN:HG2	1:A:142:VAL:HG13	2	0.22	0.08	0.22
(3,2210)	1:A:141:GLN:HG2	1:A:142:VAL:HG21	2	0.22	0.08	0.22
(3,2210)	1:A:141:GLN:HG2	1:A:142:VAL:HG22	2	0.22	0.08	0.22
(3,2210)	1:A:141:GLN:HG2	1:A:142:VAL:HG23	2	0.22	0.08	0.22
(3,2210)	1:A:141:GLN:HG3	1:A:142:VAL:HG11	2	0.22	0.08	0.22
(3,2210)	1:A:141:GLN:HG3	1:A:142:VAL:HG12	2	0.22	0.08	0.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(3,2210)	1:A:141:GLN:HG3	1:A:142:VAL:HG13	2	0.22	0.08	0.22
(3,2210)	1:A:141:GLN:HG3	1:A:142:VAL:HG21	2	0.22	0.08	0.22
(3,2210)	1:A:141:GLN:HG3	1:A:142:VAL:HG22	2	0.22	0.08	0.22
(3,2210)	1:A:141:GLN:HG3	1:A:142:VAL:HG23	2	0.22	0.08	0.22
(3,777)	1:A:11:ALA:HB1	1:A:84:VAL:HG11	2	0.22	0.03	0.22
(3,777)	1:A:11:ALA:HB1	1:A:84:VAL:HG12	2	0.22	0.03	0.22
(3,777)	1:A:11:ALA:HB1	1:A:84:VAL:HG13	2	0.22	0.03	0.22
(3,777)	1:A:11:ALA:HB2	1:A:84:VAL:HG11	2	0.22	0.03	0.22
(3,777)	1:A:11:ALA:HB2	1:A:84:VAL:HG12	2	0.22	0.03	0.22
(3,777)	1:A:11:ALA:HB2	1:A:84:VAL:HG13	2	0.22	0.03	0.22
(3,777)	1:A:11:ALA:HB3	1:A:84:VAL:HG11	2	0.22	0.03	0.22
(3,777)	1:A:11:ALA:HB3	1:A:84:VAL:HG12	2	0.22	0.03	0.22
(3,777)	1:A:11:ALA:HB3	1:A:84:VAL:HG13	2	0.22	0.03	0.22
(3,1628)	1:A:15:LEU:HG	1:A:135:LEU:HD11	2	0.22	0.02	0.22
(3,1628)	1:A:15:LEU:HG	1:A:135:LEU:HD12	2	0.22	0.02	0.22
(3,1628)	1:A:15:LEU:HG	1:A:135:LEU:HD13	2	0.22	0.02	0.22
(3,1628)	1:A:15:LEU:HG	1:A:135:LEU:HD21	2	0.22	0.02	0.22
(3,1628)	1:A:15:LEU:HG	1:A:135:LEU:HD22	2	0.22	0.02	0.22
(3,1628)	1:A:15:LEU:HG	1:A:135:LEU:HD23	2	0.22	0.02	0.22
(3,111)	1:A:100:ASP:HA	1:A:101:LEU:H	2	0.22	0.1	0.22
(3,1036)	1:A:29:MET:H	1:A:29:MET:HE1	2	0.22	0.01	0.22
(3,1036)	1:A:29:MET:H	1:A:29:MET:HE2	2	0.22	0.01	0.22
(3,1036)	1:A:29:MET:H	1:A:29:MET:HE3	2	0.22	0.01	0.22
(3,1672)	1:A:19:MET:HE1	1:A:84:VAL:HG11	2	0.21	0.05	0.21
(3,1672)	1:A:19:MET:HE1	1:A:84:VAL:HG12	2	0.21	0.05	0.21
(3,1672)	1:A:19:MET:HE1	1:A:84:VAL:HG13	2	0.21	0.05	0.21
(3,1672)	1:A:19:MET:HE1	1:A:84:VAL:HG21	2	0.21	0.05	0.21
(3,1672)	1:A:19:MET:HE1	1:A:84:VAL:HG22	2	0.21	0.05	0.21
(3,1672)	1:A:19:MET:HE1	1:A:84:VAL:HG23	2	0.21	0.05	0.21
(3,1672)	1:A:19:MET:HE2	1:A:84:VAL:HG11	2	0.21	0.05	0.21
(3,1672)	1:A:19:MET:HE2	1:A:84:VAL:HG12	2	0.21	0.05	0.21
(3,1672)	1:A:19:MET:HE2	1:A:84:VAL:HG13	2	0.21	0.05	0.21
(3,1672)	1:A:19:MET:HE2	1:A:84:VAL:HG21	2	0.21	0.05	0.21
(3,1672)	1:A:19:MET:HE2	1:A:84:VAL:HG22	2	0.21	0.05	0.21
(3,1672)	1:A:19:MET:HE2	1:A:84:VAL:HG23	2	0.21	0.05	0.21
(3,1672)	1:A:19:MET:HE3	1:A:84:VAL:HG11	2	0.21	0.05	0.21
(3,1672)	1:A:19:MET:HE3	1:A:84:VAL:HG12	2	0.21	0.05	0.21
(3,1672)	1:A:19:MET:HE3	1:A:84:VAL:HG13	2	0.21	0.05	0.21
(3,1672)	1:A:19:MET:HE3	1:A:84:VAL:HG21	2	0.21	0.05	0.21
(3,1672)	1:A:19:MET:HE3	1:A:84:VAL:HG22	2	0.21	0.05	0.21
(3,1672)	1:A:19:MET:HE3	1:A:84:VAL:HG23	2	0.21	0.05	0.21
(3,4)	1:A:34:GLY:H	1:A:35:GLY:H	2	0.21	0.1	0.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(3,2087)	1:A:113:VAL:HA	1:A:114:ARG:HG2	2	0.2	0.08	0.2
(3,2087)	1:A:113:VAL:HA	1:A:114:ARG:HG3	2	0.2	0.08	0.2
(3,2199)	1:A:139:LEU:H	1:A:139:LEU:HD11	2	0.2	0.02	0.2
(3,2199)	1:A:139:LEU:H	1:A:139:LEU:HD12	2	0.2	0.02	0.2
(3,2199)	1:A:139:LEU:H	1:A:139:LEU:HD13	2	0.2	0.02	0.2
(3,2199)	1:A:139:LEU:H	1:A:139:LEU:HD21	2	0.2	0.02	0.2
(3,2199)	1:A:139:LEU:H	1:A:139:LEU:HD22	2	0.2	0.02	0.2
(3,2199)	1:A:139:LEU:H	1:A:139:LEU:HD23	2	0.2	0.02	0.2
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG11	2	0.2	0.04	0.2
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG12	2	0.2	0.04	0.2
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG13	2	0.2	0.04	0.2
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG21	2	0.2	0.04	0.2
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG22	2	0.2	0.04	0.2
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG23	2	0.2	0.04	0.2
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG11	2	0.2	0.04	0.2
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG12	2	0.2	0.04	0.2
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG13	2	0.2	0.04	0.2
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG21	2	0.2	0.04	0.2
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG22	2	0.2	0.04	0.2
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG23	2	0.2	0.04	0.2
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG11	2	0.2	0.04	0.2
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG12	2	0.2	0.04	0.2
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG13	2	0.2	0.04	0.2
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG21	2	0.2	0.04	0.2
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG22	2	0.2	0.04	0.2
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG23	2	0.2	0.04	0.2
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG11	2	0.2	0.04	0.2
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG12	2	0.2	0.04	0.2
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG13	2	0.2	0.04	0.2
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG21	2	0.2	0.04	0.2
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG22	2	0.2	0.04	0.2
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG23	2	0.2	0.04	0.2
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG11	2	0.2	0.04	0.2
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG12	2	0.2	0.04	0.2
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG13	2	0.2	0.04	0.2
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG21	2	0.2	0.04	0.2
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG22	2	0.2	0.04	0.2
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG23	2	0.2	0.04	0.2
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG11	2	0.2	0.04	0.2
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG12	2	0.2	0.04	0.2
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG13	2	0.2	0.04	0.2
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG21	2	0.2	0.04	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG22	2	0.2	0.04	0.2
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG23	2	0.2	0.04	0.2
(3,13)	1:A:32:ALA:H	1:A:42:GLU:HB3	2	0.2	0.08	0.2
(3,367)	1:A:104:LYS:HB2	1:A:105:PHE:H	2	0.2	0.02	0.2
(3,367)	1:A:104:LYS:HB3	1:A:105:PHE:H	2	0.2	0.02	0.2
(3,1555)	1:A:75:ASP:HA	1:A:78:GLU:H	2	0.2	0.04	0.2
(3,904)	1:A:32:ALA:HB1	1:A:33:ASP:H	2	0.19	0.04	0.19
(3,904)	1:A:32:ALA:HB2	1:A:33:ASP:H	2	0.19	0.04	0.19
(3,904)	1:A:32:ALA:HB3	1:A:33:ASP:H	2	0.19	0.04	0.19
(3,1180)	1:A:128:LYS:HA	1:A:128:LYS:HE2	2	0.19	0.06	0.19
(3,1180)	1:A:128:LYS:HA	1:A:128:LYS:HE3	2	0.19	0.06	0.19
(3,1527)	1:A:104:LYS:HA	1:A:104:LYS:HD2	2	0.19	0.0	0.19
(3,1527)	1:A:104:LYS:HA	1:A:104:LYS:HD3	2	0.19	0.0	0.19
(3,107)	1:A:136:ARG:HG2	1:A:137:ALA:H	2	0.18	0.01	0.18
(3,107)	1:A:136:ARG:HG3	1:A:137:ALA:H	2	0.18	0.01	0.18
(3,986)	1:A:121:LEU:HD21	1:A:133:MET:HE1	2	0.18	0.06	0.18
(3,986)	1:A:121:LEU:HD21	1:A:133:MET:HE2	2	0.18	0.06	0.18
(3,986)	1:A:121:LEU:HD21	1:A:133:MET:HE3	2	0.18	0.06	0.18
(3,986)	1:A:121:LEU:HD22	1:A:133:MET:HE1	2	0.18	0.06	0.18
(3,986)	1:A:121:LEU:HD22	1:A:133:MET:HE2	2	0.18	0.06	0.18
(3,986)	1:A:121:LEU:HD22	1:A:133:MET:HE3	2	0.18	0.06	0.18
(3,986)	1:A:121:LEU:HD23	1:A:133:MET:HE1	2	0.18	0.06	0.18
(3,986)	1:A:121:LEU:HD23	1:A:133:MET:HE2	2	0.18	0.06	0.18
(3,986)	1:A:121:LEU:HD23	1:A:133:MET:HE3	2	0.18	0.06	0.18
(3,1754)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:35:GLY:H	2	0.18	0.07	0.18
(3,1754)	1:A:33:ASP:HB3	1:A:35:GLY:H	2	0.18	0.07	0.18
(3,750)	1:A:97:LYS:HG2	1:A:98:LEU:H	2	0.18	0.04	0.18
(3,1182)	1:A:56:LYS:HD2	1:A:59:LEU:HB2	2	0.17	0.03	0.17
(3,164)	1:A:141:GLN:HA	1:A:142:VAL:H	2	0.17	0.05	0.17
(3,14)	1:A:31:ASP:H	1:A:32:ALA:H	2	0.16	0.02	0.16
(3,1170)	1:A:12:ARG:HG2	1:A:20:ILE:HD11	2	0.16	0.04	0.16
(3,1170)	1:A:12:ARG:HG2	1:A:20:ILE:HD12	2	0.16	0.04	0.16
(3,1170)	1:A:12:ARG:HG2	1:A:20:ILE:HD13	2	0.16	0.04	0.16
(3,1170)	1:A:12:ARG:HG3	1:A:20:ILE:HD11	2	0.16	0.04	0.16
(3,1170)	1:A:12:ARG:HG3	1:A:20:ILE:HD12	2	0.16	0.04	0.16
(3,1170)	1:A:12:ARG:HG3	1:A:20:ILE:HD13	2	0.16	0.04	0.16
(3,1898)	1:A:57:GLU:HA	1:A:57:GLU:HG2	2	0.16	0.06	0.16
(3,1898)	1:A:57:GLU:HA	1:A:57:GLU:HG3	2	0.16	0.06	0.16
(3,57)	1:A:91:ALA:HB1	1:A:92:GLY:H	2	0.16	0.0	0.16
(3,57)	1:A:91:ALA:HB2	1:A:92:GLY:H	2	0.16	0.0	0.16
(3,57)	1:A:91:ALA:HB3	1:A:92:GLY:H	2	0.16	0.0	0.16
(3,881)	1:A:102:ARG:HG2	1:A:108:PRO:HD3	2	0.16	0.02	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(3,881)	1:A:102:ARG:HG3	1:A:108:PRO:HD3	2	0.16	0.02	0.16
(3,1014)	1:A:83:MET:HE1	1:A:120:MET:HE1	2	0.16	0.0	0.16
(3,1014)	1:A:83:MET:HE1	1:A:120:MET:HE2	2	0.16	0.0	0.16
(3,1014)	1:A:83:MET:HE1	1:A:120:MET:HE3	2	0.16	0.0	0.16
(3,1014)	1:A:83:MET:HE2	1:A:120:MET:HE1	2	0.16	0.0	0.16
(3,1014)	1:A:83:MET:HE2	1:A:120:MET:HE2	2	0.16	0.0	0.16
(3,1014)	1:A:83:MET:HE2	1:A:120:MET:HE3	2	0.16	0.0	0.16
(3,1014)	1:A:83:MET:HE3	1:A:120:MET:HE1	2	0.16	0.0	0.16
(3,1014)	1:A:83:MET:HE3	1:A:120:MET:HE2	2	0.16	0.0	0.16
(3,1014)	1:A:83:MET:HE3	1:A:120:MET:HE3	2	0.16	0.0	0.16
(3,1359)	1:A:130:LYS:H	1:A:131:VAL:HA	2	0.16	0.03	0.16
(3,2198)	1:A:139:LEU:H	1:A:139:LEU:HB2	2	0.16	0.02	0.16
(3,2198)	1:A:139:LEU:H	1:A:139:LEU:HB3	2	0.16	0.02	0.16
(3,1049)	1:A:47:MET:HE1	1:A:55:THR:H	2	0.16	0.04	0.16
(3,1049)	1:A:47:MET:HE2	1:A:55:THR:H	2	0.16	0.04	0.16
(3,1049)	1:A:47:MET:HE3	1:A:55:THR:H	2	0.16	0.04	0.16
(3,1448)	1:A:52:GLN:HB3	1:A:53:THR:H	2	0.16	0.02	0.16
(3,2039)	1:A:91:ALA:H	1:A:92:GLY:HA2	2	0.16	0.02	0.16
(3,2039)	1:A:91:ALA:H	1:A:92:GLY:HA3	2	0.16	0.02	0.16
(3,1326)	1:A:116:SER:HB2	1:A:119:ALA:H	2	0.15	0.02	0.15
(3,113)	1:A:104:LYS:HA	1:A:106:LYS:H	2	0.15	0.04	0.15
(3,562)	1:A:65:GLU:H	1:A:66:VAL:HG11	2	0.15	0.0	0.15
(3,562)	1:A:65:GLU:H	1:A:66:VAL:HG12	2	0.15	0.0	0.15
(3,562)	1:A:65:GLU:H	1:A:66:VAL:HG13	2	0.15	0.0	0.15
(3,647)	1:A:111:ARG:HG2	1:A:113:VAL:H	2	0.15	0.0	0.15
(3,647)	1:A:111:ARG:HG3	1:A:113:VAL:H	2	0.15	0.0	0.15
(3,1196)	1:A:134:ASP:H	1:A:134:ASP:HB2	2	0.15	0.02	0.15
(3,148)	1:A:39:SER:HB2	1:A:42:GLU:H	2	0.14	0.03	0.14
(3,148)	1:A:39:SER:HB3	1:A:42:GLU:H	2	0.14	0.03	0.14
(3,303)	1:A:80:LEU:HA	1:A:84:VAL:H	2	0.14	0.01	0.14
(3,1313)	1:A:7:GLN:HG3	1:A:81:VAL:HG11	2	0.14	0.03	0.14
(3,1313)	1:A:7:GLN:HG3	1:A:81:VAL:HG12	2	0.14	0.03	0.14
(3,1313)	1:A:7:GLN:HG3	1:A:81:VAL:HG13	2	0.14	0.03	0.14
(3,1713)	1:A:26:ALA:H	1:A:125:LEU:HD11	2	0.14	0.02	0.14
(3,1713)	1:A:26:ALA:H	1:A:125:LEU:HD12	2	0.14	0.02	0.14
(3,1713)	1:A:26:ALA:H	1:A:125:LEU:HD13	2	0.14	0.02	0.14
(3,1713)	1:A:26:ALA:H	1:A:125:LEU:HD21	2	0.14	0.02	0.14
(3,1713)	1:A:26:ALA:H	1:A:125:LEU:HD22	2	0.14	0.02	0.14
(3,1713)	1:A:26:ALA:H	1:A:125:LEU:HD23	2	0.14	0.02	0.14
(3,2049)	1:A:97:LYS:HG2	1:A:98:LEU:H	2	0.14	0.0	0.14
(3,2049)	1:A:97:LYS:HG3	1:A:98:LEU:H	2	0.14	0.0	0.14
(3,5)	1:A:32:ALA:H	1:A:34:GLY:H	2	0.14	0.02	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(3,734)	1:A:26:ALA:HA	1:A:29:MET:HB3	2	0.14	0.02	0.14
(3,1031)	1:A:25:ALA:HB1	1:A:128:LYS:HE2	2	0.14	0.01	0.14
(3,1031)	1:A:25:ALA:HB1	1:A:128:LYS:HE3	2	0.14	0.01	0.14
(3,1031)	1:A:25:ALA:HB2	1:A:128:LYS:HE2	2	0.14	0.01	0.14
(3,1031)	1:A:25:ALA:HB2	1:A:128:LYS:HE3	2	0.14	0.01	0.14
(3,1031)	1:A:25:ALA:HB3	1:A:128:LYS:HE2	2	0.14	0.01	0.14
(3,1031)	1:A:25:ALA:HB3	1:A:128:LYS:HE3	2	0.14	0.01	0.14
(3,1216)	1:A:11:ALA:HB1	1:A:80:LEU:HB2	2	0.14	0.01	0.14
(3,1216)	1:A:11:ALA:HB2	1:A:80:LEU:HB2	2	0.14	0.01	0.14
(3,1216)	1:A:11:ALA:HB3	1:A:80:LEU:HB2	2	0.14	0.01	0.14
(3,1603)	1:A:12:ARG:HD2	1:A:80:LEU:HD11	2	0.14	0.01	0.14
(3,1603)	1:A:12:ARG:HD2	1:A:80:LEU:HD12	2	0.14	0.01	0.14
(3,1603)	1:A:12:ARG:HD2	1:A:80:LEU:HD13	2	0.14	0.01	0.14
(3,1603)	1:A:12:ARG:HD2	1:A:80:LEU:HD21	2	0.14	0.01	0.14
(3,1603)	1:A:12:ARG:HD2	1:A:80:LEU:HD22	2	0.14	0.01	0.14
(3,1603)	1:A:12:ARG:HD2	1:A:80:LEU:HD23	2	0.14	0.01	0.14
(3,1603)	1:A:12:ARG:HD3	1:A:80:LEU:HD11	2	0.14	0.01	0.14
(3,1603)	1:A:12:ARG:HD3	1:A:80:LEU:HD12	2	0.14	0.01	0.14
(3,1603)	1:A:12:ARG:HD3	1:A:80:LEU:HD13	2	0.14	0.01	0.14
(3,1603)	1:A:12:ARG:HD3	1:A:80:LEU:HD21	2	0.14	0.01	0.14
(3,1603)	1:A:12:ARG:HD3	1:A:80:LEU:HD22	2	0.14	0.01	0.14
(3,1603)	1:A:12:ARG:HD3	1:A:80:LEU:HD23	2	0.14	0.01	0.14
(3,1715)	1:A:26:ALA:HA	1:A:125:LEU:HD11	2	0.14	0.02	0.14
(3,1715)	1:A:26:ALA:HA	1:A:125:LEU:HD12	2	0.14	0.02	0.14
(3,1715)	1:A:26:ALA:HA	1:A:125:LEU:HD13	2	0.14	0.02	0.14
(3,1715)	1:A:26:ALA:HA	1:A:125:LEU:HD21	2	0.14	0.02	0.14
(3,1715)	1:A:26:ALA:HA	1:A:125:LEU:HD22	2	0.14	0.02	0.14
(3,1715)	1:A:26:ALA:HA	1:A:125:LEU:HD23	2	0.14	0.02	0.14
(3,1735)	1:A:29:MET:HG2	1:A:125:LEU:HD11	2	0.14	0.02	0.14
(3,1735)	1:A:29:MET:HG2	1:A:125:LEU:HD12	2	0.14	0.02	0.14
(3,1735)	1:A:29:MET:HG2	1:A:125:LEU:HD13	2	0.14	0.02	0.14
(3,1735)	1:A:29:MET:HG2	1:A:125:LEU:HD21	2	0.14	0.02	0.14
(3,1735)	1:A:29:MET:HG2	1:A:125:LEU:HD22	2	0.14	0.02	0.14
(3,1735)	1:A:29:MET:HG2	1:A:125:LEU:HD23	2	0.14	0.02	0.14
(3,1735)	1:A:29:MET:HG3	1:A:125:LEU:HD11	2	0.14	0.02	0.14
(3,1735)	1:A:29:MET:HG3	1:A:125:LEU:HD12	2	0.14	0.02	0.14
(3,1735)	1:A:29:MET:HG3	1:A:125:LEU:HD13	2	0.14	0.02	0.14
(3,1735)	1:A:29:MET:HG3	1:A:125:LEU:HD21	2	0.14	0.02	0.14
(3,1735)	1:A:29:MET:HG3	1:A:125:LEU:HD22	2	0.14	0.02	0.14
(3,1735)	1:A:29:MET:HG3	1:A:125:LEU:HD23	2	0.14	0.02	0.14
(3,227)	1:A:50:LEU:HG	1:A:123:ALA:H	2	0.13	0.02	0.13
(3,1051)	1:A:87:MET:HE1	1:A:133:MET:HA	2	0.13	0.01	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(3,1051)	1:A:87:MET:HE2	1:A:133:MET:HA	2	0.13	0.01	0.13
(3,1051)	1:A:87:MET:HE3	1:A:133:MET:HA	2	0.13	0.01	0.13
(3,1332)	1:A:65:GLU:HG3	1:A:66:VAL:HB	2	0.13	0.02	0.13
(3,390)	1:A:98:LEU:HB2	1:A:99:PHE:H	2	0.12	0.02	0.12
(3,409)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:HIS:HB3	2	0.12	0.01	0.12
(3,704)	1:A:50:LEU:H	1:A:50:LEU:HG	2	0.12	0.01	0.12
(3,1425)	1:A:108:PRO:HB2	1:A:109:PRO:HD3	2	0.12	0.01	0.12
(3,1504)	1:A:42:GLU:HA	1:A:42:GLU:HG2	2	0.12	0.01	0.12
(3,1776)	1:A:40:VAL:HG11	1:A:56:LYS:HG2	2	0.12	0.02	0.12
(3,1776)	1:A:40:VAL:HG11	1:A:56:LYS:HG3	2	0.12	0.02	0.12
(3,1776)	1:A:40:VAL:HG12	1:A:56:LYS:HG2	2	0.12	0.02	0.12
(3,1776)	1:A:40:VAL:HG12	1:A:56:LYS:HG3	2	0.12	0.02	0.12
(3,1776)	1:A:40:VAL:HG13	1:A:56:LYS:HG2	2	0.12	0.02	0.12
(3,1776)	1:A:40:VAL:HG13	1:A:56:LYS:HG3	2	0.12	0.02	0.12
(3,1776)	1:A:40:VAL:HG21	1:A:56:LYS:HG2	2	0.12	0.02	0.12
(3,1776)	1:A:40:VAL:HG21	1:A:56:LYS:HG3	2	0.12	0.02	0.12
(3,1776)	1:A:40:VAL:HG22	1:A:56:LYS:HG2	2	0.12	0.02	0.12
(3,1776)	1:A:40:VAL:HG22	1:A:56:LYS:HG3	2	0.12	0.02	0.12
(3,1776)	1:A:40:VAL:HG23	1:A:56:LYS:HG2	2	0.12	0.02	0.12
(3,1776)	1:A:40:VAL:HG23	1:A:56:LYS:HG3	2	0.12	0.02	0.12
(3,1798)	1:A:43:LEU:H	1:A:59:LEU:HD11	2	0.12	0.02	0.12
(3,1798)	1:A:43:LEU:H	1:A:59:LEU:HD12	2	0.12	0.02	0.12
(3,1798)	1:A:43:LEU:H	1:A:59:LEU:HD13	2	0.12	0.02	0.12
(3,1798)	1:A:43:LEU:H	1:A:59:LEU:HD21	2	0.12	0.02	0.12
(3,1798)	1:A:43:LEU:H	1:A:59:LEU:HD22	2	0.12	0.02	0.12
(3,1798)	1:A:43:LEU:H	1:A:59:LEU:HD23	2	0.12	0.02	0.12
(3,1800)	1:A:43:LEU:HA	1:A:46:VAL:HG11	2	0.12	0.02	0.12
(3,1800)	1:A:43:LEU:HA	1:A:46:VAL:HG12	2	0.12	0.02	0.12
(3,1800)	1:A:43:LEU:HA	1:A:46:VAL:HG13	2	0.12	0.02	0.12
(3,1800)	1:A:43:LEU:HA	1:A:46:VAL:HG21	2	0.12	0.02	0.12
(3,1800)	1:A:43:LEU:HA	1:A:46:VAL:HG22	2	0.12	0.02	0.12
(3,1800)	1:A:43:LEU:HA	1:A:46:VAL:HG23	2	0.12	0.02	0.12
(3,2025)	1:A:88:LYS:HB2	1:A:88:LYS:HE2	2	0.12	0.01	0.12
(3,2025)	1:A:88:LYS:HB2	1:A:88:LYS:HE3	2	0.12	0.01	0.12
(3,2025)	1:A:88:LYS:HB3	1:A:88:LYS:HE2	2	0.12	0.01	0.12
(3,2025)	1:A:88:LYS:HB3	1:A:88:LYS:HE3	2	0.12	0.01	0.12
(3,748)	1:A:97:LYS:HG3	1:A:98:LEU:H	2	0.12	0.0	0.12
(3,864)	1:A:52:GLN:HA	1:A:53:THR:HG21	2	0.12	0.01	0.12
(3,864)	1:A:52:GLN:HA	1:A:53:THR:HG22	2	0.12	0.01	0.12
(3,864)	1:A:52:GLN:HA	1:A:53:THR:HG23	2	0.12	0.01	0.12
(3,1991)	1:A:84:VAL:HG11	1:A:135:LEU:HB2	2	0.12	0.01	0.12
(3,1991)	1:A:84:VAL:HG11	1:A:135:LEU:HB3	2	0.12	0.01	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

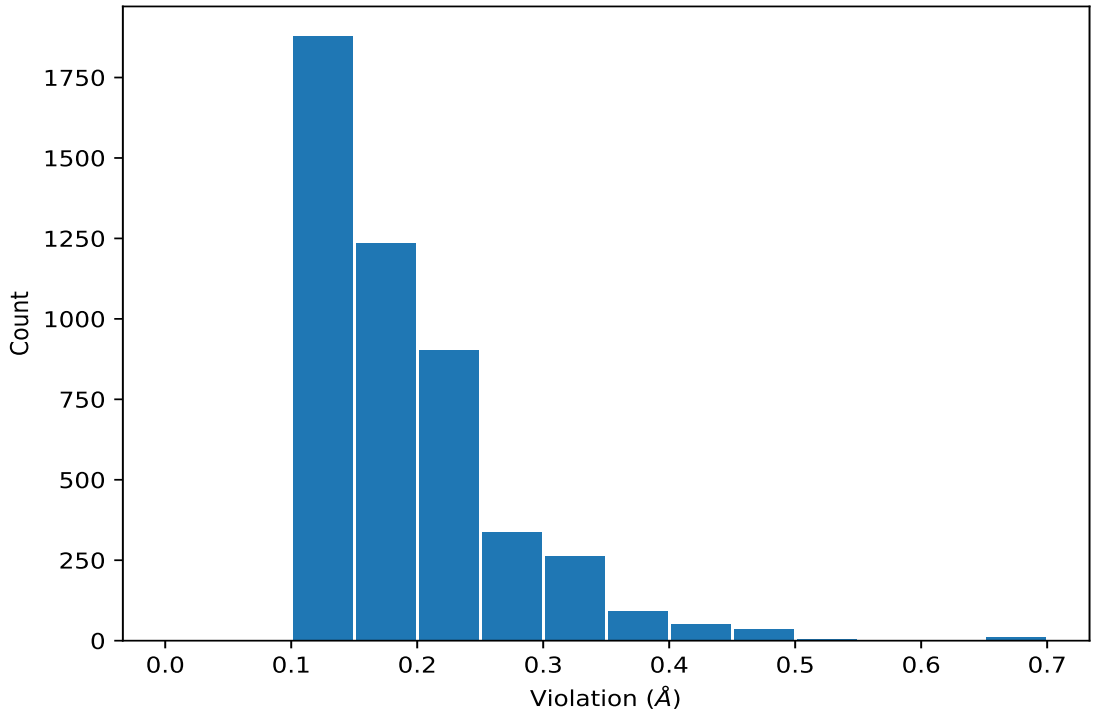
Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(3,1991)	1:A:84:VAL:HG12	1:A:135:LEU:HB2	2	0.12	0.01	0.12
(3,1991)	1:A:84:VAL:HG12	1:A:135:LEU:HB3	2	0.12	0.01	0.12
(3,1991)	1:A:84:VAL:HG13	1:A:135:LEU:HB2	2	0.12	0.01	0.12
(3,1991)	1:A:84:VAL:HG13	1:A:135:LEU:HB3	2	0.12	0.01	0.12
(3,1991)	1:A:84:VAL:HG21	1:A:135:LEU:HB2	2	0.12	0.01	0.12
(3,1991)	1:A:84:VAL:HG21	1:A:135:LEU:HB3	2	0.12	0.01	0.12
(3,1991)	1:A:84:VAL:HG22	1:A:135:LEU:HB2	2	0.12	0.01	0.12
(3,1991)	1:A:84:VAL:HG22	1:A:135:LEU:HB3	2	0.12	0.01	0.12
(3,1991)	1:A:84:VAL:HG23	1:A:135:LEU:HB2	2	0.12	0.01	0.12
(3,1991)	1:A:84:VAL:HG23	1:A:135:LEU:HB3	2	0.12	0.01	0.12
(3,181)	1:A:99:PHE:HA	1:A:100:ASP:H	2	0.12	0.0	0.12
(3,818)	1:A:125:LEU:H	1:A:125:LEU:HD21	2	0.12	0.0	0.12
(3,818)	1:A:125:LEU:H	1:A:125:LEU:HD22	2	0.12	0.0	0.12
(3,818)	1:A:125:LEU:H	1:A:125:LEU:HD23	2	0.12	0.0	0.12
(3,1370)	1:A:114:ARG:H	1:A:114:ARG:HB3	2	0.12	0.0	0.12
(3,1444)	1:A:71:SER:HA	1:A:73:THR:HG21	2	0.12	0.0	0.12
(3,1444)	1:A:71:SER:HA	1:A:73:THR:HG22	2	0.12	0.0	0.12
(3,1444)	1:A:71:SER:HA	1:A:73:THR:HG23	2	0.12	0.0	0.12
(3,1884)	1:A:54:PRO:HB2	1:A:58:GLU:HG2	2	0.12	0.0	0.12
(3,1884)	1:A:54:PRO:HB2	1:A:58:GLU:HG3	2	0.12	0.0	0.12
(3,1884)	1:A:54:PRO:HB3	1:A:58:GLU:HG2	2	0.12	0.0	0.12
(3,1884)	1:A:54:PRO:HB3	1:A:58:GLU:HG3	2	0.12	0.0	0.12
(3,1392)	1:A:46:VAL:HA	1:A:49:MET:HG2	2	0.11	0.0	0.11

[1]Number of violated models, [2]Standard deviation

9.5 All violated distance restraints (i)

9.5.1 Histogram : Distribution of distance violations (i)

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



9.5.2 Table : All distance violations (i)

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

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,55)	1:A:113:VAL:HA	1:A:114:ARG:H	25	0.66
(3,1079)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:49:MET:HE1	21	0.66
(3,1079)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:49:MET:HE2	21	0.66
(3,1079)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:49:MET:HE3	21	0.66
(3,1079)	1:A:46:VAL:HG12	1:A:49:MET:HE1	21	0.66
(3,1079)	1:A:46:VAL:HG12	1:A:49:MET:HE2	21	0.66
(3,1079)	1:A:46:VAL:HG12	1:A:49:MET:HE3	21	0.66
(3,1079)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:49:MET:HE1	21	0.66
(3,1079)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:49:MET:HE2	21	0.66
(3,1079)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:49:MET:HE3	21	0.66
(3,659)	1:A:101:LEU:H	1:A:101:LEU:HG	14	0.63
(3,55)	1:A:113:VAL:HA	1:A:114:ARG:H	8	0.58
(3,1067)	1:A:82:MET:HB2	1:A:82:MET:HE1	10	0.52
(3,1067)	1:A:82:MET:HB2	1:A:82:MET:HE2	10	0.52
(3,1067)	1:A:82:MET:HB2	1:A:82:MET:HE3	10	0.52
(3,1067)	1:A:82:MET:HB3	1:A:82:MET:HE1	10	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,1067)	1:A:82:MET:HB3	1:A:82:MET:HE2	10	0.52
(3,1067)	1:A:82:MET:HB3	1:A:82:MET:HE3	10	0.52
(3,524)	1:A:71:SER:H	1:A:72:GLY:H	3	0.47
(3,524)	1:A:71:SER:H	1:A:72:GLY:H	6	0.47
(3,524)	1:A:71:SER:H	1:A:72:GLY:H	11	0.47
(3,524)	1:A:71:SER:H	1:A:72:GLY:H	13	0.47
(3,1185)	1:A:139:LEU:HB2	1:A:140:LYS:HG2	17	0.47
(3,1185)	1:A:139:LEU:HB2	1:A:140:LYS:HG3	17	0.47
(3,524)	1:A:71:SER:H	1:A:72:GLY:H	8	0.46
(3,524)	1:A:71:SER:H	1:A:72:GLY:H	10	0.46
(3,524)	1:A:71:SER:H	1:A:72:GLY:H	17	0.46
(3,524)	1:A:71:SER:H	1:A:72:GLY:H	18	0.46
(3,524)	1:A:71:SER:H	1:A:72:GLY:H	24	0.46
(3,524)	1:A:71:SER:H	1:A:72:GLY:H	25	0.46
(3,2089)	1:A:113:VAL:HG11	1:A:114:ARG:HB2	21	0.46
(3,2089)	1:A:113:VAL:HG11	1:A:114:ARG:HB3	21	0.46
(3,2089)	1:A:113:VAL:HG12	1:A:114:ARG:HB2	21	0.46
(3,2089)	1:A:113:VAL:HG12	1:A:114:ARG:HB3	21	0.46
(3,2089)	1:A:113:VAL:HG13	1:A:114:ARG:HB2	21	0.46
(3,2089)	1:A:113:VAL:HG13	1:A:114:ARG:HB3	21	0.46
(3,2089)	1:A:113:VAL:HG21	1:A:114:ARG:HB2	21	0.46
(3,2089)	1:A:113:VAL:HG21	1:A:114:ARG:HB3	21	0.46
(3,2089)	1:A:113:VAL:HG22	1:A:114:ARG:HB2	21	0.46
(3,2089)	1:A:113:VAL:HG22	1:A:114:ARG:HB3	21	0.46
(3,2089)	1:A:113:VAL:HG23	1:A:114:ARG:HB2	21	0.46
(3,2089)	1:A:113:VAL:HG23	1:A:114:ARG:HB3	21	0.46
(3,524)	1:A:71:SER:H	1:A:72:GLY:H	20	0.45
(3,524)	1:A:71:SER:H	1:A:72:GLY:H	23	0.45
(3,1066)	1:A:29:MET:HE1	1:A:83:MET:HE1	15	0.45
(3,1066)	1:A:29:MET:HE1	1:A:83:MET:HE2	15	0.45
(3,1066)	1:A:29:MET:HE1	1:A:83:MET:HE3	15	0.45
(3,1066)	1:A:29:MET:HE2	1:A:83:MET:HE1	15	0.45
(3,1066)	1:A:29:MET:HE2	1:A:83:MET:HE2	15	0.45
(3,1066)	1:A:29:MET:HE2	1:A:83:MET:HE3	15	0.45
(3,1066)	1:A:29:MET:HE3	1:A:83:MET:HE1	15	0.45
(3,1066)	1:A:29:MET:HE3	1:A:83:MET:HE2	15	0.45
(3,1066)	1:A:29:MET:HE3	1:A:83:MET:HE3	15	0.45
(3,811)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD21	18	0.43
(3,811)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD22	18	0.43
(3,811)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD23	18	0.43
(3,691)	1:A:143:LYS:HA	1:A:143:LYS:HE2	16	0.43
(3,691)	1:A:143:LYS:HA	1:A:143:LYS:HE3	16	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,825)	1:A:39:SER:H	1:A:73:THR:HG21	16	0.42
(3,825)	1:A:39:SER:H	1:A:73:THR:HG22	16	0.42
(3,825)	1:A:39:SER:H	1:A:73:THR:HG23	16	0.42
(3,811)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD21	16	0.42
(3,811)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD22	16	0.42
(3,811)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD23	16	0.42
(3,524)	1:A:71:SER:H	1:A:72:GLY:H	16	0.42
(3,524)	1:A:71:SER:H	1:A:72:GLY:H	19	0.42
(3,811)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD21	3	0.41
(3,811)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD22	3	0.41
(3,811)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD23	3	0.41
(3,811)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD21	21	0.41
(3,811)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD22	21	0.41
(3,811)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD23	21	0.41
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG11	1:A:85:ARG:HD2	21	0.41
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG11	1:A:85:ARG:HD3	21	0.41
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG12	1:A:85:ARG:HD2	21	0.41
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG12	1:A:85:ARG:HD3	21	0.41
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG13	1:A:85:ARG:HD2	21	0.41
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG13	1:A:85:ARG:HD3	21	0.41
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG21	1:A:85:ARG:HD2	21	0.41
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG21	1:A:85:ARG:HD3	21	0.41
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG22	1:A:85:ARG:HD2	21	0.41
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG22	1:A:85:ARG:HD3	21	0.41
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG23	1:A:85:ARG:HD2	21	0.41
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG23	1:A:85:ARG:HD3	21	0.41
(3,179)	1:A:139:LEU:H	1:A:140:LYS:H	17	0.41
(3,1153)	1:A:114:ARG:HA	1:A:114:ARG:HD3	24	0.41
(3,811)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD21	5	0.4
(3,811)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD22	5	0.4
(3,811)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD23	5	0.4
(3,662)	1:A:136:ARG:HA	1:A:137:ALA:H	18	0.4
(3,55)	1:A:113:VAL:HA	1:A:114:ARG:H	21	0.4
(3,47)	1:A:142:VAL:HA	1:A:143:LYS:H	23	0.4
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG11	1:A:88:LYS:HG2	22	0.4
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG11	1:A:88:LYS:HG3	22	0.4
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG12	1:A:88:LYS:HG2	22	0.4
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG12	1:A:88:LYS:HG3	22	0.4
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG13	1:A:88:LYS:HG2	22	0.4
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG13	1:A:88:LYS:HG3	22	0.4
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG21	1:A:88:LYS:HG2	22	0.4
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG21	1:A:88:LYS:HG3	22	0.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG22	1:A:88:LYS:HG2	22	0.4
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG22	1:A:88:LYS:HG3	22	0.4
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG23	1:A:88:LYS:HG2	22	0.4
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG23	1:A:88:LYS:HG3	22	0.4
(3,27)	1:A:35:GLY:H	1:A:36:GLY:H	20	0.39
(3,127)	1:A:106:LYS:HA	1:A:107:ARG:H	13	0.39
(3,1153)	1:A:114:ARG:HA	1:A:114:ARG:HD3	14	0.39
(3,811)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD21	4	0.38
(3,811)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD22	4	0.38
(3,811)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD23	4	0.38
(3,811)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD21	6	0.38
(3,811)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD22	6	0.38
(3,811)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD23	6	0.38
(3,2109)	1:A:117:ALA:HA	1:A:121:LEU:HD11	23	0.38
(3,2109)	1:A:117:ALA:HA	1:A:121:LEU:HD12	23	0.38
(3,2109)	1:A:117:ALA:HA	1:A:121:LEU:HD13	23	0.38
(3,2109)	1:A:117:ALA:HA	1:A:121:LEU:HD21	23	0.38
(3,2109)	1:A:117:ALA:HA	1:A:121:LEU:HD22	23	0.38
(3,2109)	1:A:117:ALA:HA	1:A:121:LEU:HD23	23	0.38
(3,907)	1:A:32:ALA:HB1	1:A:33:ASP:HA	5	0.37
(3,907)	1:A:32:ALA:HB2	1:A:33:ASP:HA	5	0.37
(3,907)	1:A:32:ALA:HB3	1:A:33:ASP:HA	5	0.37
(3,811)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD21	22	0.37
(3,811)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD22	22	0.37
(3,811)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD23	22	0.37
(3,811)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD21	23	0.37
(3,811)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD22	23	0.37
(3,811)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD23	23	0.37
(3,790)	1:A:40:VAL:HG11	1:A:56:LYS:HE2	12	0.37
(3,790)	1:A:40:VAL:HG11	1:A:56:LYS:HE3	12	0.37
(3,790)	1:A:40:VAL:HG12	1:A:56:LYS:HE2	12	0.37
(3,790)	1:A:40:VAL:HG12	1:A:56:LYS:HE3	12	0.37
(3,790)	1:A:40:VAL:HG13	1:A:56:LYS:HE2	12	0.37
(3,790)	1:A:40:VAL:HG13	1:A:56:LYS:HE3	12	0.37
(3,1977)	1:A:84:VAL:HB	1:A:88:LYS:HB2	15	0.37
(3,1977)	1:A:84:VAL:HB	1:A:88:LYS:HB3	15	0.37
(3,1239)	1:A:52:GLN:HA	1:A:53:THR:HB	12	0.37
(3,1153)	1:A:114:ARG:HA	1:A:114:ARG:HD3	5	0.37
(3,1153)	1:A:114:ARG:HA	1:A:114:ARG:HD3	6	0.37
(3,811)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD21	9	0.36
(3,811)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD22	9	0.36
(3,811)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD23	9	0.36

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,811)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD21	10	0.36
(3,811)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD22	10	0.36
(3,811)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD23	10	0.36
(3,47)	1:A:142:VAL:HA	1:A:143:LYS:H	24	0.36
(3,2061)	1:A:101:LEU:HA	1:A:101:LEU:HD11	3	0.36
(3,2061)	1:A:101:LEU:HA	1:A:101:LEU:HD12	3	0.36
(3,2061)	1:A:101:LEU:HA	1:A:101:LEU:HD13	3	0.36
(3,2061)	1:A:101:LEU:HA	1:A:101:LEU:HD21	3	0.36
(3,2061)	1:A:101:LEU:HA	1:A:101:LEU:HD22	3	0.36
(3,2061)	1:A:101:LEU:HA	1:A:101:LEU:HD23	3	0.36
(3,1977)	1:A:84:VAL:HB	1:A:88:LYS:HB2	8	0.36
(3,1977)	1:A:84:VAL:HB	1:A:88:LYS:HB3	8	0.36
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:124:LEU:HA	18	0.36
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG12	1:A:124:LEU:HA	18	0.36
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:124:LEU:HA	18	0.36
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:124:LEU:HA	18	0.36
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:124:LEU:HA	18	0.36
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:124:LEU:HA	18	0.36
(3,811)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD21	8	0.35
(3,811)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD22	8	0.35
(3,811)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD23	8	0.35
(3,811)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD21	13	0.35
(3,811)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD22	13	0.35
(3,811)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD23	13	0.35
(3,688)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD11	12	0.35
(3,688)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD12	12	0.35
(3,688)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD13	12	0.35
(3,2061)	1:A:101:LEU:HA	1:A:101:LEU:HD11	18	0.35
(3,2061)	1:A:101:LEU:HA	1:A:101:LEU:HD12	18	0.35
(3,2061)	1:A:101:LEU:HA	1:A:101:LEU:HD13	18	0.35
(3,2061)	1:A:101:LEU:HA	1:A:101:LEU:HD21	18	0.35
(3,2061)	1:A:101:LEU:HA	1:A:101:LEU:HD22	18	0.35
(3,2061)	1:A:101:LEU:HA	1:A:101:LEU:HD23	18	0.35
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG11	1:A:88:LYS:HG2	25	0.35
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG11	1:A:88:LYS:HG3	25	0.35
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG12	1:A:88:LYS:HG2	25	0.35
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG12	1:A:88:LYS:HG3	25	0.35
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG13	1:A:88:LYS:HG2	25	0.35
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG13	1:A:88:LYS:HG3	25	0.35
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG21	1:A:88:LYS:HG2	25	0.35
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG21	1:A:88:LYS:HG3	25	0.35
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG22	1:A:88:LYS:HG2	25	0.35

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG22	1:A:88:LYS:HG3	25	0.35
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG23	1:A:88:LYS:HG2	25	0.35
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG23	1:A:88:LYS:HG3	25	0.35
(3,1066)	1:A:29:MET:HE1	1:A:83:MET:HE1	13	0.35
(3,1066)	1:A:29:MET:HE1	1:A:83:MET:HE2	13	0.35
(3,1066)	1:A:29:MET:HE1	1:A:83:MET:HE3	13	0.35
(3,1066)	1:A:29:MET:HE2	1:A:83:MET:HE1	13	0.35
(3,1066)	1:A:29:MET:HE2	1:A:83:MET:HE2	13	0.35
(3,1066)	1:A:29:MET:HE2	1:A:83:MET:HE3	13	0.35
(3,1066)	1:A:29:MET:HE3	1:A:83:MET:HE1	13	0.35
(3,1066)	1:A:29:MET:HE3	1:A:83:MET:HE2	13	0.35
(3,1066)	1:A:29:MET:HE3	1:A:83:MET:HE3	13	0.35
(3,55)	1:A:113:VAL:HA	1:A:114:ARG:H	19	0.34
(3,2061)	1:A:101:LEU:HA	1:A:101:LEU:HD11	11	0.34
(3,2061)	1:A:101:LEU:HA	1:A:101:LEU:HD12	11	0.34
(3,2061)	1:A:101:LEU:HA	1:A:101:LEU:HD13	11	0.34
(3,2061)	1:A:101:LEU:HA	1:A:101:LEU:HD21	11	0.34
(3,2061)	1:A:101:LEU:HA	1:A:101:LEU:HD22	11	0.34
(3,2061)	1:A:101:LEU:HA	1:A:101:LEU:HD23	11	0.34
(3,2061)	1:A:101:LEU:HA	1:A:101:LEU:HD11	15	0.34
(3,2061)	1:A:101:LEU:HA	1:A:101:LEU:HD12	15	0.34
(3,2061)	1:A:101:LEU:HA	1:A:101:LEU:HD13	15	0.34
(3,2061)	1:A:101:LEU:HA	1:A:101:LEU:HD21	15	0.34
(3,2061)	1:A:101:LEU:HA	1:A:101:LEU:HD22	15	0.34
(3,2061)	1:A:101:LEU:HA	1:A:101:LEU:HD23	15	0.34
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG11	1:A:88:LYS:HE2	19	0.34
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG11	1:A:88:LYS:HE3	19	0.34
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG12	1:A:88:LYS:HE2	19	0.34
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG12	1:A:88:LYS:HE3	19	0.34
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG13	1:A:88:LYS:HE2	19	0.34
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG13	1:A:88:LYS:HE3	19	0.34
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG21	1:A:88:LYS:HE2	19	0.34
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG21	1:A:88:LYS:HE3	19	0.34
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG22	1:A:88:LYS:HE2	19	0.34
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG22	1:A:88:LYS:HE3	19	0.34
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG23	1:A:88:LYS:HE2	19	0.34
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG23	1:A:88:LYS:HE3	19	0.34
(3,1977)	1:A:84:VAL:HB	1:A:88:LYS:HB2	2	0.34
(3,1977)	1:A:84:VAL:HB	1:A:88:LYS:HB3	2	0.34
(3,197)	1:A:109:PRO:HA	1:A:110:LEU:H	18	0.34
(3,1581)	1:A:9:ALA:HA	1:A:12:ARG:HB2	17	0.34
(3,1581)	1:A:9:ALA:HA	1:A:12:ARG:HB3	17	0.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,1066)	1:A:29:MET:HE1	1:A:83:MET:HE1	12	0.34
(3,1066)	1:A:29:MET:HE1	1:A:83:MET:HE2	12	0.34
(3,1066)	1:A:29:MET:HE1	1:A:83:MET:HE3	12	0.34
(3,1066)	1:A:29:MET:HE2	1:A:83:MET:HE1	12	0.34
(3,1066)	1:A:29:MET:HE2	1:A:83:MET:HE2	12	0.34
(3,1066)	1:A:29:MET:HE2	1:A:83:MET:HE3	12	0.34
(3,1066)	1:A:29:MET:HE3	1:A:83:MET:HE1	12	0.34
(3,1066)	1:A:29:MET:HE3	1:A:83:MET:HE2	12	0.34
(3,1066)	1:A:29:MET:HE3	1:A:83:MET:HE3	12	0.34
(3,10)	1:A:52:GLN:HB2	1:A:53:THR:H	25	0.34
(3,907)	1:A:32:ALA:HB1	1:A:33:ASP:HA	20	0.33
(3,907)	1:A:32:ALA:HB2	1:A:33:ASP:HA	20	0.33
(3,907)	1:A:32:ALA:HB3	1:A:33:ASP:HA	20	0.33
(3,811)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD21	15	0.33
(3,811)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD22	15	0.33
(3,811)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD23	15	0.33
(3,688)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD11	11	0.33
(3,688)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD12	11	0.33
(3,688)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD13	11	0.33
(3,2061)	1:A:101:LEU:HA	1:A:101:LEU:HD11	16	0.33
(3,2061)	1:A:101:LEU:HA	1:A:101:LEU:HD12	16	0.33
(3,2061)	1:A:101:LEU:HA	1:A:101:LEU:HD13	16	0.33
(3,2061)	1:A:101:LEU:HA	1:A:101:LEU:HD21	16	0.33
(3,2061)	1:A:101:LEU:HA	1:A:101:LEU:HD22	16	0.33
(3,2061)	1:A:101:LEU:HA	1:A:101:LEU:HD23	16	0.33
(3,197)	1:A:109:PRO:HA	1:A:110:LEU:H	25	0.33
(3,1745)	1:A:30:PHE:HB2	1:A:46:VAL:H	22	0.33
(3,1745)	1:A:30:PHE:HB3	1:A:46:VAL:H	22	0.33
(3,1732)	1:A:29:MET:HG2	1:A:83:MET:HE1	23	0.33
(3,1732)	1:A:29:MET:HG2	1:A:83:MET:HE2	23	0.33
(3,1732)	1:A:29:MET:HG2	1:A:83:MET:HE3	23	0.33
(3,1732)	1:A:29:MET:HG3	1:A:83:MET:HE1	23	0.33
(3,1732)	1:A:29:MET:HG3	1:A:83:MET:HE2	23	0.33
(3,1732)	1:A:29:MET:HG3	1:A:83:MET:HE3	23	0.33
(3,1525)	1:A:144:LYS:HA	1:A:144:LYS:HD2	6	0.33
(3,1525)	1:A:144:LYS:HA	1:A:144:LYS:HD3	6	0.33
(3,1153)	1:A:114:ARG:HA	1:A:114:ARG:HD3	11	0.33
(3,825)	1:A:39:SER:H	1:A:73:THR:HG21	22	0.32
(3,825)	1:A:39:SER:H	1:A:73:THR:HG22	22	0.32
(3,825)	1:A:39:SER:H	1:A:73:THR:HG23	22	0.32
(3,811)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD21	20	0.32
(3,811)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD22	20	0.32

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,811)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD23	20	0.32
(3,811)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD21	25	0.32
(3,811)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD22	25	0.32
(3,811)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD23	25	0.32
(3,688)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD11	17	0.32
(3,688)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD12	17	0.32
(3,688)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD13	17	0.32
(3,659)	1:A:101:LEU:H	1:A:101:LEU:HG	12	0.32
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG11	1:A:88:LYS:HG2	21	0.32
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG11	1:A:88:LYS:HG3	21	0.32
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG12	1:A:88:LYS:HG2	21	0.32
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG12	1:A:88:LYS:HG3	21	0.32
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG13	1:A:88:LYS:HG2	21	0.32
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG13	1:A:88:LYS:HG3	21	0.32
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG21	1:A:88:LYS:HG2	21	0.32
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG21	1:A:88:LYS:HG3	21	0.32
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG22	1:A:88:LYS:HG2	21	0.32
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG22	1:A:88:LYS:HG3	21	0.32
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG23	1:A:88:LYS:HG2	21	0.32
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG23	1:A:88:LYS:HG3	21	0.32
(3,1987)	1:A:84:VAL:HG11	1:A:88:LYS:HB2	20	0.32
(3,1987)	1:A:84:VAL:HG11	1:A:88:LYS:HB3	20	0.32
(3,1987)	1:A:84:VAL:HG12	1:A:88:LYS:HB2	20	0.32
(3,1987)	1:A:84:VAL:HG12	1:A:88:LYS:HB3	20	0.32
(3,1987)	1:A:84:VAL:HG13	1:A:88:LYS:HB2	20	0.32
(3,1987)	1:A:84:VAL:HG13	1:A:88:LYS:HB3	20	0.32
(3,1987)	1:A:84:VAL:HG21	1:A:88:LYS:HB2	20	0.32
(3,1987)	1:A:84:VAL:HG21	1:A:88:LYS:HB3	20	0.32
(3,1987)	1:A:84:VAL:HG22	1:A:88:LYS:HB2	20	0.32
(3,1987)	1:A:84:VAL:HG22	1:A:88:LYS:HB3	20	0.32
(3,1987)	1:A:84:VAL:HG23	1:A:88:LYS:HB2	20	0.32
(3,1987)	1:A:84:VAL:HG23	1:A:88:LYS:HB3	20	0.32
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD11	19	0.32
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD12	19	0.32
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD13	19	0.32
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD21	19	0.32
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD22	19	0.32
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD23	19	0.32
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD11	19	0.32
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD12	19	0.32
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD13	19	0.32
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD21	19	0.32

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD22	19	0.32
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD23	19	0.32
(3,111)	1:A:100:ASP:HA	1:A:101:LEU:H	18	0.32
(3,879)	1:A:142:VAL:HG21	1:A:143:LYS:HE2	15	0.31
(3,879)	1:A:142:VAL:HG21	1:A:143:LYS:HE3	15	0.31
(3,879)	1:A:142:VAL:HG22	1:A:143:LYS:HE2	15	0.31
(3,879)	1:A:142:VAL:HG22	1:A:143:LYS:HE3	15	0.31
(3,879)	1:A:142:VAL:HG23	1:A:143:LYS:HE2	15	0.31
(3,879)	1:A:142:VAL:HG23	1:A:143:LYS:HE3	15	0.31
(3,879)	1:A:142:VAL:HG21	1:A:143:LYS:HE2	18	0.31
(3,879)	1:A:142:VAL:HG21	1:A:143:LYS:HE3	18	0.31
(3,879)	1:A:142:VAL:HG22	1:A:143:LYS:HE2	18	0.31
(3,879)	1:A:142:VAL:HG22	1:A:143:LYS:HE3	18	0.31
(3,879)	1:A:142:VAL:HG23	1:A:143:LYS:HE2	18	0.31
(3,879)	1:A:142:VAL:HG23	1:A:143:LYS:HE3	18	0.31
(3,752)	1:A:41:LYS:HG3	1:A:42:GLU:H	5	0.31
(3,688)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD11	2	0.31
(3,688)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD12	2	0.31
(3,688)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD13	2	0.31
(3,519)	1:A:138:ASN:H	1:A:139:LEU:H	9	0.31
(3,4)	1:A:34:GLY:H	1:A:35:GLY:H	24	0.31
(3,2210)	1:A:141:GLN:HG2	1:A:142:VAL:HG11	10	0.31
(3,2210)	1:A:141:GLN:HG2	1:A:142:VAL:HG12	10	0.31
(3,2210)	1:A:141:GLN:HG2	1:A:142:VAL:HG13	10	0.31
(3,2210)	1:A:141:GLN:HG2	1:A:142:VAL:HG21	10	0.31
(3,2210)	1:A:141:GLN:HG2	1:A:142:VAL:HG22	10	0.31
(3,2210)	1:A:141:GLN:HG2	1:A:142:VAL:HG23	10	0.31
(3,2210)	1:A:141:GLN:HG3	1:A:142:VAL:HG11	10	0.31
(3,2210)	1:A:141:GLN:HG3	1:A:142:VAL:HG12	10	0.31
(3,2210)	1:A:141:GLN:HG3	1:A:142:VAL:HG13	10	0.31
(3,2210)	1:A:141:GLN:HG3	1:A:142:VAL:HG21	10	0.31
(3,2210)	1:A:141:GLN:HG3	1:A:142:VAL:HG22	10	0.31
(3,2210)	1:A:141:GLN:HG3	1:A:142:VAL:HG23	10	0.31
(3,2059)	1:A:101:LEU:H	1:A:101:LEU:HB2	20	0.31
(3,2059)	1:A:101:LEU:H	1:A:101:LEU:HB3	20	0.31
(3,200)	1:A:109:PRO:HB3	1:A:110:LEU:H	22	0.31
(3,1910)	1:A:61:ALA:HA	1:A:64:GLU:HG2	19	0.31
(3,1910)	1:A:61:ALA:HA	1:A:64:GLU:HG3	19	0.31
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:124:LEU:HA	16	0.31
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG12	1:A:124:LEU:HA	16	0.31
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:124:LEU:HA	16	0.31
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:124:LEU:HA	16	0.31

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:124:LEU:HA	16	0.31
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:124:LEU:HA	16	0.31
(3,1803)	1:A:43:LEU:HD11	1:A:44:GLY:HA3	16	0.31
(3,1803)	1:A:43:LEU:HD12	1:A:44:GLY:HA3	16	0.31
(3,1803)	1:A:43:LEU:HD13	1:A:44:GLY:HA3	16	0.31
(3,1803)	1:A:43:LEU:HD21	1:A:44:GLY:HA3	16	0.31
(3,1803)	1:A:43:LEU:HD22	1:A:44:GLY:HA3	16	0.31
(3,1803)	1:A:43:LEU:HD23	1:A:44:GLY:HA3	16	0.31
(3,1665)	1:A:19:MET:HB2	1:A:19:MET:HE1	7	0.31
(3,1665)	1:A:19:MET:HB2	1:A:19:MET:HE2	7	0.31
(3,1665)	1:A:19:MET:HB2	1:A:19:MET:HE3	7	0.31
(3,1665)	1:A:19:MET:HB3	1:A:19:MET:HE1	7	0.31
(3,1665)	1:A:19:MET:HB3	1:A:19:MET:HE2	7	0.31
(3,1665)	1:A:19:MET:HB3	1:A:19:MET:HE3	7	0.31
(3,1487)	1:A:61:ALA:HA	1:A:64:GLU:HB2	13	0.31
(3,825)	1:A:39:SER:H	1:A:73:THR:HG21	15	0.3
(3,825)	1:A:39:SER:H	1:A:73:THR:HG22	15	0.3
(3,825)	1:A:39:SER:H	1:A:73:THR:HG23	15	0.3
(3,811)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD21	14	0.3
(3,811)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD22	14	0.3
(3,811)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD23	14	0.3
(3,811)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD21	24	0.3
(3,811)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD22	24	0.3
(3,811)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD23	24	0.3
(3,6)	1:A:52:GLN:HA	1:A:53:THR:H	12	0.3
(3,32)	1:A:52:GLN:H	1:A:52:GLN:HE22	4	0.3
(3,2216)	1:A:142:VAL:HG11	1:A:143:LYS:HG2	14	0.3
(3,2216)	1:A:142:VAL:HG11	1:A:143:LYS:HG3	14	0.3
(3,2216)	1:A:142:VAL:HG12	1:A:143:LYS:HG2	14	0.3
(3,2216)	1:A:142:VAL:HG12	1:A:143:LYS:HG3	14	0.3
(3,2216)	1:A:142:VAL:HG13	1:A:143:LYS:HG2	14	0.3
(3,2216)	1:A:142:VAL:HG13	1:A:143:LYS:HG3	14	0.3
(3,2216)	1:A:142:VAL:HG21	1:A:143:LYS:HG2	14	0.3
(3,2216)	1:A:142:VAL:HG21	1:A:143:LYS:HG3	14	0.3
(3,2216)	1:A:142:VAL:HG22	1:A:143:LYS:HG2	14	0.3
(3,2216)	1:A:142:VAL:HG22	1:A:143:LYS:HG3	14	0.3
(3,2216)	1:A:142:VAL:HG23	1:A:143:LYS:HG2	14	0.3
(3,2216)	1:A:142:VAL:HG23	1:A:143:LYS:HG3	14	0.3
(3,2089)	1:A:113:VAL:HG11	1:A:114:ARG:HB2	25	0.3
(3,2089)	1:A:113:VAL:HG11	1:A:114:ARG:HB3	25	0.3
(3,2089)	1:A:113:VAL:HG12	1:A:114:ARG:HB2	25	0.3
(3,2089)	1:A:113:VAL:HG12	1:A:114:ARG:HB3	25	0.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,2089)	1:A:113:VAL:HG13	1:A:114:ARG:HB2	25	0.3
(3,2089)	1:A:113:VAL:HG13	1:A:114:ARG:HB3	25	0.3
(3,2089)	1:A:113:VAL:HG21	1:A:114:ARG:HB2	25	0.3
(3,2089)	1:A:113:VAL:HG21	1:A:114:ARG:HB3	25	0.3
(3,2089)	1:A:113:VAL:HG22	1:A:114:ARG:HB2	25	0.3
(3,2089)	1:A:113:VAL:HG22	1:A:114:ARG:HB3	25	0.3
(3,2089)	1:A:113:VAL:HG23	1:A:114:ARG:HB2	25	0.3
(3,2089)	1:A:113:VAL:HG23	1:A:114:ARG:HB3	25	0.3
(3,2055)	1:A:98:LEU:HD11	1:A:99:PHE:HA	1	0.3
(3,2055)	1:A:98:LEU:HD12	1:A:99:PHE:HA	1	0.3
(3,2055)	1:A:98:LEU:HD13	1:A:99:PHE:HA	1	0.3
(3,2055)	1:A:98:LEU:HD21	1:A:99:PHE:HA	1	0.3
(3,2055)	1:A:98:LEU:HD22	1:A:99:PHE:HA	1	0.3
(3,2055)	1:A:98:LEU:HD23	1:A:99:PHE:HA	1	0.3
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG11	1:A:88:LYS:HG2	10	0.3
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG11	1:A:88:LYS:HG3	10	0.3
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG12	1:A:88:LYS:HG2	10	0.3
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG12	1:A:88:LYS:HG3	10	0.3
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG13	1:A:88:LYS:HG2	10	0.3
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG13	1:A:88:LYS:HG3	10	0.3
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG21	1:A:88:LYS:HG2	10	0.3
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG21	1:A:88:LYS:HG3	10	0.3
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG22	1:A:88:LYS:HG2	10	0.3
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG22	1:A:88:LYS:HG3	10	0.3
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG23	1:A:88:LYS:HG2	10	0.3
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG23	1:A:88:LYS:HG3	10	0.3
(3,1977)	1:A:84:VAL:HB	1:A:88:LYS:HB2	14	0.3
(3,1977)	1:A:84:VAL:HB	1:A:88:LYS:HB3	14	0.3
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD11	18	0.3
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD12	18	0.3
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD13	18	0.3
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD21	18	0.3
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD22	18	0.3
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD23	18	0.3
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD11	18	0.3
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD12	18	0.3
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD13	18	0.3
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD21	18	0.3
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD22	18	0.3
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD23	18	0.3
(3,1803)	1:A:43:LEU:HD11	1:A:44:GLY:HA3	19	0.3
(3,1803)	1:A:43:LEU:HD12	1:A:44:GLY:HA3	19	0.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,1803)	1:A:43:LEU:HD13	1:A:44:GLY:HA3	19	0.3
(3,1803)	1:A:43:LEU:HD21	1:A:44:GLY:HA3	19	0.3
(3,1803)	1:A:43:LEU:HD22	1:A:44:GLY:HA3	19	0.3
(3,1803)	1:A:43:LEU:HD23	1:A:44:GLY:HA3	19	0.3
(3,1503)	1:A:7:GLN:HA	1:A:7:GLN:HG3	2	0.3
(3,1126)	1:A:38:ILE:HD11	1:A:74:ILE:HG21	20	0.3
(3,1126)	1:A:38:ILE:HD11	1:A:74:ILE:HG22	20	0.3
(3,1126)	1:A:38:ILE:HD11	1:A:74:ILE:HG23	20	0.3
(3,1126)	1:A:38:ILE:HD12	1:A:74:ILE:HG21	20	0.3
(3,1126)	1:A:38:ILE:HD12	1:A:74:ILE:HG22	20	0.3
(3,1126)	1:A:38:ILE:HD12	1:A:74:ILE:HG23	20	0.3
(3,1126)	1:A:38:ILE:HD13	1:A:74:ILE:HG21	20	0.3
(3,1126)	1:A:38:ILE:HD13	1:A:74:ILE:HG22	20	0.3
(3,1126)	1:A:38:ILE:HD13	1:A:74:ILE:HG23	20	0.3
(3,1066)	1:A:29:MET:HE1	1:A:83:MET:HE1	19	0.3
(3,1066)	1:A:29:MET:HE1	1:A:83:MET:HE2	19	0.3
(3,1066)	1:A:29:MET:HE1	1:A:83:MET:HE3	19	0.3
(3,1066)	1:A:29:MET:HE2	1:A:83:MET:HE1	19	0.3
(3,1066)	1:A:29:MET:HE2	1:A:83:MET:HE2	19	0.3
(3,1066)	1:A:29:MET:HE2	1:A:83:MET:HE3	19	0.3
(3,1066)	1:A:29:MET:HE3	1:A:83:MET:HE1	19	0.3
(3,1066)	1:A:29:MET:HE3	1:A:83:MET:HE2	19	0.3
(3,1066)	1:A:29:MET:HE3	1:A:83:MET:HE3	19	0.3
(3,905)	1:A:31:ASP:H	1:A:32:ALA:HB1	19	0.29
(3,905)	1:A:31:ASP:H	1:A:32:ALA:HB2	19	0.29
(3,905)	1:A:31:ASP:H	1:A:32:ALA:HB3	19	0.29
(3,519)	1:A:138:ASN:H	1:A:139:LEU:H	1	0.29
(3,1803)	1:A:43:LEU:HD11	1:A:44:GLY:HA3	10	0.29
(3,1803)	1:A:43:LEU:HD12	1:A:44:GLY:HA3	10	0.29
(3,1803)	1:A:43:LEU:HD13	1:A:44:GLY:HA3	10	0.29
(3,1803)	1:A:43:LEU:HD21	1:A:44:GLY:HA3	10	0.29
(3,1803)	1:A:43:LEU:HD22	1:A:44:GLY:HA3	10	0.29
(3,1803)	1:A:43:LEU:HD23	1:A:44:GLY:HA3	10	0.29
(3,1053)	1:A:87:MET:HE1	1:A:134:ASP:HA	3	0.29
(3,1053)	1:A:87:MET:HE2	1:A:134:ASP:HA	3	0.29
(3,1053)	1:A:87:MET:HE3	1:A:134:ASP:HA	3	0.29
(3,924)	1:A:91:ALA:HB1	1:A:92:GLY:HA3	23	0.28
(3,924)	1:A:91:ALA:HB2	1:A:92:GLY:HA3	23	0.28
(3,924)	1:A:91:ALA:HB3	1:A:92:GLY:HA3	23	0.28
(3,811)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD21	19	0.28
(3,811)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD22	19	0.28
(3,811)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD23	19	0.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,773)	1:A:83:MET:H	1:A:84:VAL:HG11	2	0.28
(3,773)	1:A:83:MET:H	1:A:84:VAL:HG12	2	0.28
(3,773)	1:A:83:MET:H	1:A:84:VAL:HG13	2	0.28
(3,674)	1:A:102:ARG:HG2	1:A:107:ARG:HA	12	0.28
(3,674)	1:A:102:ARG:HG3	1:A:107:ARG:HA	12	0.28
(3,2087)	1:A:113:VAL:HA	1:A:114:ARG:HG2	9	0.28
(3,2087)	1:A:113:VAL:HA	1:A:114:ARG:HG3	9	0.28
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG11	1:A:88:LYS:HG2	4	0.28
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG11	1:A:88:LYS:HG3	4	0.28
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG12	1:A:88:LYS:HG2	4	0.28
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG12	1:A:88:LYS:HG3	4	0.28
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG13	1:A:88:LYS:HG2	4	0.28
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG13	1:A:88:LYS:HG3	4	0.28
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG21	1:A:88:LYS:HG2	4	0.28
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG21	1:A:88:LYS:HG3	4	0.28
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG22	1:A:88:LYS:HG2	4	0.28
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG22	1:A:88:LYS:HG3	4	0.28
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG23	1:A:88:LYS:HG2	4	0.28
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG23	1:A:88:LYS:HG3	4	0.28
(3,1977)	1:A:84:VAL:HB	1:A:88:LYS:HB2	9	0.28
(3,1977)	1:A:84:VAL:HB	1:A:88:LYS:HB3	9	0.28
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD11	4	0.28
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD12	4	0.28
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD13	4	0.28
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD21	4	0.28
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD22	4	0.28
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD23	4	0.28
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD11	4	0.28
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD12	4	0.28
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD13	4	0.28
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD21	4	0.28
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD22	4	0.28
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD23	4	0.28
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD11	5	0.28
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD12	5	0.28
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD13	5	0.28
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD21	5	0.28
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD22	5	0.28
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD23	5	0.28
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD11	5	0.28
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD12	5	0.28
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD13	5	0.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD21	5	0.28
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD22	5	0.28
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD23	5	0.28
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD11	11	0.28
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD12	11	0.28
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD13	11	0.28
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD21	11	0.28
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD22	11	0.28
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD23	11	0.28
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD11	11	0.28
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD12	11	0.28
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD13	11	0.28
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD21	11	0.28
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD22	11	0.28
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD23	11	0.28
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD11	12	0.28
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD12	12	0.28
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD13	12	0.28
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD21	12	0.28
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD22	12	0.28
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD23	12	0.28
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD11	12	0.28
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD12	12	0.28
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD13	12	0.28
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD21	12	0.28
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD22	12	0.28
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD23	12	0.28
(3,1396)	1:A:83:MET:HB3	1:A:83:MET:HE1	5	0.28
(3,1396)	1:A:83:MET:HB3	1:A:83:MET:HE2	5	0.28
(3,1396)	1:A:83:MET:HB3	1:A:83:MET:HE3	5	0.28
(3,1335)	1:A:86:GLN:HG2	1:A:117:ALA:H	24	0.28
(3,1152)	1:A:114:ARG:HA	1:A:114:ARG:HD2	11	0.28
(3,1135)	1:A:37:ASP:HB3	1:A:73:THR:HB	20	0.28
(3,811)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD21	1	0.27
(3,811)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD22	1	0.27
(3,811)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD23	1	0.27
(3,691)	1:A:143:LYS:HA	1:A:143:LYS:HE2	6	0.27
(3,691)	1:A:143:LYS:HA	1:A:143:LYS:HE3	6	0.27
(3,365)	1:A:84:VAL:HB	1:A:88:LYS:H	2	0.27
(3,365)	1:A:84:VAL:HB	1:A:88:LYS:H	23	0.27
(3,225)	1:A:58:GLU:H	1:A:58:GLU:HB3	10	0.27
(3,1977)	1:A:84:VAL:HB	1:A:88:LYS:HB2	23	0.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,1977)	1:A:84:VAL:HB	1:A:88:LYS:HB3	23	0.27
(3,178)	1:A:144:LYS:H	1:A:146:ASP:H	7	0.27
(3,1642)	1:A:15:LEU:HD11	1:A:135:LEU:HA	6	0.27
(3,1642)	1:A:15:LEU:HD12	1:A:135:LEU:HA	6	0.27
(3,1642)	1:A:15:LEU:HD13	1:A:135:LEU:HA	6	0.27
(3,1642)	1:A:15:LEU:HD21	1:A:135:LEU:HA	6	0.27
(3,1642)	1:A:15:LEU:HD22	1:A:135:LEU:HA	6	0.27
(3,1642)	1:A:15:LEU:HD23	1:A:135:LEU:HA	6	0.27
(3,13)	1:A:32:ALA:H	1:A:42:GLU:HB3	20	0.27
(3,1154)	1:A:111:ARG:HA	1:A:111:ARG:HD2	15	0.27
(3,1154)	1:A:111:ARG:HA	1:A:111:ARG:HD3	15	0.27
(3,1066)	1:A:29:MET:HE1	1:A:83:MET:HE1	14	0.27
(3,1066)	1:A:29:MET:HE1	1:A:83:MET:HE2	14	0.27
(3,1066)	1:A:29:MET:HE1	1:A:83:MET:HE3	14	0.27
(3,1066)	1:A:29:MET:HE2	1:A:83:MET:HE1	14	0.27
(3,1066)	1:A:29:MET:HE2	1:A:83:MET:HE2	14	0.27
(3,1066)	1:A:29:MET:HE2	1:A:83:MET:HE3	14	0.27
(3,1066)	1:A:29:MET:HE3	1:A:83:MET:HE1	14	0.27
(3,1066)	1:A:29:MET:HE3	1:A:83:MET:HE2	14	0.27
(3,1066)	1:A:29:MET:HE3	1:A:83:MET:HE3	14	0.27
(3,922)	1:A:19:MET:HE1	1:A:135:LEU:HA	7	0.26
(3,922)	1:A:19:MET:HE2	1:A:135:LEU:HA	7	0.26
(3,922)	1:A:19:MET:HE3	1:A:135:LEU:HA	7	0.26
(3,868)	1:A:40:VAL:HG21	1:A:56:LYS:HA	23	0.26
(3,868)	1:A:40:VAL:HG22	1:A:56:LYS:HA	23	0.26
(3,868)	1:A:40:VAL:HG23	1:A:56:LYS:HA	23	0.26
(3,773)	1:A:83:MET:H	1:A:84:VAL:HG11	15	0.26
(3,773)	1:A:83:MET:H	1:A:84:VAL:HG12	15	0.26
(3,773)	1:A:83:MET:H	1:A:84:VAL:HG13	15	0.26
(3,773)	1:A:83:MET:H	1:A:84:VAL:HG11	16	0.26
(3,773)	1:A:83:MET:H	1:A:84:VAL:HG12	16	0.26
(3,773)	1:A:83:MET:H	1:A:84:VAL:HG13	16	0.26
(3,773)	1:A:83:MET:H	1:A:84:VAL:HG11	24	0.26
(3,773)	1:A:83:MET:H	1:A:84:VAL:HG12	24	0.26
(3,773)	1:A:83:MET:H	1:A:84:VAL:HG13	24	0.26
(3,664)	1:A:102:ARG:HA	1:A:102:ARG:HD2	12	0.26
(3,664)	1:A:102:ARG:HA	1:A:102:ARG:HD3	12	0.26
(3,662)	1:A:136:ARG:HA	1:A:137:ALA:H	4	0.26
(3,644)	1:A:132:CYS:H	1:A:132:CYS:HB2	8	0.26
(3,225)	1:A:58:GLU:H	1:A:58:GLU:HB3	22	0.26
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG11	1:A:88:LYS:HG2	13	0.26
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG11	1:A:88:LYS:HG3	13	0.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG12	1:A:88:LYS:HG2	13	0.26
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG12	1:A:88:LYS:HG3	13	0.26
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG13	1:A:88:LYS:HG2	13	0.26
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG13	1:A:88:LYS:HG3	13	0.26
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG21	1:A:88:LYS:HG2	13	0.26
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG21	1:A:88:LYS:HG3	13	0.26
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG22	1:A:88:LYS:HG2	13	0.26
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG22	1:A:88:LYS:HG3	13	0.26
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG23	1:A:88:LYS:HG2	13	0.26
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG23	1:A:88:LYS:HG3	13	0.26
(3,1977)	1:A:84:VAL:HB	1:A:88:LYS:HB2	16	0.26
(3,1977)	1:A:84:VAL:HB	1:A:88:LYS:HB3	16	0.26
(3,197)	1:A:109:PRO:HA	1:A:110:LEU:H	22	0.26
(3,1803)	1:A:43:LEU:HD11	1:A:44:GLY:HA3	11	0.26
(3,1803)	1:A:43:LEU:HD12	1:A:44:GLY:HA3	11	0.26
(3,1803)	1:A:43:LEU:HD13	1:A:44:GLY:HA3	11	0.26
(3,1803)	1:A:43:LEU:HD21	1:A:44:GLY:HA3	11	0.26
(3,1803)	1:A:43:LEU:HD22	1:A:44:GLY:HA3	11	0.26
(3,1803)	1:A:43:LEU:HD23	1:A:44:GLY:HA3	11	0.26
(3,1745)	1:A:30:PHE:HB2	1:A:46:VAL:H	12	0.26
(3,1745)	1:A:30:PHE:HB3	1:A:46:VAL:H	12	0.26
(3,1745)	1:A:30:PHE:HB2	1:A:46:VAL:H	17	0.26
(3,1745)	1:A:30:PHE:HB3	1:A:46:VAL:H	17	0.26
(3,1672)	1:A:19:MET:HE1	1:A:84:VAL:HG11	14	0.26
(3,1672)	1:A:19:MET:HE1	1:A:84:VAL:HG12	14	0.26
(3,1672)	1:A:19:MET:HE1	1:A:84:VAL:HG13	14	0.26
(3,1672)	1:A:19:MET:HE1	1:A:84:VAL:HG21	14	0.26
(3,1672)	1:A:19:MET:HE1	1:A:84:VAL:HG22	14	0.26
(3,1672)	1:A:19:MET:HE1	1:A:84:VAL:HG23	14	0.26
(3,1672)	1:A:19:MET:HE2	1:A:84:VAL:HG11	14	0.26
(3,1672)	1:A:19:MET:HE2	1:A:84:VAL:HG12	14	0.26
(3,1672)	1:A:19:MET:HE2	1:A:84:VAL:HG13	14	0.26
(3,1672)	1:A:19:MET:HE2	1:A:84:VAL:HG21	14	0.26
(3,1672)	1:A:19:MET:HE2	1:A:84:VAL:HG22	14	0.26
(3,1672)	1:A:19:MET:HE2	1:A:84:VAL:HG23	14	0.26
(3,1672)	1:A:19:MET:HE3	1:A:84:VAL:HG11	14	0.26
(3,1672)	1:A:19:MET:HE3	1:A:84:VAL:HG12	14	0.26
(3,1672)	1:A:19:MET:HE3	1:A:84:VAL:HG13	14	0.26
(3,1672)	1:A:19:MET:HE3	1:A:84:VAL:HG21	14	0.26
(3,1672)	1:A:19:MET:HE3	1:A:84:VAL:HG22	14	0.26
(3,1672)	1:A:19:MET:HE3	1:A:84:VAL:HG23	14	0.26
(3,1503)	1:A:7:GLN:HA	1:A:7:GLN:HG3	6	0.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,1378)	1:A:109:PRO:HB3	1:A:111:ARG:H	2	0.26
(3,115)	1:A:39:SER:H	1:A:42:GLU:HB3	9	0.26
(3,115)	1:A:39:SER:H	1:A:42:GLU:HB3	22	0.26
(3,986)	1:A:121:LEU:HD21	1:A:133:MET:HE1	19	0.25
(3,986)	1:A:121:LEU:HD21	1:A:133:MET:HE2	19	0.25
(3,986)	1:A:121:LEU:HD21	1:A:133:MET:HE3	19	0.25
(3,986)	1:A:121:LEU:HD22	1:A:133:MET:HE1	19	0.25
(3,986)	1:A:121:LEU:HD22	1:A:133:MET:HE2	19	0.25
(3,986)	1:A:121:LEU:HD22	1:A:133:MET:HE3	19	0.25
(3,986)	1:A:121:LEU:HD23	1:A:133:MET:HE1	19	0.25
(3,986)	1:A:121:LEU:HD23	1:A:133:MET:HE2	19	0.25
(3,986)	1:A:121:LEU:HD23	1:A:133:MET:HE3	19	0.25
(3,902)	1:A:136:ARG:H	1:A:137:ALA:HB1	18	0.25
(3,902)	1:A:136:ARG:H	1:A:137:ALA:HB2	18	0.25
(3,902)	1:A:136:ARG:H	1:A:137:ALA:HB3	18	0.25
(3,811)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD21	7	0.25
(3,811)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD22	7	0.25
(3,811)	1:A:124:LEU:HA	1:A:124:LEU:HD23	7	0.25
(3,777)	1:A:11:ALA:HB1	1:A:84:VAL:HG11	8	0.25
(3,777)	1:A:11:ALA:HB1	1:A:84:VAL:HG12	8	0.25
(3,777)	1:A:11:ALA:HB1	1:A:84:VAL:HG13	8	0.25
(3,777)	1:A:11:ALA:HB2	1:A:84:VAL:HG11	8	0.25
(3,777)	1:A:11:ALA:HB2	1:A:84:VAL:HG12	8	0.25
(3,777)	1:A:11:ALA:HB2	1:A:84:VAL:HG13	8	0.25
(3,777)	1:A:11:ALA:HB3	1:A:84:VAL:HG11	8	0.25
(3,777)	1:A:11:ALA:HB3	1:A:84:VAL:HG12	8	0.25
(3,777)	1:A:11:ALA:HB3	1:A:84:VAL:HG13	8	0.25
(3,773)	1:A:83:MET:H	1:A:84:VAL:HG11	9	0.25
(3,773)	1:A:83:MET:H	1:A:84:VAL:HG12	9	0.25
(3,773)	1:A:83:MET:H	1:A:84:VAL:HG13	9	0.25
(3,773)	1:A:83:MET:H	1:A:84:VAL:HG11	14	0.25
(3,773)	1:A:83:MET:H	1:A:84:VAL:HG12	14	0.25
(3,773)	1:A:83:MET:H	1:A:84:VAL:HG13	14	0.25
(3,773)	1:A:83:MET:H	1:A:84:VAL:HG11	23	0.25
(3,773)	1:A:83:MET:H	1:A:84:VAL:HG12	23	0.25
(3,773)	1:A:83:MET:H	1:A:84:VAL:HG13	23	0.25
(3,607)	1:A:125:LEU:HG	1:A:126:GLY:H	9	0.25
(3,467)	1:A:19:MET:HG3	1:A:20:ILE:H	7	0.25
(3,29)	1:A:35:GLY:H	1:A:36:GLY:HA3	23	0.25
(3,225)	1:A:58:GLU:H	1:A:58:GLU:HB3	3	0.25
(3,2216)	1:A:142:VAL:HG11	1:A:143:LYS:HG2	18	0.25
(3,2216)	1:A:142:VAL:HG11	1:A:143:LYS:HG3	18	0.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,2216)	1:A:142:VAL:HG12	1:A:143:LYS:HG2	18	0.25
(3,2216)	1:A:142:VAL:HG12	1:A:143:LYS:HG3	18	0.25
(3,2216)	1:A:142:VAL:HG13	1:A:143:LYS:HG2	18	0.25
(3,2216)	1:A:142:VAL:HG13	1:A:143:LYS:HG3	18	0.25
(3,2216)	1:A:142:VAL:HG21	1:A:143:LYS:HG2	18	0.25
(3,2216)	1:A:142:VAL:HG21	1:A:143:LYS:HG3	18	0.25
(3,2216)	1:A:142:VAL:HG22	1:A:143:LYS:HG2	18	0.25
(3,2216)	1:A:142:VAL:HG22	1:A:143:LYS:HG3	18	0.25
(3,2216)	1:A:142:VAL:HG23	1:A:143:LYS:HG2	18	0.25
(3,2216)	1:A:142:VAL:HG23	1:A:143:LYS:HG3	18	0.25
(3,2047)	1:A:97:LYS:HB2	1:A:98:LEU:HD11	11	0.25
(3,2047)	1:A:97:LYS:HB2	1:A:98:LEU:HD12	11	0.25
(3,2047)	1:A:97:LYS:HB2	1:A:98:LEU:HD13	11	0.25
(3,2047)	1:A:97:LYS:HB2	1:A:98:LEU:HD21	11	0.25
(3,2047)	1:A:97:LYS:HB2	1:A:98:LEU:HD22	11	0.25
(3,2047)	1:A:97:LYS:HB2	1:A:98:LEU:HD23	11	0.25
(3,2047)	1:A:97:LYS:HB3	1:A:98:LEU:HD11	11	0.25
(3,2047)	1:A:97:LYS:HB3	1:A:98:LEU:HD12	11	0.25
(3,2047)	1:A:97:LYS:HB3	1:A:98:LEU:HD13	11	0.25
(3,2047)	1:A:97:LYS:HB3	1:A:98:LEU:HD21	11	0.25
(3,2047)	1:A:97:LYS:HB3	1:A:98:LEU:HD22	11	0.25
(3,2047)	1:A:97:LYS:HB3	1:A:98:LEU:HD23	11	0.25
(3,2045)	1:A:97:LYS:HA	1:A:98:LEU:HD11	24	0.25
(3,2045)	1:A:97:LYS:HA	1:A:98:LEU:HD12	24	0.25
(3,2045)	1:A:97:LYS:HA	1:A:98:LEU:HD13	24	0.25
(3,2045)	1:A:97:LYS:HA	1:A:98:LEU:HD21	24	0.25
(3,2045)	1:A:97:LYS:HA	1:A:98:LEU:HD22	24	0.25
(3,2045)	1:A:97:LYS:HA	1:A:98:LEU:HD23	24	0.25
(3,1987)	1:A:84:VAL:HG11	1:A:88:LYS:HB2	5	0.25
(3,1987)	1:A:84:VAL:HG11	1:A:88:LYS:HB3	5	0.25
(3,1987)	1:A:84:VAL:HG12	1:A:88:LYS:HB2	5	0.25
(3,1987)	1:A:84:VAL:HG12	1:A:88:LYS:HB3	5	0.25
(3,1987)	1:A:84:VAL:HG13	1:A:88:LYS:HB2	5	0.25
(3,1987)	1:A:84:VAL:HG13	1:A:88:LYS:HB3	5	0.25
(3,1987)	1:A:84:VAL:HG21	1:A:88:LYS:HB2	5	0.25
(3,1987)	1:A:84:VAL:HG21	1:A:88:LYS:HB3	5	0.25
(3,1987)	1:A:84:VAL:HG22	1:A:88:LYS:HB2	5	0.25
(3,1987)	1:A:84:VAL:HG22	1:A:88:LYS:HB3	5	0.25
(3,1987)	1:A:84:VAL:HG23	1:A:88:LYS:HB2	5	0.25
(3,1987)	1:A:84:VAL:HG23	1:A:88:LYS:HB3	5	0.25
(3,1977)	1:A:84:VAL:HB	1:A:88:LYS:HB2	24	0.25
(3,1977)	1:A:84:VAL:HB	1:A:88:LYS:HB3	24	0.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD11	6	0.25
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD12	6	0.25
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD13	6	0.25
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD21	6	0.25
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD22	6	0.25
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD23	6	0.25
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD11	6	0.25
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD12	6	0.25
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD13	6	0.25
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD21	6	0.25
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD22	6	0.25
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD23	6	0.25
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD11	14	0.25
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD12	14	0.25
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD13	14	0.25
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD21	14	0.25
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD22	14	0.25
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD23	14	0.25
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD11	14	0.25
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD12	14	0.25
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD13	14	0.25
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD21	14	0.25
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD22	14	0.25
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD23	14	0.25
(3,1754)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:35:GLY:H	19	0.25
(3,1754)	1:A:33:ASP:HB3	1:A:35:GLY:H	19	0.25
(3,1745)	1:A:30:PHE:HB2	1:A:46:VAL:H	23	0.25
(3,1745)	1:A:30:PHE:HB3	1:A:46:VAL:H	23	0.25
(3,1703)	1:A:24:LYS:HA	1:A:24:LYS:HD2	23	0.25
(3,1703)	1:A:24:LYS:HA	1:A:24:LYS:HD3	23	0.25
(3,1560)	1:A:115:MET:HE1	1:A:119:ALA:HB1	12	0.25
(3,1560)	1:A:115:MET:HE1	1:A:119:ALA:HB2	12	0.25
(3,1560)	1:A:115:MET:HE1	1:A:119:ALA:HB3	12	0.25
(3,1560)	1:A:115:MET:HE2	1:A:119:ALA:HB1	12	0.25
(3,1560)	1:A:115:MET:HE2	1:A:119:ALA:HB2	12	0.25
(3,1560)	1:A:115:MET:HE2	1:A:119:ALA:HB3	12	0.25
(3,1560)	1:A:115:MET:HE3	1:A:119:ALA:HB1	12	0.25
(3,1560)	1:A:115:MET:HE3	1:A:119:ALA:HB2	12	0.25
(3,1560)	1:A:115:MET:HE3	1:A:119:ALA:HB3	12	0.25
(3,1498)	1:A:64:GLU:HA	1:A:66:VAL:HG21	19	0.25
(3,1498)	1:A:64:GLU:HA	1:A:66:VAL:HG22	19	0.25
(3,1498)	1:A:64:GLU:HA	1:A:66:VAL:HG23	19	0.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,1434)	1:A:57:GLU:HA	1:A:57:GLU:HG3	21	0.25
(3,1396)	1:A:83:MET:HB3	1:A:83:MET:HE1	17	0.25
(3,1396)	1:A:83:MET:HB3	1:A:83:MET:HE2	17	0.25
(3,1396)	1:A:83:MET:HB3	1:A:83:MET:HE3	17	0.25
(3,1180)	1:A:128:LYS:HA	1:A:128:LYS:HE2	16	0.25
(3,1180)	1:A:128:LYS:HA	1:A:128:LYS:HE3	16	0.25
(3,1066)	1:A:29:MET:HE1	1:A:83:MET:HE1	21	0.25
(3,1066)	1:A:29:MET:HE1	1:A:83:MET:HE2	21	0.25
(3,1066)	1:A:29:MET:HE1	1:A:83:MET:HE3	21	0.25
(3,1066)	1:A:29:MET:HE2	1:A:83:MET:HE1	21	0.25
(3,1066)	1:A:29:MET:HE2	1:A:83:MET:HE2	21	0.25
(3,1066)	1:A:29:MET:HE2	1:A:83:MET:HE3	21	0.25
(3,1066)	1:A:29:MET:HE3	1:A:83:MET:HE1	21	0.25
(3,1066)	1:A:29:MET:HE3	1:A:83:MET:HE2	21	0.25
(3,1066)	1:A:29:MET:HE3	1:A:83:MET:HE3	21	0.25
(3,1065)	1:A:82:MET:HG2	1:A:83:MET:HE1	1	0.25
(3,1065)	1:A:82:MET:HG2	1:A:83:MET:HE2	1	0.25
(3,1065)	1:A:82:MET:HG2	1:A:83:MET:HE3	1	0.25
(3,1065)	1:A:82:MET:HG3	1:A:83:MET:HE1	1	0.25
(3,1065)	1:A:82:MET:HG3	1:A:83:MET:HE2	1	0.25
(3,1065)	1:A:82:MET:HG3	1:A:83:MET:HE3	1	0.25
(3,1012)	1:A:38:ILE:HG21	1:A:43:LEU:HG	10	0.25
(3,1012)	1:A:38:ILE:HG22	1:A:43:LEU:HG	10	0.25
(3,1012)	1:A:38:ILE:HG23	1:A:43:LEU:HG	10	0.25
(3,885)	1:A:142:VAL:HG11	1:A:143:LYS:HG2	1	0.24
(3,885)	1:A:142:VAL:HG11	1:A:143:LYS:HG3	1	0.24
(3,885)	1:A:142:VAL:HG12	1:A:143:LYS:HG2	1	0.24
(3,885)	1:A:142:VAL:HG12	1:A:143:LYS:HG3	1	0.24
(3,885)	1:A:142:VAL:HG13	1:A:143:LYS:HG2	1	0.24
(3,885)	1:A:142:VAL:HG13	1:A:143:LYS:HG3	1	0.24
(3,825)	1:A:39:SER:H	1:A:73:THR:HG21	21	0.24
(3,825)	1:A:39:SER:H	1:A:73:THR:HG22	21	0.24
(3,825)	1:A:39:SER:H	1:A:73:THR:HG23	21	0.24
(3,773)	1:A:83:MET:H	1:A:84:VAL:HG11	8	0.24
(3,773)	1:A:83:MET:H	1:A:84:VAL:HG12	8	0.24
(3,773)	1:A:83:MET:H	1:A:84:VAL:HG13	8	0.24
(3,644)	1:A:132:CYS:H	1:A:132:CYS:HB2	7	0.24
(3,629)	1:A:83:MET:HA	1:A:117:ALA:HB1	20	0.24
(3,629)	1:A:83:MET:HA	1:A:117:ALA:HB2	20	0.24
(3,629)	1:A:83:MET:HA	1:A:117:ALA:HB3	20	0.24
(3,47)	1:A:142:VAL:HA	1:A:143:LYS:H	22	0.24
(3,381)	1:A:98:LEU:HA	1:A:99:PHE:H	21	0.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,365)	1:A:84:VAL:HB	1:A:88:LYS:H	15	0.24
(3,348)	1:A:101:LEU:HA	1:A:102:ARG:H	12	0.24
(3,32)	1:A:52:GLN:H	1:A:52:GLN:HE22	9	0.24
(3,2207)	1:A:140:LYS:HB2	1:A:141:GLN:H	20	0.24
(3,2207)	1:A:140:LYS:HB3	1:A:141:GLN:H	20	0.24
(3,2089)	1:A:113:VAL:HG11	1:A:114:ARG:HB2	11	0.24
(3,2089)	1:A:113:VAL:HG11	1:A:114:ARG:HB3	11	0.24
(3,2089)	1:A:113:VAL:HG12	1:A:114:ARG:HB2	11	0.24
(3,2089)	1:A:113:VAL:HG12	1:A:114:ARG:HB3	11	0.24
(3,2089)	1:A:113:VAL:HG13	1:A:114:ARG:HB2	11	0.24
(3,2089)	1:A:113:VAL:HG13	1:A:114:ARG:HB3	11	0.24
(3,2089)	1:A:113:VAL:HG21	1:A:114:ARG:HB2	11	0.24
(3,2089)	1:A:113:VAL:HG21	1:A:114:ARG:HB3	11	0.24
(3,2089)	1:A:113:VAL:HG22	1:A:114:ARG:HB2	11	0.24
(3,2089)	1:A:113:VAL:HG22	1:A:114:ARG:HB3	11	0.24
(3,2089)	1:A:113:VAL:HG23	1:A:114:ARG:HB2	11	0.24
(3,2089)	1:A:113:VAL:HG23	1:A:114:ARG:HB3	11	0.24
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG11	1:A:88:LYS:HE2	3	0.24
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG11	1:A:88:LYS:HE3	3	0.24
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG12	1:A:88:LYS:HE2	3	0.24
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG12	1:A:88:LYS:HE3	3	0.24
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG13	1:A:88:LYS:HE2	3	0.24
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG13	1:A:88:LYS:HE3	3	0.24
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG21	1:A:88:LYS:HE2	3	0.24
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG21	1:A:88:LYS:HE3	3	0.24
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG22	1:A:88:LYS:HE2	3	0.24
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG22	1:A:88:LYS:HE3	3	0.24
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG23	1:A:88:LYS:HE2	3	0.24
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG23	1:A:88:LYS:HE3	3	0.24
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG11	1:A:88:LYS:HG2	12	0.24
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG11	1:A:88:LYS:HG3	12	0.24
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG12	1:A:88:LYS:HG2	12	0.24
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG12	1:A:88:LYS:HG3	12	0.24
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG13	1:A:88:LYS:HG2	12	0.24
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG13	1:A:88:LYS:HG3	12	0.24
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG21	1:A:88:LYS:HG2	12	0.24
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG21	1:A:88:LYS:HG3	12	0.24
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG22	1:A:88:LYS:HG2	12	0.24
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG22	1:A:88:LYS:HG3	12	0.24
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG23	1:A:88:LYS:HG2	12	0.24
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG23	1:A:88:LYS:HG3	12	0.24
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG11	22	0.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG12	22	0.24
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG13	22	0.24
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG21	22	0.24
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG22	22	0.24
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG23	22	0.24
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG11	22	0.24
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG12	22	0.24
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG13	22	0.24
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG21	22	0.24
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG22	22	0.24
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG23	22	0.24
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG11	22	0.24
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG12	22	0.24
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG13	22	0.24
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG21	22	0.24
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG22	22	0.24
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG23	22	0.24
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG11	22	0.24
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG12	22	0.24
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG13	22	0.24
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG21	22	0.24
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG22	22	0.24
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG23	22	0.24
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG11	22	0.24
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG12	22	0.24
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG13	22	0.24
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG21	22	0.24
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG22	22	0.24
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG23	22	0.24
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG11	22	0.24
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG12	22	0.24
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG13	22	0.24
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG21	22	0.24
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG22	22	0.24
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG23	22	0.24
(3,178)	1:A:144:LYS:H	1:A:146:ASP:H	24	0.24
(3,1745)	1:A:30:PHE:HB2	1:A:46:VAL:H	13	0.24
(3,1745)	1:A:30:PHE:HB3	1:A:46:VAL:H	13	0.24
(3,1732)	1:A:29:MET:HG2	1:A:83:MET:HE1	7	0.24
(3,1732)	1:A:29:MET:HG2	1:A:83:MET:HE2	7	0.24
(3,1732)	1:A:29:MET:HG2	1:A:83:MET:HE3	7	0.24
(3,1732)	1:A:29:MET:HG3	1:A:83:MET:HE1	7	0.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,1732)	1:A:29:MET:HG3	1:A:83:MET:HE2	7	0.24
(3,1732)	1:A:29:MET:HG3	1:A:83:MET:HE3	7	0.24
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB2	1:A:83:MET:HE1	7	0.24
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB2	1:A:83:MET:HE2	7	0.24
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB2	1:A:83:MET:HE3	7	0.24
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB3	1:A:83:MET:HE1	7	0.24
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB3	1:A:83:MET:HE2	7	0.24
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB3	1:A:83:MET:HE3	7	0.24
(3,1614)	1:A:14:TYR:HB2	1:A:87:MET:HE1	3	0.24
(3,1614)	1:A:14:TYR:HB2	1:A:87:MET:HE2	3	0.24
(3,1614)	1:A:14:TYR:HB2	1:A:87:MET:HE3	3	0.24
(3,1614)	1:A:14:TYR:HB3	1:A:87:MET:HE1	3	0.24
(3,1614)	1:A:14:TYR:HB3	1:A:87:MET:HE2	3	0.24
(3,1614)	1:A:14:TYR:HB3	1:A:87:MET:HE3	3	0.24
(3,1608)	1:A:14:TYR:H	1:A:80:LEU:HD11	22	0.24
(3,1608)	1:A:14:TYR:H	1:A:80:LEU:HD12	22	0.24
(3,1608)	1:A:14:TYR:H	1:A:80:LEU:HD13	22	0.24
(3,1608)	1:A:14:TYR:H	1:A:80:LEU:HD21	22	0.24
(3,1608)	1:A:14:TYR:H	1:A:80:LEU:HD22	22	0.24
(3,1608)	1:A:14:TYR:H	1:A:80:LEU:HD23	22	0.24
(3,1555)	1:A:75:ASP:HA	1:A:78:GLU:H	7	0.24
(3,1434)	1:A:57:GLU:HA	1:A:57:GLU:HG3	13	0.24
(3,1396)	1:A:83:MET:HB3	1:A:83:MET:HE1	4	0.24
(3,1396)	1:A:83:MET:HB3	1:A:83:MET:HE2	4	0.24
(3,1396)	1:A:83:MET:HB3	1:A:83:MET:HE3	4	0.24
(3,1396)	1:A:83:MET:HB3	1:A:83:MET:HE1	11	0.24
(3,1396)	1:A:83:MET:HB3	1:A:83:MET:HE2	11	0.24
(3,1396)	1:A:83:MET:HB3	1:A:83:MET:HE3	11	0.24
(3,1378)	1:A:109:PRO:HB3	1:A:111:ARG:H	6	0.24
(3,1328)	1:A:82:MET:HB2	1:A:83:MET:HG2	10	0.24
(3,1328)	1:A:82:MET:HB2	1:A:83:MET:HG3	10	0.24
(3,1328)	1:A:82:MET:HB3	1:A:83:MET:HG2	10	0.24
(3,1328)	1:A:82:MET:HB3	1:A:83:MET:HG3	10	0.24
(3,1066)	1:A:29:MET:HE1	1:A:83:MET:HE1	18	0.24
(3,1066)	1:A:29:MET:HE1	1:A:83:MET:HE2	18	0.24
(3,1066)	1:A:29:MET:HE1	1:A:83:MET:HE3	18	0.24
(3,1066)	1:A:29:MET:HE2	1:A:83:MET:HE1	18	0.24
(3,1066)	1:A:29:MET:HE2	1:A:83:MET:HE2	18	0.24
(3,1066)	1:A:29:MET:HE2	1:A:83:MET:HE3	18	0.24
(3,1066)	1:A:29:MET:HE3	1:A:83:MET:HE1	18	0.24
(3,1066)	1:A:29:MET:HE3	1:A:83:MET:HE2	18	0.24
(3,1066)	1:A:29:MET:HE3	1:A:83:MET:HE3	18	0.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,1012)	1:A:38:ILE:HG21	1:A:43:LEU:HG	7	0.24
(3,1012)	1:A:38:ILE:HG22	1:A:43:LEU:HG	7	0.24
(3,1012)	1:A:38:ILE:HG23	1:A:43:LEU:HG	7	0.24
(3,10)	1:A:52:GLN:HB2	1:A:53:THR:H	6	0.24
(3,904)	1:A:32:ALA:HB1	1:A:33:ASP:H	5	0.23
(3,904)	1:A:32:ALA:HB2	1:A:33:ASP:H	5	0.23
(3,904)	1:A:32:ALA:HB3	1:A:33:ASP:H	5	0.23
(3,876)	1:A:142:VAL:HG21	1:A:143:LYS:HG2	14	0.23
(3,876)	1:A:142:VAL:HG21	1:A:143:LYS:HG3	14	0.23
(3,876)	1:A:142:VAL:HG22	1:A:143:LYS:HG2	14	0.23
(3,876)	1:A:142:VAL:HG22	1:A:143:LYS:HG3	14	0.23
(3,876)	1:A:142:VAL:HG23	1:A:143:LYS:HG2	14	0.23
(3,876)	1:A:142:VAL:HG23	1:A:143:LYS:HG3	14	0.23
(3,813)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD21	9	0.23
(3,813)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD22	9	0.23
(3,813)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD23	9	0.23
(3,813)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD21	9	0.23
(3,813)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD22	9	0.23
(3,813)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD23	9	0.23
(3,813)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD21	9	0.23
(3,813)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD22	9	0.23
(3,813)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD23	9	0.23
(3,752)	1:A:41:LYS:HG3	1:A:42:GLU:H	22	0.23
(3,707)	1:A:83:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD11	7	0.23
(3,707)	1:A:83:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD12	7	0.23
(3,707)	1:A:83:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD13	7	0.23
(3,707)	1:A:83:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD11	7	0.23
(3,707)	1:A:83:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD12	7	0.23
(3,707)	1:A:83:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD13	7	0.23
(3,707)	1:A:83:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD11	7	0.23
(3,707)	1:A:83:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD12	7	0.23
(3,707)	1:A:83:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD13	7	0.23
(3,664)	1:A:102:ARG:HA	1:A:102:ARG:HD2	24	0.23
(3,664)	1:A:102:ARG:HA	1:A:102:ARG:HD3	24	0.23
(3,629)	1:A:83:MET:HA	1:A:117:ALA:HB1	7	0.23
(3,629)	1:A:83:MET:HA	1:A:117:ALA:HB2	7	0.23
(3,629)	1:A:83:MET:HA	1:A:117:ALA:HB3	7	0.23
(3,598)	1:A:33:ASP:H	1:A:33:ASP:HB3	20	0.23
(3,381)	1:A:98:LEU:HA	1:A:99:PHE:H	2	0.23
(3,348)	1:A:101:LEU:HA	1:A:102:ARG:H	17	0.23
(3,29)	1:A:35:GLY:H	1:A:36:GLY:HA3	14	0.23
(3,2220)	1:A:144:LYS:HB2	1:A:145:GLU:HG2	11	0.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,2220)	1:A:144:LYS:HB2	1:A:145:GLU:HG3	11	0.23
(3,2220)	1:A:144:LYS:HB3	1:A:145:GLU:HG2	11	0.23
(3,2220)	1:A:144:LYS:HB3	1:A:145:GLU:HG3	11	0.23
(3,2152)	1:A:125:LEU:HA	1:A:125:LEU:HD11	13	0.23
(3,2152)	1:A:125:LEU:HA	1:A:125:LEU:HD12	13	0.23
(3,2152)	1:A:125:LEU:HA	1:A:125:LEU:HD13	13	0.23
(3,2152)	1:A:125:LEU:HA	1:A:125:LEU:HD21	13	0.23
(3,2152)	1:A:125:LEU:HA	1:A:125:LEU:HD22	13	0.23
(3,2152)	1:A:125:LEU:HA	1:A:125:LEU:HD23	13	0.23
(3,2152)	1:A:125:LEU:HA	1:A:125:LEU:HD11	15	0.23
(3,2152)	1:A:125:LEU:HA	1:A:125:LEU:HD12	15	0.23
(3,2152)	1:A:125:LEU:HA	1:A:125:LEU:HD13	15	0.23
(3,2152)	1:A:125:LEU:HA	1:A:125:LEU:HD21	15	0.23
(3,2152)	1:A:125:LEU:HA	1:A:125:LEU:HD22	15	0.23
(3,2152)	1:A:125:LEU:HA	1:A:125:LEU:HD23	15	0.23
(3,1987)	1:A:84:VAL:HG11	1:A:88:LYS:HB2	11	0.23
(3,1987)	1:A:84:VAL:HG11	1:A:88:LYS:HB3	11	0.23
(3,1987)	1:A:84:VAL:HG12	1:A:88:LYS:HB2	11	0.23
(3,1987)	1:A:84:VAL:HG12	1:A:88:LYS:HB3	11	0.23
(3,1987)	1:A:84:VAL:HG13	1:A:88:LYS:HB2	11	0.23
(3,1987)	1:A:84:VAL:HG13	1:A:88:LYS:HB3	11	0.23
(3,1987)	1:A:84:VAL:HG21	1:A:88:LYS:HB2	11	0.23
(3,1987)	1:A:84:VAL:HG21	1:A:88:LYS:HB3	11	0.23
(3,1987)	1:A:84:VAL:HG22	1:A:88:LYS:HB2	11	0.23
(3,1987)	1:A:84:VAL:HG22	1:A:88:LYS:HB3	11	0.23
(3,1987)	1:A:84:VAL:HG23	1:A:88:LYS:HB2	11	0.23
(3,1987)	1:A:84:VAL:HG23	1:A:88:LYS:HB3	11	0.23
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD11	7	0.23
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD12	7	0.23
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD13	7	0.23
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD21	7	0.23
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD22	7	0.23
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD23	7	0.23
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD11	7	0.23
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD12	7	0.23
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD13	7	0.23
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD21	7	0.23
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD22	7	0.23
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD23	7	0.23
(3,1919)	1:A:68:GLU:H	1:A:68:GLU:HG2	19	0.23
(3,1919)	1:A:68:GLU:H	1:A:68:GLU:HG3	19	0.23
(3,1745)	1:A:30:PHE:HB2	1:A:46:VAL:H	6	0.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,1745)	1:A:30:PHE:HB3	1:A:46:VAL:H	6	0.23
(3,1745)	1:A:30:PHE:HB2	1:A:46:VAL:H	15	0.23
(3,1745)	1:A:30:PHE:HB3	1:A:46:VAL:H	15	0.23
(3,1732)	1:A:29:MET:HG2	1:A:83:MET:HE1	1	0.23
(3,1732)	1:A:29:MET:HG2	1:A:83:MET:HE2	1	0.23
(3,1732)	1:A:29:MET:HG2	1:A:83:MET:HE3	1	0.23
(3,1732)	1:A:29:MET:HG3	1:A:83:MET:HE1	1	0.23
(3,1732)	1:A:29:MET:HG3	1:A:83:MET:HE2	1	0.23
(3,1732)	1:A:29:MET:HG3	1:A:83:MET:HE3	1	0.23
(3,1628)	1:A:15:LEU:HG	1:A:135:LEU:HD11	21	0.23
(3,1628)	1:A:15:LEU:HG	1:A:135:LEU:HD12	21	0.23
(3,1628)	1:A:15:LEU:HG	1:A:135:LEU:HD13	21	0.23
(3,1628)	1:A:15:LEU:HG	1:A:135:LEU:HD21	21	0.23
(3,1628)	1:A:15:LEU:HG	1:A:135:LEU:HD22	21	0.23
(3,1628)	1:A:15:LEU:HG	1:A:135:LEU:HD23	21	0.23
(3,1608)	1:A:14:TYR:H	1:A:80:LEU:HD11	10	0.23
(3,1608)	1:A:14:TYR:H	1:A:80:LEU:HD12	10	0.23
(3,1608)	1:A:14:TYR:H	1:A:80:LEU:HD13	10	0.23
(3,1608)	1:A:14:TYR:H	1:A:80:LEU:HD21	10	0.23
(3,1608)	1:A:14:TYR:H	1:A:80:LEU:HD22	10	0.23
(3,1608)	1:A:14:TYR:H	1:A:80:LEU:HD23	10	0.23
(3,1583)	1:A:10:GLU:H	1:A:81:VAL:HG11	13	0.23
(3,1583)	1:A:10:GLU:H	1:A:81:VAL:HG12	13	0.23
(3,1583)	1:A:10:GLU:H	1:A:81:VAL:HG13	13	0.23
(3,1583)	1:A:10:GLU:H	1:A:81:VAL:HG21	13	0.23
(3,1583)	1:A:10:GLU:H	1:A:81:VAL:HG22	13	0.23
(3,1583)	1:A:10:GLU:H	1:A:81:VAL:HG23	13	0.23
(3,1583)	1:A:10:GLU:H	1:A:81:VAL:HG11	21	0.23
(3,1583)	1:A:10:GLU:H	1:A:81:VAL:HG12	21	0.23
(3,1583)	1:A:10:GLU:H	1:A:81:VAL:HG13	21	0.23
(3,1583)	1:A:10:GLU:H	1:A:81:VAL:HG21	21	0.23
(3,1583)	1:A:10:GLU:H	1:A:81:VAL:HG22	21	0.23
(3,1583)	1:A:10:GLU:H	1:A:81:VAL:HG23	21	0.23
(3,1434)	1:A:57:GLU:HA	1:A:57:GLU:HG3	22	0.23
(3,1298)	1:A:64:GLU:HG2	1:A:65:GLU:H	15	0.23
(3,126)	1:A:112:ARG:HA	1:A:113:VAL:H	19	0.23
(3,1154)	1:A:111:ARG:HA	1:A:111:ARG:HD2	22	0.23
(3,1154)	1:A:111:ARG:HA	1:A:111:ARG:HD3	22	0.23
(3,1153)	1:A:114:ARG:HA	1:A:114:ARG:HD3	7	0.23
(3,1152)	1:A:114:ARG:HA	1:A:114:ARG:HD2	7	0.23
(3,1147)	1:A:38:ILE:H	1:A:74:ILE:HD11	19	0.23
(3,1147)	1:A:38:ILE:H	1:A:74:ILE:HD12	19	0.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,1147)	1:A:38:ILE:H	1:A:74:ILE:HD13	19	0.23
(3,1066)	1:A:29:MET:HE1	1:A:83:MET:HE1	3	0.23
(3,1066)	1:A:29:MET:HE1	1:A:83:MET:HE2	3	0.23
(3,1066)	1:A:29:MET:HE1	1:A:83:MET:HE3	3	0.23
(3,1066)	1:A:29:MET:HE2	1:A:83:MET:HE1	3	0.23
(3,1066)	1:A:29:MET:HE2	1:A:83:MET:HE2	3	0.23
(3,1066)	1:A:29:MET:HE2	1:A:83:MET:HE3	3	0.23
(3,1066)	1:A:29:MET:HE3	1:A:83:MET:HE1	3	0.23
(3,1066)	1:A:29:MET:HE3	1:A:83:MET:HE2	3	0.23
(3,1066)	1:A:29:MET:HE3	1:A:83:MET:HE3	3	0.23
(3,1012)	1:A:38:ILE:HG21	1:A:43:LEU:HG	19	0.23
(3,1012)	1:A:38:ILE:HG22	1:A:43:LEU:HG	19	0.23
(3,1012)	1:A:38:ILE:HG23	1:A:43:LEU:HG	19	0.23
(3,1008)	1:A:83:MET:HG2	1:A:120:MET:HE1	25	0.23
(3,1008)	1:A:83:MET:HG2	1:A:120:MET:HE2	25	0.23
(3,1008)	1:A:83:MET:HG2	1:A:120:MET:HE3	25	0.23
(3,1008)	1:A:83:MET:HG3	1:A:120:MET:HE1	25	0.23
(3,1008)	1:A:83:MET:HG3	1:A:120:MET:HE2	25	0.23
(3,1008)	1:A:83:MET:HG3	1:A:120:MET:HE3	25	0.23
(1,2)	1:A:69:ASP:OD1	2:A:201:CA:CA	8	0.23
(1,2)	1:A:69:ASP:OD2	2:A:201:CA:CA	8	0.23
(1,1)	1:A:67:ASP:OD1	2:A:201:CA:CA	25	0.23
(1,1)	1:A:67:ASP:OD2	2:A:201:CA:CA	25	0.23
(3,888)	1:A:142:VAL:HG11	1:A:143:LYS:HE2	17	0.22
(3,888)	1:A:142:VAL:HG11	1:A:143:LYS:HE3	17	0.22
(3,888)	1:A:142:VAL:HG12	1:A:143:LYS:HE2	17	0.22
(3,888)	1:A:142:VAL:HG12	1:A:143:LYS:HE3	17	0.22
(3,888)	1:A:142:VAL:HG13	1:A:143:LYS:HE2	17	0.22
(3,888)	1:A:142:VAL:HG13	1:A:143:LYS:HE3	17	0.22
(3,880)	1:A:45:THR:HG21	1:A:49:MET:HB3	1	0.22
(3,880)	1:A:45:THR:HG22	1:A:49:MET:HB3	1	0.22
(3,880)	1:A:45:THR:HG23	1:A:49:MET:HB3	1	0.22
(3,813)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD21	21	0.22
(3,813)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD22	21	0.22
(3,813)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD23	21	0.22
(3,813)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD21	21	0.22
(3,813)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD22	21	0.22
(3,813)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD23	21	0.22
(3,813)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD21	21	0.22
(3,813)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD22	21	0.22
(3,813)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD23	21	0.22
(3,752)	1:A:41:LYS:HG3	1:A:42:GLU:H	10	0.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,750)	1:A:97:LYS:HG2	1:A:98:LEU:H	4	0.22
(3,691)	1:A:143:LYS:HA	1:A:143:LYS:HE2	9	0.22
(3,691)	1:A:143:LYS:HA	1:A:143:LYS:HE3	9	0.22
(3,365)	1:A:84:VAL:HB	1:A:88:LYS:H	24	0.22
(3,2199)	1:A:139:LEU:H	1:A:139:LEU:HD11	23	0.22
(3,2199)	1:A:139:LEU:H	1:A:139:LEU:HD12	23	0.22
(3,2199)	1:A:139:LEU:H	1:A:139:LEU:HD13	23	0.22
(3,2199)	1:A:139:LEU:H	1:A:139:LEU:HD21	23	0.22
(3,2199)	1:A:139:LEU:H	1:A:139:LEU:HD22	23	0.22
(3,2199)	1:A:139:LEU:H	1:A:139:LEU:HD23	23	0.22
(3,2045)	1:A:97:LYS:HA	1:A:98:LEU:HD11	4	0.22
(3,2045)	1:A:97:LYS:HA	1:A:98:LEU:HD12	4	0.22
(3,2045)	1:A:97:LYS:HA	1:A:98:LEU:HD13	4	0.22
(3,2045)	1:A:97:LYS:HA	1:A:98:LEU:HD21	4	0.22
(3,2045)	1:A:97:LYS:HA	1:A:98:LEU:HD22	4	0.22
(3,2045)	1:A:97:LYS:HA	1:A:98:LEU:HD23	4	0.22
(3,1987)	1:A:84:VAL:HG11	1:A:88:LYS:HB2	17	0.22
(3,1987)	1:A:84:VAL:HG11	1:A:88:LYS:HB3	17	0.22
(3,1987)	1:A:84:VAL:HG12	1:A:88:LYS:HB2	17	0.22
(3,1987)	1:A:84:VAL:HG12	1:A:88:LYS:HB3	17	0.22
(3,1987)	1:A:84:VAL:HG13	1:A:88:LYS:HB2	17	0.22
(3,1987)	1:A:84:VAL:HG13	1:A:88:LYS:HB3	17	0.22
(3,1987)	1:A:84:VAL:HG21	1:A:88:LYS:HB2	17	0.22
(3,1987)	1:A:84:VAL:HG21	1:A:88:LYS:HB3	17	0.22
(3,1987)	1:A:84:VAL:HG22	1:A:88:LYS:HB2	17	0.22
(3,1987)	1:A:84:VAL:HG22	1:A:88:LYS:HB3	17	0.22
(3,1987)	1:A:84:VAL:HG23	1:A:88:LYS:HB2	17	0.22
(3,1987)	1:A:84:VAL:HG23	1:A:88:LYS:HB3	17	0.22
(3,1983)	1:A:84:VAL:HG11	1:A:86:GLN:H	2	0.22
(3,1983)	1:A:84:VAL:HG12	1:A:86:GLN:H	2	0.22
(3,1983)	1:A:84:VAL:HG13	1:A:86:GLN:H	2	0.22
(3,1983)	1:A:84:VAL:HG21	1:A:86:GLN:H	2	0.22
(3,1983)	1:A:84:VAL:HG22	1:A:86:GLN:H	2	0.22
(3,1983)	1:A:84:VAL:HG23	1:A:86:GLN:H	2	0.22
(3,1983)	1:A:84:VAL:HG11	1:A:86:GLN:H	9	0.22
(3,1983)	1:A:84:VAL:HG12	1:A:86:GLN:H	9	0.22
(3,1983)	1:A:84:VAL:HG13	1:A:86:GLN:H	9	0.22
(3,1983)	1:A:84:VAL:HG21	1:A:86:GLN:H	9	0.22
(3,1983)	1:A:84:VAL:HG22	1:A:86:GLN:H	9	0.22
(3,1983)	1:A:84:VAL:HG23	1:A:86:GLN:H	9	0.22
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD11	22	0.22
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD12	22	0.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD13	22	0.22
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD21	22	0.22
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD22	22	0.22
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD23	22	0.22
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD11	22	0.22
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD12	22	0.22
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD13	22	0.22
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD21	22	0.22
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD22	22	0.22
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD23	22	0.22
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD11	23	0.22
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD12	23	0.22
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD13	23	0.22
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD21	23	0.22
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD22	23	0.22
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD23	23	0.22
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD11	23	0.22
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD12	23	0.22
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD13	23	0.22
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD21	23	0.22
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD22	23	0.22
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD23	23	0.22
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD11	25	0.22
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD12	25	0.22
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD13	25	0.22
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD21	25	0.22
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD22	25	0.22
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD23	25	0.22
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD11	25	0.22
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD12	25	0.22
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD13	25	0.22
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD21	25	0.22
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD22	25	0.22
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD23	25	0.22
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG11	1:A:85:ARG:HD2	16	0.22
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG11	1:A:85:ARG:HD3	16	0.22
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG12	1:A:85:ARG:HD2	16	0.22
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG12	1:A:85:ARG:HD3	16	0.22
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG13	1:A:85:ARG:HD2	16	0.22
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG13	1:A:85:ARG:HD3	16	0.22
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG21	1:A:85:ARG:HD2	16	0.22
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG21	1:A:85:ARG:HD3	16	0.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG22	1:A:85:ARG:HD2	16	0.22
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG22	1:A:85:ARG:HD3	16	0.22
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG23	1:A:85:ARG:HD2	16	0.22
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG23	1:A:85:ARG:HD3	16	0.22
(3,1898)	1:A:57:GLU:HA	1:A:57:GLU:HG2	22	0.22
(3,1898)	1:A:57:GLU:HA	1:A:57:GLU:HG3	22	0.22
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:124:LEU:HA	4	0.22
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG12	1:A:124:LEU:HA	4	0.22
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:124:LEU:HA	4	0.22
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:124:LEU:HA	4	0.22
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:124:LEU:HA	4	0.22
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:124:LEU:HA	4	0.22
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:124:LEU:HA	21	0.22
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG12	1:A:124:LEU:HA	21	0.22
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:124:LEU:HA	21	0.22
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:124:LEU:HA	21	0.22
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:124:LEU:HA	21	0.22
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:124:LEU:HA	21	0.22
(3,1803)	1:A:43:LEU:HD11	1:A:44:GLY:HA3	7	0.22
(3,1803)	1:A:43:LEU:HD12	1:A:44:GLY:HA3	7	0.22
(3,1803)	1:A:43:LEU:HD13	1:A:44:GLY:HA3	7	0.22
(3,1803)	1:A:43:LEU:HD21	1:A:44:GLY:HA3	7	0.22
(3,1803)	1:A:43:LEU:HD22	1:A:44:GLY:HA3	7	0.22
(3,1803)	1:A:43:LEU:HD23	1:A:44:GLY:HA3	7	0.22
(3,1786)	1:A:40:VAL:HG11	1:A:60:ASP:HB3	6	0.22
(3,1786)	1:A:40:VAL:HG12	1:A:60:ASP:HB3	6	0.22
(3,1786)	1:A:40:VAL:HG13	1:A:60:ASP:HB3	6	0.22
(3,1786)	1:A:40:VAL:HG21	1:A:60:ASP:HB3	6	0.22
(3,1786)	1:A:40:VAL:HG22	1:A:60:ASP:HB3	6	0.22
(3,1786)	1:A:40:VAL:HG23	1:A:60:ASP:HB3	6	0.22
(3,1703)	1:A:24:LYS:HA	1:A:24:LYS:HD2	24	0.22
(3,1703)	1:A:24:LYS:HA	1:A:24:LYS:HD3	24	0.22
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB2	1:A:83:MET:HE1	1	0.22
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB2	1:A:83:MET:HE2	1	0.22
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB2	1:A:83:MET:HE3	1	0.22
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB3	1:A:83:MET:HE1	1	0.22
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB3	1:A:83:MET:HE2	1	0.22
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB3	1:A:83:MET:HE3	1	0.22
(3,164)	1:A:141:GLN:HA	1:A:142:VAL:H	22	0.22
(3,1583)	1:A:10:GLU:H	1:A:81:VAL:HG11	12	0.22
(3,1583)	1:A:10:GLU:H	1:A:81:VAL:HG12	12	0.22
(3,1583)	1:A:10:GLU:H	1:A:81:VAL:HG13	12	0.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,1583)	1:A:10:GLU:H	1:A:81:VAL:HG21	12	0.22
(3,1583)	1:A:10:GLU:H	1:A:81:VAL:HG22	12	0.22
(3,1583)	1:A:10:GLU:H	1:A:81:VAL:HG23	12	0.22
(3,1498)	1:A:64:GLU:HA	1:A:66:VAL:HG21	4	0.22
(3,1498)	1:A:64:GLU:HA	1:A:66:VAL:HG22	4	0.22
(3,1498)	1:A:64:GLU:HA	1:A:66:VAL:HG23	4	0.22
(3,1396)	1:A:83:MET:HB3	1:A:83:MET:HE1	19	0.22
(3,1396)	1:A:83:MET:HB3	1:A:83:MET:HE2	19	0.22
(3,1396)	1:A:83:MET:HB3	1:A:83:MET:HE3	19	0.22
(3,1331)	1:A:47:MET:HA	1:A:47:MET:HG2	15	0.22
(3,1246)	1:A:137:ALA:HB1	1:A:138:ASN:HB3	4	0.22
(3,1246)	1:A:137:ALA:HB2	1:A:138:ASN:HB3	4	0.22
(3,1246)	1:A:137:ALA:HB3	1:A:138:ASN:HB3	4	0.22
(3,1245)	1:A:68:GLU:HA	1:A:68:GLU:HG3	15	0.22
(3,1154)	1:A:111:ARG:HA	1:A:111:ARG:HD2	23	0.22
(3,1154)	1:A:111:ARG:HA	1:A:111:ARG:HD3	23	0.22
(3,1100)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD11	2	0.22
(3,1100)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD12	2	0.22
(3,1100)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD13	2	0.22
(3,1100)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD11	2	0.22
(3,1100)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD12	2	0.22
(3,1100)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD13	2	0.22
(3,1100)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD11	2	0.22
(3,1100)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD12	2	0.22
(3,1100)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD13	2	0.22
(3,1100)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD11	11	0.22
(3,1100)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD12	11	0.22
(3,1100)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD13	11	0.22
(3,1100)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD11	11	0.22
(3,1100)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD12	11	0.22
(3,1100)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD13	11	0.22
(3,1100)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD11	11	0.22
(3,1100)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD12	11	0.22
(3,1100)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD13	11	0.22
(3,1100)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD11	12	0.22
(3,1100)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD12	12	0.22
(3,1100)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD13	12	0.22
(3,1100)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD11	12	0.22
(3,1100)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD12	12	0.22
(3,1100)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD13	12	0.22
(3,1100)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD11	12	0.22
(3,1100)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD12	12	0.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,1100)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD13	12	0.22
(3,1054)	1:A:83:MET:HA	1:A:83:MET:HE1	8	0.22
(3,1054)	1:A:83:MET:HA	1:A:83:MET:HE2	8	0.22
(3,1054)	1:A:83:MET:HA	1:A:83:MET:HE3	8	0.22
(3,1036)	1:A:29:MET:H	1:A:29:MET:HE1	1	0.22
(3,1036)	1:A:29:MET:H	1:A:29:MET:HE2	1	0.22
(3,1036)	1:A:29:MET:H	1:A:29:MET:HE3	1	0.22
(1,2)	1:A:69:ASP:OD1	2:A:201:CA:CA	21	0.22
(1,2)	1:A:69:ASP:OD2	2:A:201:CA:CA	21	0.22
(3,954)	1:A:122:LYS:H	1:A:133:MET:HE1	13	0.21
(3,954)	1:A:122:LYS:H	1:A:133:MET:HE2	13	0.21
(3,954)	1:A:122:LYS:H	1:A:133:MET:HE3	13	0.21
(3,902)	1:A:136:ARG:H	1:A:137:ALA:HB1	9	0.21
(3,902)	1:A:136:ARG:H	1:A:137:ALA:HB2	9	0.21
(3,902)	1:A:136:ARG:H	1:A:137:ALA:HB3	9	0.21
(3,880)	1:A:45:THR:HG21	1:A:49:MET:HB3	8	0.21
(3,880)	1:A:45:THR:HG22	1:A:49:MET:HB3	8	0.21
(3,880)	1:A:45:THR:HG23	1:A:49:MET:HB3	8	0.21
(3,868)	1:A:40:VAL:HG21	1:A:56:LYS:HA	11	0.21
(3,868)	1:A:40:VAL:HG22	1:A:56:LYS:HA	11	0.21
(3,868)	1:A:40:VAL:HG23	1:A:56:LYS:HA	11	0.21
(3,752)	1:A:41:LYS:HG3	1:A:42:GLU:H	14	0.21
(3,691)	1:A:143:LYS:HA	1:A:143:LYS:HE2	21	0.21
(3,691)	1:A:143:LYS:HA	1:A:143:LYS:HE3	21	0.21
(3,665)	1:A:144:LYS:HA	1:A:144:LYS:HE2	18	0.21
(3,665)	1:A:144:LYS:HA	1:A:144:LYS:HE3	18	0.21
(3,646)	1:A:101:LEU:HG	1:A:102:ARG:H	19	0.21
(3,629)	1:A:83:MET:HA	1:A:117:ALA:HB1	13	0.21
(3,629)	1:A:83:MET:HA	1:A:117:ALA:HB2	13	0.21
(3,629)	1:A:83:MET:HA	1:A:117:ALA:HB3	13	0.21
(3,467)	1:A:19:MET:HG3	1:A:20:ILE:H	17	0.21
(3,467)	1:A:19:MET:HG3	1:A:20:ILE:H	19	0.21
(3,460)	1:A:27:PHE:HA	1:A:31:ASP:H	19	0.21
(3,37)	1:A:52:GLN:HE21	1:A:115:MET:HB2	4	0.21
(3,37)	1:A:52:GLN:HE21	1:A:115:MET:HB3	4	0.21
(3,367)	1:A:104:LYS:HB2	1:A:105:PHE:H	6	0.21
(3,367)	1:A:104:LYS:HB3	1:A:105:PHE:H	6	0.21
(3,271)	1:A:39:SER:HA	1:A:41:LYS:H	24	0.21
(3,243)	1:A:120:MET:HE1	1:A:122:LYS:H	13	0.21
(3,243)	1:A:120:MET:HE2	1:A:122:LYS:H	13	0.21
(3,243)	1:A:120:MET:HE3	1:A:122:LYS:H	13	0.21
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG11	1:A:88:LYS:HE2	17	0.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG11	1:A:88:LYS:HE3	17	0.21
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG12	1:A:88:LYS:HE2	17	0.21
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG12	1:A:88:LYS:HE3	17	0.21
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG13	1:A:88:LYS:HE2	17	0.21
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG13	1:A:88:LYS:HE3	17	0.21
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG21	1:A:88:LYS:HE2	17	0.21
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG21	1:A:88:LYS:HE3	17	0.21
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG22	1:A:88:LYS:HE2	17	0.21
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG22	1:A:88:LYS:HE3	17	0.21
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG23	1:A:88:LYS:HE2	17	0.21
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG23	1:A:88:LYS:HE3	17	0.21
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD11	16	0.21
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD12	16	0.21
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD13	16	0.21
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD21	16	0.21
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD22	16	0.21
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD23	16	0.21
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD11	16	0.21
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD12	16	0.21
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD13	16	0.21
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD21	16	0.21
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD22	16	0.21
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD23	16	0.21
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD11	24	0.21
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD12	24	0.21
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD13	24	0.21
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD21	24	0.21
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD22	24	0.21
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD23	24	0.21
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD11	24	0.21
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD12	24	0.21
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD13	24	0.21
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD21	24	0.21
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD22	24	0.21
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD23	24	0.21
(3,1855)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD11	19	0.21
(3,1855)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD12	19	0.21
(3,1855)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD13	19	0.21
(3,1855)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD21	19	0.21
(3,1855)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD22	19	0.21
(3,1855)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD23	19	0.21
(3,1855)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD11	19	0.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,1855)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD12	19	0.21
(3,1855)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD13	19	0.21
(3,1855)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD21	19	0.21
(3,1855)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD22	19	0.21
(3,1855)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD23	19	0.21
(3,1855)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD11	19	0.21
(3,1855)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD12	19	0.21
(3,1855)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD13	19	0.21
(3,1855)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD21	19	0.21
(3,1855)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD22	19	0.21
(3,1855)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD23	19	0.21
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:124:LEU:HA	2	0.21
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG12	1:A:124:LEU:HA	2	0.21
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:124:LEU:HA	2	0.21
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:124:LEU:HA	2	0.21
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:124:LEU:HA	2	0.21
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:124:LEU:HA	2	0.21
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:124:LEU:HA	11	0.21
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG12	1:A:124:LEU:HA	11	0.21
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:124:LEU:HA	11	0.21
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:124:LEU:HA	11	0.21
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:124:LEU:HA	11	0.21
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:124:LEU:HA	11	0.21
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:124:LEU:HA	24	0.21
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG12	1:A:124:LEU:HA	24	0.21
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:124:LEU:HA	24	0.21
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:124:LEU:HA	24	0.21
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:124:LEU:HA	24	0.21
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:124:LEU:HA	24	0.21
(3,1831)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:50:LEU:HG	11	0.21
(3,1831)	1:A:46:VAL:HG12	1:A:50:LEU:HG	11	0.21
(3,1831)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:50:LEU:HG	11	0.21
(3,1831)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:50:LEU:HG	11	0.21
(3,1831)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:50:LEU:HG	11	0.21
(3,1831)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:50:LEU:HG	11	0.21
(3,1732)	1:A:29:MET:HG2	1:A:83:MET:HE1	2	0.21
(3,1732)	1:A:29:MET:HG2	1:A:83:MET:HE2	2	0.21
(3,1732)	1:A:29:MET:HG2	1:A:83:MET:HE3	2	0.21
(3,1732)	1:A:29:MET:HG3	1:A:83:MET:HE1	2	0.21
(3,1732)	1:A:29:MET:HG3	1:A:83:MET:HE2	2	0.21
(3,1732)	1:A:29:MET:HG3	1:A:83:MET:HE3	2	0.21
(3,1732)	1:A:29:MET:HG2	1:A:83:MET:HE1	17	0.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,1732)	1:A:29:MET:HG2	1:A:83:MET:HE2	17	0.21
(3,1732)	1:A:29:MET:HG2	1:A:83:MET:HE3	17	0.21
(3,1732)	1:A:29:MET:HG3	1:A:83:MET:HE1	17	0.21
(3,1732)	1:A:29:MET:HG3	1:A:83:MET:HE2	17	0.21
(3,1732)	1:A:29:MET:HG3	1:A:83:MET:HE3	17	0.21
(3,1732)	1:A:29:MET:HG2	1:A:83:MET:HE1	22	0.21
(3,1732)	1:A:29:MET:HG2	1:A:83:MET:HE2	22	0.21
(3,1732)	1:A:29:MET:HG2	1:A:83:MET:HE3	22	0.21
(3,1732)	1:A:29:MET:HG3	1:A:83:MET:HE1	22	0.21
(3,1732)	1:A:29:MET:HG3	1:A:83:MET:HE2	22	0.21
(3,1732)	1:A:29:MET:HG3	1:A:83:MET:HE3	22	0.21
(3,167)	1:A:64:GLU:H	1:A:67:ASP:H	19	0.21
(3,1614)	1:A:14:TYR:HB2	1:A:87:MET:HE1	7	0.21
(3,1614)	1:A:14:TYR:HB2	1:A:87:MET:HE2	7	0.21
(3,1614)	1:A:14:TYR:HB2	1:A:87:MET:HE3	7	0.21
(3,1614)	1:A:14:TYR:HB3	1:A:87:MET:HE1	7	0.21
(3,1614)	1:A:14:TYR:HB3	1:A:87:MET:HE2	7	0.21
(3,1614)	1:A:14:TYR:HB3	1:A:87:MET:HE3	7	0.21
(3,1498)	1:A:64:GLU:HA	1:A:66:VAL:HG21	8	0.21
(3,1498)	1:A:64:GLU:HA	1:A:66:VAL:HG22	8	0.21
(3,1498)	1:A:64:GLU:HA	1:A:66:VAL:HG23	8	0.21
(3,1498)	1:A:64:GLU:HA	1:A:66:VAL:HG21	14	0.21
(3,1498)	1:A:64:GLU:HA	1:A:66:VAL:HG22	14	0.21
(3,1498)	1:A:64:GLU:HA	1:A:66:VAL:HG23	14	0.21
(3,1498)	1:A:64:GLU:HA	1:A:66:VAL:HG21	21	0.21
(3,1498)	1:A:64:GLU:HA	1:A:66:VAL:HG22	21	0.21
(3,1498)	1:A:64:GLU:HA	1:A:66:VAL:HG23	21	0.21
(3,1435)	1:A:12:ARG:HA	1:A:15:LEU:HG	21	0.21
(3,1414)	1:A:30:PHE:HA	1:A:46:VAL:HB	4	0.21
(3,1378)	1:A:109:PRO:HB3	1:A:111:ARG:H	11	0.21
(3,1331)	1:A:47:MET:HA	1:A:47:MET:HG2	7	0.21
(3,1331)	1:A:47:MET:HA	1:A:47:MET:HG2	10	0.21
(3,1331)	1:A:47:MET:HA	1:A:47:MET:HG2	11	0.21
(3,1331)	1:A:47:MET:HA	1:A:47:MET:HG2	12	0.21
(3,1331)	1:A:47:MET:HA	1:A:47:MET:HG2	20	0.21
(3,1135)	1:A:37:ASP:HB3	1:A:73:THR:HB	23	0.21
(3,1125)	1:A:30:PHE:H	1:A:38:ILE:HD11	21	0.21
(3,1125)	1:A:30:PHE:H	1:A:38:ILE:HD12	21	0.21
(3,1125)	1:A:30:PHE:H	1:A:38:ILE:HD13	21	0.21
(3,1036)	1:A:29:MET:H	1:A:29:MET:HE1	7	0.21
(3,1036)	1:A:29:MET:H	1:A:29:MET:HE2	7	0.21
(3,1036)	1:A:29:MET:H	1:A:29:MET:HE3	7	0.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,2)	1:A:69:ASP:OD1	2:A:201:CA:CA	9	0.21
(1,2)	1:A:69:ASP:OD2	2:A:201:CA:CA	9	0.21
(3,888)	1:A:142:VAL:HG11	1:A:143:LYS:HE2	2	0.2
(3,888)	1:A:142:VAL:HG11	1:A:143:LYS:HE3	2	0.2
(3,888)	1:A:142:VAL:HG12	1:A:143:LYS:HE2	2	0.2
(3,888)	1:A:142:VAL:HG12	1:A:143:LYS:HE3	2	0.2
(3,888)	1:A:142:VAL:HG13	1:A:143:LYS:HE2	2	0.2
(3,888)	1:A:142:VAL:HG13	1:A:143:LYS:HE3	2	0.2
(3,880)	1:A:45:THR:HG21	1:A:49:MET:HB3	5	0.2
(3,880)	1:A:45:THR:HG22	1:A:49:MET:HB3	5	0.2
(3,880)	1:A:45:THR:HG23	1:A:49:MET:HB3	5	0.2
(3,880)	1:A:45:THR:HG21	1:A:49:MET:HB3	15	0.2
(3,880)	1:A:45:THR:HG22	1:A:49:MET:HB3	15	0.2
(3,880)	1:A:45:THR:HG23	1:A:49:MET:HB3	15	0.2
(3,880)	1:A:45:THR:HG21	1:A:49:MET:HB3	21	0.2
(3,880)	1:A:45:THR:HG22	1:A:49:MET:HB3	21	0.2
(3,880)	1:A:45:THR:HG23	1:A:49:MET:HB3	21	0.2
(3,880)	1:A:45:THR:HG21	1:A:49:MET:HB3	23	0.2
(3,880)	1:A:45:THR:HG22	1:A:49:MET:HB3	23	0.2
(3,880)	1:A:45:THR:HG23	1:A:49:MET:HB3	23	0.2
(3,868)	1:A:40:VAL:HG21	1:A:56:LYS:HA	17	0.2
(3,868)	1:A:40:VAL:HG22	1:A:56:LYS:HA	17	0.2
(3,868)	1:A:40:VAL:HG23	1:A:56:LYS:HA	17	0.2
(3,752)	1:A:41:LYS:HG3	1:A:42:GLU:H	1	0.2
(3,752)	1:A:41:LYS:HG3	1:A:42:GLU:H	8	0.2
(3,752)	1:A:41:LYS:HG3	1:A:42:GLU:H	17	0.2
(3,751)	1:A:41:LYS:HG2	1:A:42:GLU:H	9	0.2
(3,665)	1:A:144:LYS:HA	1:A:144:LYS:HE2	22	0.2
(3,665)	1:A:144:LYS:HA	1:A:144:LYS:HE3	22	0.2
(3,646)	1:A:101:LEU:HG	1:A:102:ARG:H	22	0.2
(3,519)	1:A:138:ASN:H	1:A:139:LEU:H	3	0.2
(3,383)	1:A:99:PHE:H	1:A:99:PHE:HB3	25	0.2
(3,365)	1:A:84:VAL:HB	1:A:88:LYS:H	9	0.2
(3,365)	1:A:84:VAL:HB	1:A:88:LYS:H	14	0.2
(3,258)	1:A:82:MET:H	1:A:83:MET:HG2	11	0.2
(3,258)	1:A:82:MET:H	1:A:83:MET:HG3	11	0.2
(3,258)	1:A:82:MET:H	1:A:83:MET:HG2	19	0.2
(3,258)	1:A:82:MET:H	1:A:83:MET:HG3	19	0.2
(3,225)	1:A:58:GLU:H	1:A:58:GLU:HB3	11	0.2
(3,2207)	1:A:140:LYS:HB2	1:A:141:GLN:H	19	0.2
(3,2207)	1:A:140:LYS:HB3	1:A:141:GLN:H	19	0.2
(3,2068)	1:A:102:ARG:HD2	1:A:107:ARG:HB2	13	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,2068)	1:A:102:ARG:HD2	1:A:107:ARG:HB3	13	0.2
(3,2068)	1:A:102:ARG:HD3	1:A:107:ARG:HB2	13	0.2
(3,2068)	1:A:102:ARG:HD3	1:A:107:ARG:HB3	13	0.2
(3,2068)	1:A:102:ARG:HD2	1:A:107:ARG:HB2	17	0.2
(3,2068)	1:A:102:ARG:HD2	1:A:107:ARG:HB3	17	0.2
(3,2068)	1:A:102:ARG:HD3	1:A:107:ARG:HB2	17	0.2
(3,2068)	1:A:102:ARG:HD3	1:A:107:ARG:HB3	17	0.2
(3,2055)	1:A:98:LEU:HD11	1:A:99:PHE:HA	23	0.2
(3,2055)	1:A:98:LEU:HD12	1:A:99:PHE:HA	23	0.2
(3,2055)	1:A:98:LEU:HD13	1:A:99:PHE:HA	23	0.2
(3,2055)	1:A:98:LEU:HD21	1:A:99:PHE:HA	23	0.2
(3,2055)	1:A:98:LEU:HD22	1:A:99:PHE:HA	23	0.2
(3,2055)	1:A:98:LEU:HD23	1:A:99:PHE:HA	23	0.2
(3,2046)	1:A:97:LYS:HB2	1:A:98:LEU:H	24	0.2
(3,2046)	1:A:97:LYS:HB3	1:A:98:LEU:H	24	0.2
(3,2046)	1:A:97:LYS:HB2	1:A:98:LEU:H	25	0.2
(3,2046)	1:A:97:LYS:HB3	1:A:98:LEU:H	25	0.2
(3,200)	1:A:109:PRO:HB3	1:A:110:LEU:H	25	0.2
(3,2)	1:A:31:ASP:HA	1:A:34:GLY:H	20	0.2
(3,1987)	1:A:84:VAL:HG11	1:A:88:LYS:HB2	7	0.2
(3,1987)	1:A:84:VAL:HG11	1:A:88:LYS:HB3	7	0.2
(3,1987)	1:A:84:VAL:HG12	1:A:88:LYS:HB2	7	0.2
(3,1987)	1:A:84:VAL:HG12	1:A:88:LYS:HB3	7	0.2
(3,1987)	1:A:84:VAL:HG13	1:A:88:LYS:HB2	7	0.2
(3,1987)	1:A:84:VAL:HG13	1:A:88:LYS:HB3	7	0.2
(3,1987)	1:A:84:VAL:HG21	1:A:88:LYS:HB2	7	0.2
(3,1987)	1:A:84:VAL:HG21	1:A:88:LYS:HB3	7	0.2
(3,1987)	1:A:84:VAL:HG22	1:A:88:LYS:HB2	7	0.2
(3,1987)	1:A:84:VAL:HG22	1:A:88:LYS:HB3	7	0.2
(3,1987)	1:A:84:VAL:HG23	1:A:88:LYS:HB2	7	0.2
(3,1987)	1:A:84:VAL:HG23	1:A:88:LYS:HB3	7	0.2
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD11	17	0.2
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD12	17	0.2
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD13	17	0.2
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD21	17	0.2
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD22	17	0.2
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD23	17	0.2
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD11	17	0.2
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD12	17	0.2
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD13	17	0.2
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD21	17	0.2
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD22	17	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD23	17	0.2
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD11	20	0.2
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD12	20	0.2
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD13	20	0.2
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD21	20	0.2
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD22	20	0.2
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD23	20	0.2
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD11	20	0.2
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD12	20	0.2
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD13	20	0.2
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD21	20	0.2
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD22	20	0.2
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD23	20	0.2
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD11	21	0.2
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD12	21	0.2
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD13	21	0.2
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD21	21	0.2
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD22	21	0.2
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD23	21	0.2
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD11	21	0.2
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD12	21	0.2
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD13	21	0.2
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD21	21	0.2
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD22	21	0.2
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD23	21	0.2
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG11	1:A:85:ARG:HD2	8	0.2
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG11	1:A:85:ARG:HD3	8	0.2
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG12	1:A:85:ARG:HD2	8	0.2
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG12	1:A:85:ARG:HD3	8	0.2
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG13	1:A:85:ARG:HD2	8	0.2
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG13	1:A:85:ARG:HD3	8	0.2
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG21	1:A:85:ARG:HD2	8	0.2
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG21	1:A:85:ARG:HD3	8	0.2
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG22	1:A:85:ARG:HD2	8	0.2
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG22	1:A:85:ARG:HD3	8	0.2
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG23	1:A:85:ARG:HD2	8	0.2
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG23	1:A:85:ARG:HD3	8	0.2
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG11	1:A:85:ARG:HD2	22	0.2
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG11	1:A:85:ARG:HD3	22	0.2
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG12	1:A:85:ARG:HD2	22	0.2
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG12	1:A:85:ARG:HD3	22	0.2
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG13	1:A:85:ARG:HD2	22	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG13	1:A:85:ARG:HD3	22	0.2
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG21	1:A:85:ARG:HD2	22	0.2
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG21	1:A:85:ARG:HD3	22	0.2
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG22	1:A:85:ARG:HD2	22	0.2
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG22	1:A:85:ARG:HD3	22	0.2
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG23	1:A:85:ARG:HD2	22	0.2
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG23	1:A:85:ARG:HD3	22	0.2
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG11	1:A:85:ARG:HD2	23	0.2
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG11	1:A:85:ARG:HD3	23	0.2
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG12	1:A:85:ARG:HD2	23	0.2
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG12	1:A:85:ARG:HD3	23	0.2
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG13	1:A:85:ARG:HD2	23	0.2
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG13	1:A:85:ARG:HD3	23	0.2
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG21	1:A:85:ARG:HD2	23	0.2
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG21	1:A:85:ARG:HD3	23	0.2
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG22	1:A:85:ARG:HD2	23	0.2
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG22	1:A:85:ARG:HD3	23	0.2
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG23	1:A:85:ARG:HD2	23	0.2
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG23	1:A:85:ARG:HD3	23	0.2
(3,1920)	1:A:68:GLU:HA	1:A:68:GLU:HG2	5	0.2
(3,1920)	1:A:68:GLU:HA	1:A:68:GLU:HG3	5	0.2
(3,1910)	1:A:61:ALA:HA	1:A:64:GLU:HG2	7	0.2
(3,1910)	1:A:61:ALA:HA	1:A:64:GLU:HG3	7	0.2
(3,1910)	1:A:61:ALA:HA	1:A:64:GLU:HG2	20	0.2
(3,1910)	1:A:61:ALA:HA	1:A:64:GLU:HG3	20	0.2
(3,1845)	1:A:47:MET:HE1	1:A:59:LEU:HD11	2	0.2
(3,1845)	1:A:47:MET:HE1	1:A:59:LEU:HD12	2	0.2
(3,1845)	1:A:47:MET:HE1	1:A:59:LEU:HD13	2	0.2
(3,1845)	1:A:47:MET:HE1	1:A:59:LEU:HD21	2	0.2
(3,1845)	1:A:47:MET:HE1	1:A:59:LEU:HD22	2	0.2
(3,1845)	1:A:47:MET:HE1	1:A:59:LEU:HD23	2	0.2
(3,1845)	1:A:47:MET:HE2	1:A:59:LEU:HD11	2	0.2
(3,1845)	1:A:47:MET:HE2	1:A:59:LEU:HD12	2	0.2
(3,1845)	1:A:47:MET:HE2	1:A:59:LEU:HD13	2	0.2
(3,1845)	1:A:47:MET:HE2	1:A:59:LEU:HD21	2	0.2
(3,1845)	1:A:47:MET:HE2	1:A:59:LEU:HD22	2	0.2
(3,1845)	1:A:47:MET:HE2	1:A:59:LEU:HD23	2	0.2
(3,1845)	1:A:47:MET:HE3	1:A:59:LEU:HD11	2	0.2
(3,1845)	1:A:47:MET:HE3	1:A:59:LEU:HD12	2	0.2
(3,1845)	1:A:47:MET:HE3	1:A:59:LEU:HD13	2	0.2
(3,1845)	1:A:47:MET:HE3	1:A:59:LEU:HD21	2	0.2
(3,1845)	1:A:47:MET:HE3	1:A:59:LEU:HD22	2	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,1845)	1:A:47:MET:HE3	1:A:59:LEU:HD23	2	0.2
(3,1732)	1:A:29:MET:HG2	1:A:83:MET:HE1	5	0.2
(3,1732)	1:A:29:MET:HG2	1:A:83:MET:HE2	5	0.2
(3,1732)	1:A:29:MET:HG2	1:A:83:MET:HE3	5	0.2
(3,1732)	1:A:29:MET:HG3	1:A:83:MET:HE1	5	0.2
(3,1732)	1:A:29:MET:HG3	1:A:83:MET:HE2	5	0.2
(3,1732)	1:A:29:MET:HG3	1:A:83:MET:HE3	5	0.2
(3,167)	1:A:64:GLU:H	1:A:67:ASP:H	2	0.2
(3,167)	1:A:64:GLU:H	1:A:67:ASP:H	10	0.2
(3,1628)	1:A:15:LEU:HG	1:A:135:LEU:HD11	12	0.2
(3,1628)	1:A:15:LEU:HG	1:A:135:LEU:HD12	12	0.2
(3,1628)	1:A:15:LEU:HG	1:A:135:LEU:HD13	12	0.2
(3,1628)	1:A:15:LEU:HG	1:A:135:LEU:HD21	12	0.2
(3,1628)	1:A:15:LEU:HG	1:A:135:LEU:HD22	12	0.2
(3,1628)	1:A:15:LEU:HG	1:A:135:LEU:HD23	12	0.2
(3,1607)	1:A:14:TYR:H	1:A:15:LEU:HD11	22	0.2
(3,1607)	1:A:14:TYR:H	1:A:15:LEU:HD12	22	0.2
(3,1607)	1:A:14:TYR:H	1:A:15:LEU:HD13	22	0.2
(3,1607)	1:A:14:TYR:H	1:A:15:LEU:HD21	22	0.2
(3,1607)	1:A:14:TYR:H	1:A:15:LEU:HD22	22	0.2
(3,1607)	1:A:14:TYR:H	1:A:15:LEU:HD23	22	0.2
(3,1560)	1:A:115:MET:HE1	1:A:119:ALA:HB1	16	0.2
(3,1560)	1:A:115:MET:HE1	1:A:119:ALA:HB2	16	0.2
(3,1560)	1:A:115:MET:HE1	1:A:119:ALA:HB3	16	0.2
(3,1560)	1:A:115:MET:HE2	1:A:119:ALA:HB1	16	0.2
(3,1560)	1:A:115:MET:HE2	1:A:119:ALA:HB2	16	0.2
(3,1560)	1:A:115:MET:HE2	1:A:119:ALA:HB3	16	0.2
(3,1560)	1:A:115:MET:HE3	1:A:119:ALA:HB1	16	0.2
(3,1560)	1:A:115:MET:HE3	1:A:119:ALA:HB2	16	0.2
(3,1560)	1:A:115:MET:HE3	1:A:119:ALA:HB3	16	0.2
(3,1498)	1:A:64:GLU:HA	1:A:66:VAL:HG21	11	0.2
(3,1498)	1:A:64:GLU:HA	1:A:66:VAL:HG22	11	0.2
(3,1498)	1:A:64:GLU:HA	1:A:66:VAL:HG23	11	0.2
(3,1487)	1:A:61:ALA:HA	1:A:64:GLU:HB2	5	0.2
(3,1452)	1:A:30:PHE:HA	1:A:46:VAL:H	1	0.2
(3,1409)	1:A:46:VAL:HB	1:A:47:MET:H	21	0.2
(3,1331)	1:A:47:MET:HA	1:A:47:MET:HG2	1	0.2
(3,1331)	1:A:47:MET:HA	1:A:47:MET:HG2	3	0.2
(3,1331)	1:A:47:MET:HA	1:A:47:MET:HG2	4	0.2
(3,1331)	1:A:47:MET:HA	1:A:47:MET:HG2	5	0.2
(3,1331)	1:A:47:MET:HA	1:A:47:MET:HG2	9	0.2
(3,1331)	1:A:47:MET:HA	1:A:47:MET:HG2	14	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,1331)	1:A:47:MET:HA	1:A:47:MET:HG2	16	0.2
(3,1331)	1:A:47:MET:HA	1:A:47:MET:HG2	17	0.2
(3,1331)	1:A:47:MET:HA	1:A:47:MET:HG2	23	0.2
(3,1331)	1:A:47:MET:HA	1:A:47:MET:HG2	25	0.2
(3,1318)	1:A:7:GLN:HG3	1:A:10:GLU:HB2	3	0.2
(3,1318)	1:A:7:GLN:HG3	1:A:10:GLU:HB3	3	0.2
(3,1182)	1:A:56:LYS:HD2	1:A:59:LEU:HB2	6	0.2
(3,1170)	1:A:12:ARG:HG2	1:A:20:ILE:HD11	17	0.2
(3,1170)	1:A:12:ARG:HG2	1:A:20:ILE:HD12	17	0.2
(3,1170)	1:A:12:ARG:HG2	1:A:20:ILE:HD13	17	0.2
(3,1170)	1:A:12:ARG:HG3	1:A:20:ILE:HD11	17	0.2
(3,1170)	1:A:12:ARG:HG3	1:A:20:ILE:HD12	17	0.2
(3,1170)	1:A:12:ARG:HG3	1:A:20:ILE:HD13	17	0.2
(3,1152)	1:A:114:ARG:HA	1:A:114:ARG:HD2	13	0.2
(3,1149)	1:A:136:ARG:HA	1:A:136:ARG:HD2	5	0.2
(3,1149)	1:A:136:ARG:HA	1:A:136:ARG:HD3	5	0.2
(3,1125)	1:A:30:PHE:H	1:A:38:ILE:HD11	16	0.2
(3,1125)	1:A:30:PHE:H	1:A:38:ILE:HD12	16	0.2
(3,1125)	1:A:30:PHE:H	1:A:38:ILE:HD13	16	0.2
(3,1125)	1:A:30:PHE:H	1:A:38:ILE:HD11	25	0.2
(3,1125)	1:A:30:PHE:H	1:A:38:ILE:HD12	25	0.2
(3,1125)	1:A:30:PHE:H	1:A:38:ILE:HD13	25	0.2
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB1	1:A:82:MET:HE1	2	0.2
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB1	1:A:82:MET:HE2	2	0.2
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB1	1:A:82:MET:HE3	2	0.2
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB2	1:A:82:MET:HE1	2	0.2
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB2	1:A:82:MET:HE2	2	0.2
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB2	1:A:82:MET:HE3	2	0.2
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB3	1:A:82:MET:HE1	2	0.2
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB3	1:A:82:MET:HE2	2	0.2
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB3	1:A:82:MET:HE3	2	0.2
(3,1065)	1:A:82:MET:HG2	1:A:83:MET:HE1	13	0.2
(3,1065)	1:A:82:MET:HG2	1:A:83:MET:HE2	13	0.2
(3,1065)	1:A:82:MET:HG2	1:A:83:MET:HE3	13	0.2
(3,1065)	1:A:82:MET:HG3	1:A:83:MET:HE1	13	0.2
(3,1065)	1:A:82:MET:HG3	1:A:83:MET:HE2	13	0.2
(3,1065)	1:A:82:MET:HG3	1:A:83:MET:HE3	13	0.2
(3,1054)	1:A:83:MET:HA	1:A:83:MET:HE1	9	0.2
(3,1054)	1:A:83:MET:HA	1:A:83:MET:HE2	9	0.2
(3,1054)	1:A:83:MET:HA	1:A:83:MET:HE3	9	0.2
(3,1054)	1:A:83:MET:HA	1:A:83:MET:HE1	12	0.2
(3,1054)	1:A:83:MET:HA	1:A:83:MET:HE2	12	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,1054)	1:A:83:MET:HA	1:A:83:MET:HE3	12	0.2
(3,10)	1:A:52:GLN:HB2	1:A:53:THR:H	13	0.2
(3,981)	1:A:121:LEU:HG	1:A:133:MET:HE1	23	0.19
(3,981)	1:A:121:LEU:HG	1:A:133:MET:HE2	23	0.19
(3,981)	1:A:121:LEU:HG	1:A:133:MET:HE3	23	0.19
(3,926)	1:A:87:MET:HE1	1:A:91:ALA:HB1	3	0.19
(3,926)	1:A:87:MET:HE1	1:A:91:ALA:HB2	3	0.19
(3,926)	1:A:87:MET:HE1	1:A:91:ALA:HB3	3	0.19
(3,926)	1:A:87:MET:HE2	1:A:91:ALA:HB1	3	0.19
(3,926)	1:A:87:MET:HE2	1:A:91:ALA:HB2	3	0.19
(3,926)	1:A:87:MET:HE2	1:A:91:ALA:HB3	3	0.19
(3,926)	1:A:87:MET:HE3	1:A:91:ALA:HB1	3	0.19
(3,926)	1:A:87:MET:HE3	1:A:91:ALA:HB2	3	0.19
(3,926)	1:A:87:MET:HE3	1:A:91:ALA:HB3	3	0.19
(3,922)	1:A:19:MET:HE1	1:A:135:LEU:HA	6	0.19
(3,922)	1:A:19:MET:HE2	1:A:135:LEU:HA	6	0.19
(3,922)	1:A:19:MET:HE3	1:A:135:LEU:HA	6	0.19
(3,915)	1:A:19:MET:HE1	1:A:135:LEU:H	2	0.19
(3,915)	1:A:19:MET:HE2	1:A:135:LEU:H	2	0.19
(3,915)	1:A:19:MET:HE3	1:A:135:LEU:H	2	0.19
(3,905)	1:A:31:ASP:H	1:A:32:ALA:HB1	22	0.19
(3,905)	1:A:31:ASP:H	1:A:32:ALA:HB2	22	0.19
(3,905)	1:A:31:ASP:H	1:A:32:ALA:HB3	22	0.19
(3,880)	1:A:45:THR:HG21	1:A:49:MET:HB3	4	0.19
(3,880)	1:A:45:THR:HG22	1:A:49:MET:HB3	4	0.19
(3,880)	1:A:45:THR:HG23	1:A:49:MET:HB3	4	0.19
(3,880)	1:A:45:THR:HG21	1:A:49:MET:HB3	13	0.19
(3,880)	1:A:45:THR:HG22	1:A:49:MET:HB3	13	0.19
(3,880)	1:A:45:THR:HG23	1:A:49:MET:HB3	13	0.19
(3,873)	1:A:53:THR:HG21	1:A:54:PRO:HD2	12	0.19
(3,873)	1:A:53:THR:HG22	1:A:54:PRO:HD2	12	0.19
(3,873)	1:A:53:THR:HG23	1:A:54:PRO:HD2	12	0.19
(3,868)	1:A:40:VAL:HG21	1:A:56:LYS:HA	12	0.19
(3,868)	1:A:40:VAL:HG22	1:A:56:LYS:HA	12	0.19
(3,868)	1:A:40:VAL:HG23	1:A:56:LYS:HA	12	0.19
(3,868)	1:A:40:VAL:HG21	1:A:56:LYS:HA	13	0.19
(3,868)	1:A:40:VAL:HG22	1:A:56:LYS:HA	13	0.19
(3,868)	1:A:40:VAL:HG23	1:A:56:LYS:HA	13	0.19
(3,854)	1:A:4:MET:HB2	1:A:5:THR:HG21	14	0.19
(3,854)	1:A:4:MET:HB2	1:A:5:THR:HG22	14	0.19
(3,854)	1:A:4:MET:HB2	1:A:5:THR:HG23	14	0.19
(3,854)	1:A:4:MET:HB3	1:A:5:THR:HG21	14	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,854)	1:A:4:MET:HB3	1:A:5:THR:HG22	14	0.19
(3,854)	1:A:4:MET:HB3	1:A:5:THR:HG23	14	0.19
(3,825)	1:A:39:SER:H	1:A:73:THR:HG21	14	0.19
(3,825)	1:A:39:SER:H	1:A:73:THR:HG22	14	0.19
(3,825)	1:A:39:SER:H	1:A:73:THR:HG23	14	0.19
(3,817)	1:A:83:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD21	11	0.19
(3,817)	1:A:83:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD22	11	0.19
(3,817)	1:A:83:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD23	11	0.19
(3,817)	1:A:83:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD21	11	0.19
(3,817)	1:A:83:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD22	11	0.19
(3,817)	1:A:83:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD23	11	0.19
(3,817)	1:A:83:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD21	11	0.19
(3,817)	1:A:83:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD22	11	0.19
(3,817)	1:A:83:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD23	11	0.19
(3,777)	1:A:11:ALA:HB1	1:A:84:VAL:HG11	14	0.19
(3,777)	1:A:11:ALA:HB1	1:A:84:VAL:HG12	14	0.19
(3,777)	1:A:11:ALA:HB1	1:A:84:VAL:HG13	14	0.19
(3,777)	1:A:11:ALA:HB2	1:A:84:VAL:HG11	14	0.19
(3,777)	1:A:11:ALA:HB2	1:A:84:VAL:HG12	14	0.19
(3,777)	1:A:11:ALA:HB2	1:A:84:VAL:HG13	14	0.19
(3,777)	1:A:11:ALA:HB3	1:A:84:VAL:HG11	14	0.19
(3,777)	1:A:11:ALA:HB3	1:A:84:VAL:HG12	14	0.19
(3,777)	1:A:11:ALA:HB3	1:A:84:VAL:HG13	14	0.19
(3,752)	1:A:41:LYS:HG3	1:A:42:GLU:H	19	0.19
(3,676)	1:A:24:LYS:HA	1:A:24:LYS:HD2	10	0.19
(3,646)	1:A:101:LEU:HG	1:A:102:ARG:H	25	0.19
(3,629)	1:A:83:MET:HA	1:A:117:ALA:HB1	1	0.19
(3,629)	1:A:83:MET:HA	1:A:117:ALA:HB2	1	0.19
(3,629)	1:A:83:MET:HA	1:A:117:ALA:HB3	1	0.19
(3,467)	1:A:19:MET:HG3	1:A:20:ILE:H	13	0.19
(3,365)	1:A:84:VAL:HB	1:A:88:LYS:H	16	0.19
(3,2199)	1:A:139:LEU:H	1:A:139:LEU:HD11	9	0.19
(3,2199)	1:A:139:LEU:H	1:A:139:LEU:HD12	9	0.19
(3,2199)	1:A:139:LEU:H	1:A:139:LEU:HD13	9	0.19
(3,2199)	1:A:139:LEU:H	1:A:139:LEU:HD21	9	0.19
(3,2199)	1:A:139:LEU:H	1:A:139:LEU:HD22	9	0.19
(3,2199)	1:A:139:LEU:H	1:A:139:LEU:HD23	9	0.19
(3,2188)	1:A:135:LEU:HD11	1:A:136:ARG:H	20	0.19
(3,2188)	1:A:135:LEU:HD12	1:A:136:ARG:H	20	0.19
(3,2188)	1:A:135:LEU:HD13	1:A:136:ARG:H	20	0.19
(3,2188)	1:A:135:LEU:HD21	1:A:136:ARG:H	20	0.19
(3,2188)	1:A:135:LEU:HD22	1:A:136:ARG:H	20	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,2188)	1:A:135:LEU:HD23	1:A:136:ARG:H	20	0.19
(3,2068)	1:A:102:ARG:HD2	1:A:107:ARG:HB2	1	0.19
(3,2068)	1:A:102:ARG:HD2	1:A:107:ARG:HB3	1	0.19
(3,2068)	1:A:102:ARG:HD3	1:A:107:ARG:HB2	1	0.19
(3,2068)	1:A:102:ARG:HD3	1:A:107:ARG:HB3	1	0.19
(3,2058)	1:A:100:ASP:HB2	1:A:101:LEU:H	4	0.19
(3,2058)	1:A:100:ASP:HB3	1:A:101:LEU:H	4	0.19
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG11	1:A:88:LYS:HG2	1	0.19
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG11	1:A:88:LYS:HG3	1	0.19
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG12	1:A:88:LYS:HG2	1	0.19
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG12	1:A:88:LYS:HG3	1	0.19
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG13	1:A:88:LYS:HG2	1	0.19
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG13	1:A:88:LYS:HG3	1	0.19
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG21	1:A:88:LYS:HG2	1	0.19
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG21	1:A:88:LYS:HG3	1	0.19
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG22	1:A:88:LYS:HG2	1	0.19
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG22	1:A:88:LYS:HG3	1	0.19
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG23	1:A:88:LYS:HG2	1	0.19
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG23	1:A:88:LYS:HG3	1	0.19
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD11	3	0.19
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD12	3	0.19
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD13	3	0.19
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD21	3	0.19
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD22	3	0.19
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD23	3	0.19
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD11	3	0.19
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD12	3	0.19
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD13	3	0.19
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD21	3	0.19
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD22	3	0.19
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD23	3	0.19
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD11	10	0.19
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD12	10	0.19
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD13	10	0.19
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD21	10	0.19
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD22	10	0.19
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD23	10	0.19
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD11	10	0.19
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD12	10	0.19
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD13	10	0.19
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD21	10	0.19
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD22	10	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD23	10	0.19
(3,1757)	1:A:35:GLY:H	1:A:36:GLY:HA2	19	0.19
(3,1757)	1:A:35:GLY:H	1:A:36:GLY:HA3	19	0.19
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB2	1:A:83:MET:HE1	12	0.19
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB2	1:A:83:MET:HE2	12	0.19
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB2	1:A:83:MET:HE3	12	0.19
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB3	1:A:83:MET:HE1	12	0.19
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB3	1:A:83:MET:HE2	12	0.19
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB3	1:A:83:MET:HE3	12	0.19
(3,167)	1:A:64:GLU:H	1:A:67:ASP:H	9	0.19
(3,167)	1:A:64:GLU:H	1:A:67:ASP:H	20	0.19
(3,1647)	1:A:17:GLU:HA	1:A:17:GLU:HG2	4	0.19
(3,1647)	1:A:17:GLU:HA	1:A:17:GLU:HG3	4	0.19
(3,1527)	1:A:104:LYS:HA	1:A:104:LYS:HD2	11	0.19
(3,1527)	1:A:104:LYS:HA	1:A:104:LYS:HD3	11	0.19
(3,1527)	1:A:104:LYS:HA	1:A:104:LYS:HD2	25	0.19
(3,1527)	1:A:104:LYS:HA	1:A:104:LYS:HD3	25	0.19
(3,1498)	1:A:64:GLU:HA	1:A:66:VAL:HG21	7	0.19
(3,1498)	1:A:64:GLU:HA	1:A:66:VAL:HG22	7	0.19
(3,1498)	1:A:64:GLU:HA	1:A:66:VAL:HG23	7	0.19
(3,1414)	1:A:30:PHE:HA	1:A:46:VAL:HB	8	0.19
(3,14)	1:A:31:ASP:H	1:A:32:ALA:H	22	0.19
(3,1382)	1:A:76:PHE:HA	1:A:79:PHE:HB2	4	0.19
(3,1378)	1:A:109:PRO:HB3	1:A:111:ARG:H	23	0.19
(3,1359)	1:A:130:LYS:H	1:A:131:VAL:HA	17	0.19
(3,1347)	1:A:97:LYS:HB2	1:A:98:LEU:H	25	0.19
(3,1331)	1:A:47:MET:HA	1:A:47:MET:HG2	13	0.19
(3,1303)	1:A:9:ALA:HB1	1:A:10:GLU:HG3	13	0.19
(3,1303)	1:A:9:ALA:HB2	1:A:10:GLU:HG3	13	0.19
(3,1303)	1:A:9:ALA:HB3	1:A:10:GLU:HG3	13	0.19
(3,1254)	1:A:40:VAL:HA	1:A:43:LEU:HG	22	0.19
(3,1245)	1:A:68:GLU:HA	1:A:68:GLU:HG3	5	0.19
(3,1245)	1:A:68:GLU:HA	1:A:68:GLU:HG3	14	0.19
(3,1245)	1:A:68:GLU:HA	1:A:68:GLU:HG3	22	0.19
(3,1206)	1:A:59:LEU:HB2	1:A:63:ILE:HD11	8	0.19
(3,1206)	1:A:59:LEU:HB2	1:A:63:ILE:HD12	8	0.19
(3,1206)	1:A:59:LEU:HB2	1:A:63:ILE:HD13	8	0.19
(3,1135)	1:A:37:ASP:HB3	1:A:73:THR:HB	14	0.19
(3,113)	1:A:104:LYS:HA	1:A:106:LYS:H	25	0.19
(3,1125)	1:A:30:PHE:H	1:A:38:ILE:HD11	2	0.19
(3,1125)	1:A:30:PHE:H	1:A:38:ILE:HD12	2	0.19
(3,1125)	1:A:30:PHE:H	1:A:38:ILE:HD13	2	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,1106)	1:A:63:ILE:HG21	1:A:73:THR:HA	2	0.19
(3,1106)	1:A:63:ILE:HG22	1:A:73:THR:HA	2	0.19
(3,1106)	1:A:63:ILE:HG23	1:A:73:THR:HA	2	0.19
(3,107)	1:A:136:ARG:HG2	1:A:137:ALA:H	11	0.19
(3,107)	1:A:136:ARG:HG3	1:A:137:ALA:H	11	0.19
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB1	1:A:82:MET:HE1	11	0.19
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB1	1:A:82:MET:HE2	11	0.19
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB1	1:A:82:MET:HE3	11	0.19
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB2	1:A:82:MET:HE1	11	0.19
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB2	1:A:82:MET:HE2	11	0.19
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB2	1:A:82:MET:HE3	11	0.19
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB3	1:A:82:MET:HE1	11	0.19
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB3	1:A:82:MET:HE2	11	0.19
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB3	1:A:82:MET:HE3	11	0.19
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB1	1:A:82:MET:HE1	18	0.19
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB1	1:A:82:MET:HE2	18	0.19
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB1	1:A:82:MET:HE3	18	0.19
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB2	1:A:82:MET:HE1	18	0.19
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB2	1:A:82:MET:HE2	18	0.19
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB2	1:A:82:MET:HE3	18	0.19
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB3	1:A:82:MET:HE1	18	0.19
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB3	1:A:82:MET:HE2	18	0.19
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB3	1:A:82:MET:HE3	18	0.19
(3,1049)	1:A:47:MET:HE1	1:A:55:THR:H	5	0.19
(3,1049)	1:A:47:MET:HE2	1:A:55:THR:H	5	0.19
(3,1049)	1:A:47:MET:HE3	1:A:55:THR:H	5	0.19
(3,888)	1:A:142:VAL:HG11	1:A:143:LYS:HE2	25	0.18
(3,888)	1:A:142:VAL:HG11	1:A:143:LYS:HE3	25	0.18
(3,888)	1:A:142:VAL:HG12	1:A:143:LYS:HE2	25	0.18
(3,888)	1:A:142:VAL:HG12	1:A:143:LYS:HE3	25	0.18
(3,888)	1:A:142:VAL:HG13	1:A:143:LYS:HE2	25	0.18
(3,888)	1:A:142:VAL:HG13	1:A:143:LYS:HE3	25	0.18
(3,881)	1:A:102:ARG:HG2	1:A:108:PRO:HD3	12	0.18
(3,881)	1:A:102:ARG:HG3	1:A:108:PRO:HD3	12	0.18
(3,880)	1:A:45:THR:HG21	1:A:49:MET:HB3	7	0.18
(3,880)	1:A:45:THR:HG22	1:A:49:MET:HB3	7	0.18
(3,880)	1:A:45:THR:HG23	1:A:49:MET:HB3	7	0.18
(3,880)	1:A:45:THR:HG21	1:A:49:MET:HB3	12	0.18
(3,880)	1:A:45:THR:HG22	1:A:49:MET:HB3	12	0.18
(3,880)	1:A:45:THR:HG23	1:A:49:MET:HB3	12	0.18
(3,880)	1:A:45:THR:HG21	1:A:49:MET:HB3	20	0.18
(3,880)	1:A:45:THR:HG22	1:A:49:MET:HB3	20	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,880)	1:A:45:THR:HG23	1:A:49:MET:HB3	20	0.18
(3,880)	1:A:45:THR:HG21	1:A:49:MET:HB3	22	0.18
(3,880)	1:A:45:THR:HG22	1:A:49:MET:HB3	22	0.18
(3,880)	1:A:45:THR:HG23	1:A:49:MET:HB3	22	0.18
(3,876)	1:A:142:VAL:HG21	1:A:143:LYS:HG2	18	0.18
(3,876)	1:A:142:VAL:HG21	1:A:143:LYS:HG3	18	0.18
(3,876)	1:A:142:VAL:HG22	1:A:143:LYS:HG2	18	0.18
(3,876)	1:A:142:VAL:HG22	1:A:143:LYS:HG3	18	0.18
(3,876)	1:A:142:VAL:HG23	1:A:143:LYS:HG2	18	0.18
(3,876)	1:A:142:VAL:HG23	1:A:143:LYS:HG3	18	0.18
(3,873)	1:A:53:THR:HG21	1:A:54:PRO:HD2	11	0.18
(3,873)	1:A:53:THR:HG22	1:A:54:PRO:HD2	11	0.18
(3,873)	1:A:53:THR:HG23	1:A:54:PRO:HD2	11	0.18
(3,868)	1:A:40:VAL:HG21	1:A:56:LYS:HA	14	0.18
(3,868)	1:A:40:VAL:HG22	1:A:56:LYS:HA	14	0.18
(3,868)	1:A:40:VAL:HG23	1:A:56:LYS:HA	14	0.18
(3,854)	1:A:4:MET:HB2	1:A:5:THR:HG21	25	0.18
(3,854)	1:A:4:MET:HB2	1:A:5:THR:HG22	25	0.18
(3,854)	1:A:4:MET:HB2	1:A:5:THR:HG23	25	0.18
(3,854)	1:A:4:MET:HB3	1:A:5:THR:HG21	25	0.18
(3,854)	1:A:4:MET:HB3	1:A:5:THR:HG22	25	0.18
(3,854)	1:A:4:MET:HB3	1:A:5:THR:HG23	25	0.18
(3,825)	1:A:39:SER:H	1:A:73:THR:HG21	4	0.18
(3,825)	1:A:39:SER:H	1:A:73:THR:HG22	4	0.18
(3,825)	1:A:39:SER:H	1:A:73:THR:HG23	4	0.18
(3,825)	1:A:39:SER:H	1:A:73:THR:HG21	18	0.18
(3,825)	1:A:39:SER:H	1:A:73:THR:HG22	18	0.18
(3,825)	1:A:39:SER:H	1:A:73:THR:HG23	18	0.18
(3,752)	1:A:41:LYS:HG3	1:A:42:GLU:H	24	0.18
(3,691)	1:A:143:LYS:HA	1:A:143:LYS:HE2	12	0.18
(3,691)	1:A:143:LYS:HA	1:A:143:LYS:HE3	12	0.18
(3,691)	1:A:143:LYS:HA	1:A:143:LYS:HE2	13	0.18
(3,691)	1:A:143:LYS:HA	1:A:143:LYS:HE3	13	0.18
(3,686)	1:A:25:ALA:H	1:A:125:LEU:HD11	19	0.18
(3,686)	1:A:25:ALA:H	1:A:125:LEU:HD12	19	0.18
(3,686)	1:A:25:ALA:H	1:A:125:LEU:HD13	19	0.18
(3,524)	1:A:71:SER:H	1:A:72:GLY:H	5	0.18
(3,467)	1:A:19:MET:HG3	1:A:20:ILE:H	22	0.18
(3,367)	1:A:104:LYS:HB2	1:A:105:PHE:H	13	0.18
(3,367)	1:A:104:LYS:HB3	1:A:105:PHE:H	13	0.18
(3,243)	1:A:120:MET:HE1	1:A:122:LYS:H	8	0.18
(3,243)	1:A:120:MET:HE2	1:A:122:LYS:H	8	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,243)	1:A:120:MET:HE3	1:A:122:LYS:H	8	0.18
(3,2198)	1:A:139:LEU:H	1:A:139:LEU:HB2	16	0.18
(3,2198)	1:A:139:LEU:H	1:A:139:LEU:HB3	16	0.18
(3,2105)	1:A:116:SER:HB2	1:A:117:ALA:HB1	3	0.18
(3,2105)	1:A:116:SER:HB2	1:A:117:ALA:HB2	3	0.18
(3,2105)	1:A:116:SER:HB2	1:A:117:ALA:HB3	3	0.18
(3,2105)	1:A:116:SER:HB3	1:A:117:ALA:HB1	3	0.18
(3,2105)	1:A:116:SER:HB3	1:A:117:ALA:HB2	3	0.18
(3,2105)	1:A:116:SER:HB3	1:A:117:ALA:HB3	3	0.18
(3,2090)	1:A:114:ARG:H	1:A:114:ARG:HB2	15	0.18
(3,2090)	1:A:114:ARG:H	1:A:114:ARG:HB3	15	0.18
(3,2072)	1:A:104:LYS:HG2	1:A:105:PHE:H	1	0.18
(3,2072)	1:A:104:LYS:HG3	1:A:105:PHE:H	1	0.18
(3,2066)	1:A:102:ARG:HG2	1:A:107:ARG:HB2	13	0.18
(3,2066)	1:A:102:ARG:HG2	1:A:107:ARG:HB3	13	0.18
(3,2066)	1:A:102:ARG:HG3	1:A:107:ARG:HB2	13	0.18
(3,2066)	1:A:102:ARG:HG3	1:A:107:ARG:HB3	13	0.18
(3,2058)	1:A:100:ASP:HB2	1:A:101:LEU:H	8	0.18
(3,2058)	1:A:100:ASP:HB3	1:A:101:LEU:H	8	0.18
(3,2058)	1:A:100:ASP:HB2	1:A:101:LEU:H	9	0.18
(3,2058)	1:A:100:ASP:HB3	1:A:101:LEU:H	9	0.18
(3,2039)	1:A:91:ALA:H	1:A:92:GLY:HA2	7	0.18
(3,2039)	1:A:91:ALA:H	1:A:92:GLY:HA3	7	0.18
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG11	1:A:88:LYS:HE2	13	0.18
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG11	1:A:88:LYS:HE3	13	0.18
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG12	1:A:88:LYS:HE2	13	0.18
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG12	1:A:88:LYS:HE3	13	0.18
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG13	1:A:88:LYS:HE2	13	0.18
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG13	1:A:88:LYS:HE3	13	0.18
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG21	1:A:88:LYS:HE2	13	0.18
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG21	1:A:88:LYS:HE3	13	0.18
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG22	1:A:88:LYS:HE2	13	0.18
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG22	1:A:88:LYS:HE3	13	0.18
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG23	1:A:88:LYS:HE2	13	0.18
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG23	1:A:88:LYS:HE3	13	0.18
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:124:LEU:HA	3	0.18
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG12	1:A:124:LEU:HA	3	0.18
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:124:LEU:HA	3	0.18
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:124:LEU:HA	3	0.18
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:124:LEU:HA	3	0.18
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:124:LEU:HA	3	0.18
(3,1732)	1:A:29:MET:HG2	1:A:83:MET:HE1	24	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,1732)	1:A:29:MET:HG2	1:A:83:MET:HE2	24	0.18
(3,1732)	1:A:29:MET:HG2	1:A:83:MET:HE3	24	0.18
(3,1732)	1:A:29:MET:HG3	1:A:83:MET:HE1	24	0.18
(3,1732)	1:A:29:MET:HG3	1:A:83:MET:HE2	24	0.18
(3,1732)	1:A:29:MET:HG3	1:A:83:MET:HE3	24	0.18
(3,1703)	1:A:24:LYS:HA	1:A:24:LYS:HD2	25	0.18
(3,1703)	1:A:24:LYS:HA	1:A:24:LYS:HD3	25	0.18
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB2	1:A:83:MET:HE1	9	0.18
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB2	1:A:83:MET:HE2	9	0.18
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB2	1:A:83:MET:HE3	9	0.18
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB3	1:A:83:MET:HE1	9	0.18
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB3	1:A:83:MET:HE2	9	0.18
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB3	1:A:83:MET:HE3	9	0.18
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB2	1:A:83:MET:HE1	20	0.18
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB2	1:A:83:MET:HE2	20	0.18
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB2	1:A:83:MET:HE3	20	0.18
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB3	1:A:83:MET:HE1	20	0.18
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB3	1:A:83:MET:HE2	20	0.18
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB3	1:A:83:MET:HE3	20	0.18
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB2	1:A:83:MET:HE1	25	0.18
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB2	1:A:83:MET:HE2	25	0.18
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB2	1:A:83:MET:HE3	25	0.18
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB3	1:A:83:MET:HE1	25	0.18
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB3	1:A:83:MET:HE2	25	0.18
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB3	1:A:83:MET:HE3	25	0.18
(3,167)	1:A:64:GLU:H	1:A:67:ASP:H	17	0.18
(3,167)	1:A:64:GLU:H	1:A:67:ASP:H	25	0.18
(3,1524)	1:A:140:LYS:HA	1:A:140:LYS:HD2	17	0.18
(3,1524)	1:A:140:LYS:HA	1:A:140:LYS:HD3	17	0.18
(3,1524)	1:A:140:LYS:HA	1:A:140:LYS:HD2	25	0.18
(3,1524)	1:A:140:LYS:HA	1:A:140:LYS:HD3	25	0.18
(3,1498)	1:A:64:GLU:HA	1:A:66:VAL:HG21	10	0.18
(3,1498)	1:A:64:GLU:HA	1:A:66:VAL:HG22	10	0.18
(3,1498)	1:A:64:GLU:HA	1:A:66:VAL:HG23	10	0.18
(3,1498)	1:A:64:GLU:HA	1:A:66:VAL:HG21	25	0.18
(3,1498)	1:A:64:GLU:HA	1:A:66:VAL:HG22	25	0.18
(3,1498)	1:A:64:GLU:HA	1:A:66:VAL:HG23	25	0.18
(3,148)	1:A:39:SER:HB2	1:A:42:GLU:H	8	0.18
(3,148)	1:A:39:SER:HB3	1:A:42:GLU:H	8	0.18
(3,1448)	1:A:52:GLN:HB3	1:A:53:THR:H	8	0.18
(3,1404)	1:A:115:MET:HG2	1:A:116:SER:H	6	0.18
(3,1399)	1:A:22:GLU:HA	1:A:22:GLU:HG2	4	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,1378)	1:A:109:PRO:HB3	1:A:111:ARG:H	7	0.18
(3,1378)	1:A:109:PRO:HB3	1:A:111:ARG:H	13	0.18
(3,1378)	1:A:109:PRO:HB3	1:A:111:ARG:H	16	0.18
(3,128)	1:A:107:ARG:H	1:A:107:ARG:HD2	6	0.18
(3,128)	1:A:107:ARG:H	1:A:107:ARG:HD3	6	0.18
(3,1152)	1:A:114:ARG:HA	1:A:114:ARG:HD2	24	0.18
(3,115)	1:A:39:SER:H	1:A:42:GLU:HB3	25	0.18
(3,1149)	1:A:136:ARG:HA	1:A:136:ARG:HD2	9	0.18
(3,1149)	1:A:136:ARG:HA	1:A:136:ARG:HD3	9	0.18
(3,1149)	1:A:136:ARG:HA	1:A:136:ARG:HD2	19	0.18
(3,1149)	1:A:136:ARG:HA	1:A:136:ARG:HD3	19	0.18
(3,1072)	1:A:83:MET:HE1	1:A:121:LEU:HD11	19	0.18
(3,1072)	1:A:83:MET:HE1	1:A:121:LEU:HD12	19	0.18
(3,1072)	1:A:83:MET:HE1	1:A:121:LEU:HD13	19	0.18
(3,1072)	1:A:83:MET:HE2	1:A:121:LEU:HD11	19	0.18
(3,1072)	1:A:83:MET:HE2	1:A:121:LEU:HD12	19	0.18
(3,1072)	1:A:83:MET:HE2	1:A:121:LEU:HD13	19	0.18
(3,1072)	1:A:83:MET:HE3	1:A:121:LEU:HD11	19	0.18
(3,1072)	1:A:83:MET:HE3	1:A:121:LEU:HD12	19	0.18
(3,1072)	1:A:83:MET:HE3	1:A:121:LEU:HD13	19	0.18
(3,107)	1:A:136:ARG:HG2	1:A:137:ALA:H	16	0.18
(3,107)	1:A:136:ARG:HG3	1:A:137:ALA:H	16	0.18
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB1	1:A:82:MET:HE1	3	0.18
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB1	1:A:82:MET:HE2	3	0.18
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB1	1:A:82:MET:HE3	3	0.18
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB2	1:A:82:MET:HE1	3	0.18
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB2	1:A:82:MET:HE2	3	0.18
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB2	1:A:82:MET:HE3	3	0.18
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB3	1:A:82:MET:HE1	3	0.18
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB3	1:A:82:MET:HE2	3	0.18
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB3	1:A:82:MET:HE3	3	0.18
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB1	1:A:82:MET:HE1	25	0.18
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB1	1:A:82:MET:HE2	25	0.18
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB1	1:A:82:MET:HE3	25	0.18
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB2	1:A:82:MET:HE1	25	0.18
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB2	1:A:82:MET:HE2	25	0.18
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB2	1:A:82:MET:HE3	25	0.18
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB3	1:A:82:MET:HE1	25	0.18
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB3	1:A:82:MET:HE2	25	0.18
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB3	1:A:82:MET:HE3	25	0.18
(3,1066)	1:A:29:MET:HE1	1:A:83:MET:HE1	4	0.18
(3,1066)	1:A:29:MET:HE1	1:A:83:MET:HE2	4	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,1066)	1:A:29:MET:HE1	1:A:83:MET:HE3	4	0.18
(3,1066)	1:A:29:MET:HE2	1:A:83:MET:HE1	4	0.18
(3,1066)	1:A:29:MET:HE2	1:A:83:MET:HE2	4	0.18
(3,1066)	1:A:29:MET:HE2	1:A:83:MET:HE3	4	0.18
(3,1066)	1:A:29:MET:HE3	1:A:83:MET:HE1	4	0.18
(3,1066)	1:A:29:MET:HE3	1:A:83:MET:HE2	4	0.18
(3,1066)	1:A:29:MET:HE3	1:A:83:MET:HE3	4	0.18
(3,1066)	1:A:29:MET:HE1	1:A:83:MET:HE1	5	0.18
(3,1066)	1:A:29:MET:HE1	1:A:83:MET:HE2	5	0.18
(3,1066)	1:A:29:MET:HE1	1:A:83:MET:HE3	5	0.18
(3,1066)	1:A:29:MET:HE2	1:A:83:MET:HE1	5	0.18
(3,1066)	1:A:29:MET:HE2	1:A:83:MET:HE2	5	0.18
(3,1066)	1:A:29:MET:HE2	1:A:83:MET:HE3	5	0.18
(3,1066)	1:A:29:MET:HE3	1:A:83:MET:HE1	5	0.18
(3,1066)	1:A:29:MET:HE3	1:A:83:MET:HE2	5	0.18
(3,1066)	1:A:29:MET:HE3	1:A:83:MET:HE3	5	0.18
(3,1065)	1:A:82:MET:HG2	1:A:83:MET:HE1	2	0.18
(3,1065)	1:A:82:MET:HG2	1:A:83:MET:HE2	2	0.18
(3,1065)	1:A:82:MET:HG2	1:A:83:MET:HE3	2	0.18
(3,1065)	1:A:82:MET:HG3	1:A:83:MET:HE1	2	0.18
(3,1065)	1:A:82:MET:HG3	1:A:83:MET:HE2	2	0.18
(3,1065)	1:A:82:MET:HG3	1:A:83:MET:HE3	2	0.18
(3,1065)	1:A:82:MET:HG2	1:A:83:MET:HE1	20	0.18
(3,1065)	1:A:82:MET:HG2	1:A:83:MET:HE2	20	0.18
(3,1065)	1:A:82:MET:HG2	1:A:83:MET:HE3	20	0.18
(3,1065)	1:A:82:MET:HG3	1:A:83:MET:HE1	20	0.18
(3,1065)	1:A:82:MET:HG3	1:A:83:MET:HE2	20	0.18
(3,1065)	1:A:82:MET:HG3	1:A:83:MET:HE3	20	0.18
(3,1054)	1:A:83:MET:HA	1:A:83:MET:HE1	3	0.18
(3,1054)	1:A:83:MET:HA	1:A:83:MET:HE2	3	0.18
(3,1054)	1:A:83:MET:HA	1:A:83:MET:HE3	3	0.18
(3,1032)	1:A:29:MET:HE1	1:A:124:LEU:HB2	18	0.18
(3,1032)	1:A:29:MET:HE2	1:A:124:LEU:HB2	18	0.18
(3,1032)	1:A:29:MET:HE3	1:A:124:LEU:HB2	18	0.18
(3,1012)	1:A:38:ILE:HG21	1:A:43:LEU:HG	11	0.18
(3,1012)	1:A:38:ILE:HG22	1:A:43:LEU:HG	11	0.18
(3,1012)	1:A:38:ILE:HG23	1:A:43:LEU:HG	11	0.18
(3,1008)	1:A:83:MET:HG2	1:A:120:MET:HE1	1	0.18
(3,1008)	1:A:83:MET:HG2	1:A:120:MET:HE2	1	0.18
(3,1008)	1:A:83:MET:HG2	1:A:120:MET:HE3	1	0.18
(3,1008)	1:A:83:MET:HG3	1:A:120:MET:HE1	1	0.18
(3,1008)	1:A:83:MET:HG3	1:A:120:MET:HE2	1	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,1008)	1:A:83:MET:HG3	1:A:120:MET:HE3	1	0.18
(3,1004)	1:A:117:ALA:HA	1:A:120:MET:HE1	12	0.18
(3,1004)	1:A:117:ALA:HA	1:A:120:MET:HE2	12	0.18
(3,1004)	1:A:117:ALA:HA	1:A:120:MET:HE3	12	0.18
(3,10)	1:A:52:GLN:HB2	1:A:53:THR:H	22	0.18
(3,954)	1:A:122:LYS:H	1:A:133:MET:HE1	15	0.17
(3,954)	1:A:122:LYS:H	1:A:133:MET:HE2	15	0.17
(3,954)	1:A:122:LYS:H	1:A:133:MET:HE3	15	0.17
(3,920)	1:A:15:LEU:HA	1:A:19:MET:HE1	23	0.17
(3,920)	1:A:15:LEU:HA	1:A:19:MET:HE2	23	0.17
(3,920)	1:A:15:LEU:HA	1:A:19:MET:HE3	23	0.17
(3,885)	1:A:142:VAL:HG11	1:A:143:LYS:HG2	4	0.17
(3,885)	1:A:142:VAL:HG11	1:A:143:LYS:HG3	4	0.17
(3,885)	1:A:142:VAL:HG12	1:A:143:LYS:HG2	4	0.17
(3,885)	1:A:142:VAL:HG12	1:A:143:LYS:HG3	4	0.17
(3,885)	1:A:142:VAL:HG13	1:A:143:LYS:HG2	4	0.17
(3,885)	1:A:142:VAL:HG13	1:A:143:LYS:HG3	4	0.17
(3,885)	1:A:142:VAL:HG11	1:A:143:LYS:HG2	11	0.17
(3,885)	1:A:142:VAL:HG11	1:A:143:LYS:HG3	11	0.17
(3,885)	1:A:142:VAL:HG12	1:A:143:LYS:HG2	11	0.17
(3,885)	1:A:142:VAL:HG12	1:A:143:LYS:HG3	11	0.17
(3,885)	1:A:142:VAL:HG13	1:A:143:LYS:HG2	11	0.17
(3,885)	1:A:142:VAL:HG13	1:A:143:LYS:HG3	11	0.17
(3,880)	1:A:45:THR:HG21	1:A:49:MET:HB3	16	0.17
(3,880)	1:A:45:THR:HG22	1:A:49:MET:HB3	16	0.17
(3,880)	1:A:45:THR:HG23	1:A:49:MET:HB3	16	0.17
(3,880)	1:A:45:THR:HG21	1:A:49:MET:HB3	17	0.17
(3,880)	1:A:45:THR:HG22	1:A:49:MET:HB3	17	0.17
(3,880)	1:A:45:THR:HG23	1:A:49:MET:HB3	17	0.17
(3,876)	1:A:142:VAL:HG21	1:A:143:LYS:HG2	23	0.17
(3,876)	1:A:142:VAL:HG21	1:A:143:LYS:HG3	23	0.17
(3,876)	1:A:142:VAL:HG22	1:A:143:LYS:HG2	23	0.17
(3,876)	1:A:142:VAL:HG22	1:A:143:LYS:HG3	23	0.17
(3,876)	1:A:142:VAL:HG23	1:A:143:LYS:HG2	23	0.17
(3,876)	1:A:142:VAL:HG23	1:A:143:LYS:HG3	23	0.17
(3,868)	1:A:40:VAL:HG21	1:A:56:LYS:HA	25	0.17
(3,868)	1:A:40:VAL:HG22	1:A:56:LYS:HA	25	0.17
(3,868)	1:A:40:VAL:HG23	1:A:56:LYS:HA	25	0.17
(3,817)	1:A:83:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD21	12	0.17
(3,817)	1:A:83:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD22	12	0.17
(3,817)	1:A:83:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD23	12	0.17
(3,817)	1:A:83:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD21	12	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,817)	1:A:83:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD22	12	0.17
(3,817)	1:A:83:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD23	12	0.17
(3,817)	1:A:83:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD21	12	0.17
(3,817)	1:A:83:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD22	12	0.17
(3,817)	1:A:83:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD23	12	0.17
(3,772)	1:A:84:VAL:H	1:A:84:VAL:HG11	2	0.17
(3,772)	1:A:84:VAL:H	1:A:84:VAL:HG12	2	0.17
(3,772)	1:A:84:VAL:H	1:A:84:VAL:HG13	2	0.17
(3,772)	1:A:84:VAL:H	1:A:84:VAL:HG11	8	0.17
(3,772)	1:A:84:VAL:H	1:A:84:VAL:HG12	8	0.17
(3,772)	1:A:84:VAL:H	1:A:84:VAL:HG13	8	0.17
(3,772)	1:A:84:VAL:H	1:A:84:VAL:HG11	15	0.17
(3,772)	1:A:84:VAL:H	1:A:84:VAL:HG12	15	0.17
(3,772)	1:A:84:VAL:H	1:A:84:VAL:HG13	15	0.17
(3,772)	1:A:84:VAL:H	1:A:84:VAL:HG11	23	0.17
(3,772)	1:A:84:VAL:H	1:A:84:VAL:HG12	23	0.17
(3,772)	1:A:84:VAL:H	1:A:84:VAL:HG13	23	0.17
(3,772)	1:A:84:VAL:H	1:A:84:VAL:HG11	24	0.17
(3,772)	1:A:84:VAL:H	1:A:84:VAL:HG12	24	0.17
(3,772)	1:A:84:VAL:H	1:A:84:VAL:HG13	24	0.17
(3,751)	1:A:41:LYS:HG2	1:A:42:GLU:H	16	0.17
(3,713)	1:A:117:ALA:HA	1:A:120:MET:HG2	18	0.17
(3,713)	1:A:117:ALA:HA	1:A:120:MET:HG3	18	0.17
(3,691)	1:A:143:LYS:HA	1:A:143:LYS:HE2	3	0.17
(3,691)	1:A:143:LYS:HA	1:A:143:LYS:HE3	3	0.17
(3,676)	1:A:24:LYS:HA	1:A:24:LYS:HD2	1	0.17
(3,658)	1:A:102:ARG:HG2	1:A:103:GLY:H	24	0.17
(3,658)	1:A:102:ARG:HG3	1:A:103:GLY:H	24	0.17
(3,524)	1:A:71:SER:H	1:A:72:GLY:H	9	0.17
(3,460)	1:A:27:PHE:HA	1:A:31:ASP:H	13	0.17
(3,347)	1:A:100:ASP:HA	1:A:102:ARG:H	7	0.17
(3,328)	1:A:81:VAL:H	1:A:83:MET:HG2	12	0.17
(3,328)	1:A:81:VAL:H	1:A:83:MET:HG3	12	0.17
(3,328)	1:A:81:VAL:H	1:A:83:MET:HG2	22	0.17
(3,328)	1:A:81:VAL:H	1:A:83:MET:HG3	22	0.17
(3,258)	1:A:82:MET:H	1:A:83:MET:HG2	18	0.17
(3,258)	1:A:82:MET:H	1:A:83:MET:HG3	18	0.17
(3,2193)	1:A:137:ALA:HB1	1:A:138:ASN:HB2	17	0.17
(3,2193)	1:A:137:ALA:HB1	1:A:138:ASN:HB3	17	0.17
(3,2193)	1:A:137:ALA:HB2	1:A:138:ASN:HB2	17	0.17
(3,2193)	1:A:137:ALA:HB2	1:A:138:ASN:HB3	17	0.17
(3,2193)	1:A:137:ALA:HB3	1:A:138:ASN:HB2	17	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,2193)	1:A:137:ALA:HB3	1:A:138:ASN:HB3	17	0.17
(3,2068)	1:A:102:ARG:HD2	1:A:107:ARG:HB2	5	0.17
(3,2068)	1:A:102:ARG:HD2	1:A:107:ARG:HB3	5	0.17
(3,2068)	1:A:102:ARG:HD3	1:A:107:ARG:HB2	5	0.17
(3,2068)	1:A:102:ARG:HD3	1:A:107:ARG:HB3	5	0.17
(3,2058)	1:A:100:ASP:HB2	1:A:101:LEU:H	1	0.17
(3,2058)	1:A:100:ASP:HB3	1:A:101:LEU:H	1	0.17
(3,2055)	1:A:98:LEU:HD11	1:A:99:PHE:HA	7	0.17
(3,2055)	1:A:98:LEU:HD12	1:A:99:PHE:HA	7	0.17
(3,2055)	1:A:98:LEU:HD13	1:A:99:PHE:HA	7	0.17
(3,2055)	1:A:98:LEU:HD21	1:A:99:PHE:HA	7	0.17
(3,2055)	1:A:98:LEU:HD22	1:A:99:PHE:HA	7	0.17
(3,2055)	1:A:98:LEU:HD23	1:A:99:PHE:HA	7	0.17
(3,2046)	1:A:97:LYS:HB2	1:A:98:LEU:H	2	0.17
(3,2046)	1:A:97:LYS:HB3	1:A:98:LEU:H	2	0.17
(3,2032)	1:A:88:LYS:HE2	1:A:135:LEU:HD11	2	0.17
(3,2032)	1:A:88:LYS:HE2	1:A:135:LEU:HD12	2	0.17
(3,2032)	1:A:88:LYS:HE2	1:A:135:LEU:HD13	2	0.17
(3,2032)	1:A:88:LYS:HE2	1:A:135:LEU:HD21	2	0.17
(3,2032)	1:A:88:LYS:HE2	1:A:135:LEU:HD22	2	0.17
(3,2032)	1:A:88:LYS:HE2	1:A:135:LEU:HD23	2	0.17
(3,2032)	1:A:88:LYS:HE3	1:A:135:LEU:HD11	2	0.17
(3,2032)	1:A:88:LYS:HE3	1:A:135:LEU:HD12	2	0.17
(3,2032)	1:A:88:LYS:HE3	1:A:135:LEU:HD13	2	0.17
(3,2032)	1:A:88:LYS:HE3	1:A:135:LEU:HD21	2	0.17
(3,2032)	1:A:88:LYS:HE3	1:A:135:LEU:HD22	2	0.17
(3,2032)	1:A:88:LYS:HE3	1:A:135:LEU:HD23	2	0.17
(3,200)	1:A:109:PRO:HB3	1:A:110:LEU:H	18	0.17
(3,1989)	1:A:84:VAL:HG11	1:A:88:LYS:HD2	11	0.17
(3,1989)	1:A:84:VAL:HG11	1:A:88:LYS:HD3	11	0.17
(3,1989)	1:A:84:VAL:HG12	1:A:88:LYS:HD2	11	0.17
(3,1989)	1:A:84:VAL:HG12	1:A:88:LYS:HD3	11	0.17
(3,1989)	1:A:84:VAL:HG13	1:A:88:LYS:HD2	11	0.17
(3,1989)	1:A:84:VAL:HG13	1:A:88:LYS:HD3	11	0.17
(3,1989)	1:A:84:VAL:HG21	1:A:88:LYS:HD2	11	0.17
(3,1989)	1:A:84:VAL:HG21	1:A:88:LYS:HD3	11	0.17
(3,1989)	1:A:84:VAL:HG22	1:A:88:LYS:HD2	11	0.17
(3,1989)	1:A:84:VAL:HG22	1:A:88:LYS:HD3	11	0.17
(3,1989)	1:A:84:VAL:HG23	1:A:88:LYS:HD2	11	0.17
(3,1989)	1:A:84:VAL:HG23	1:A:88:LYS:HD3	11	0.17
(3,1983)	1:A:84:VAL:HG11	1:A:86:GLN:H	8	0.17
(3,1983)	1:A:84:VAL:HG12	1:A:86:GLN:H	8	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,1983)	1:A:84:VAL:HG13	1:A:86:GLN:H	8	0.17
(3,1983)	1:A:84:VAL:HG21	1:A:86:GLN:H	8	0.17
(3,1983)	1:A:84:VAL:HG22	1:A:86:GLN:H	8	0.17
(3,1983)	1:A:84:VAL:HG23	1:A:86:GLN:H	8	0.17
(3,186)	1:A:100:ASP:H	1:A:100:ASP:HB3	25	0.17
(3,178)	1:A:144:LYS:H	1:A:146:ASP:H	12	0.17
(3,1745)	1:A:30:PHE:HB2	1:A:46:VAL:H	10	0.17
(3,1745)	1:A:30:PHE:HB3	1:A:46:VAL:H	10	0.17
(3,167)	1:A:64:GLU:H	1:A:67:ASP:H	1	0.17
(3,167)	1:A:64:GLU:H	1:A:67:ASP:H	13	0.17
(3,167)	1:A:64:GLU:H	1:A:67:ASP:H	14	0.17
(3,167)	1:A:64:GLU:H	1:A:67:ASP:H	15	0.17
(3,1614)	1:A:14:TYR:HB2	1:A:87:MET:HE1	15	0.17
(3,1614)	1:A:14:TYR:HB2	1:A:87:MET:HE2	15	0.17
(3,1614)	1:A:14:TYR:HB2	1:A:87:MET:HE3	15	0.17
(3,1614)	1:A:14:TYR:HB3	1:A:87:MET:HE1	15	0.17
(3,1614)	1:A:14:TYR:HB3	1:A:87:MET:HE2	15	0.17
(3,1614)	1:A:14:TYR:HB3	1:A:87:MET:HE3	15	0.17
(3,1583)	1:A:10:GLU:H	1:A:81:VAL:HG11	19	0.17
(3,1583)	1:A:10:GLU:H	1:A:81:VAL:HG12	19	0.17
(3,1583)	1:A:10:GLU:H	1:A:81:VAL:HG13	19	0.17
(3,1583)	1:A:10:GLU:H	1:A:81:VAL:HG21	19	0.17
(3,1583)	1:A:10:GLU:H	1:A:81:VAL:HG22	19	0.17
(3,1583)	1:A:10:GLU:H	1:A:81:VAL:HG23	19	0.17
(3,1524)	1:A:140:LYS:HA	1:A:140:LYS:HD2	10	0.17
(3,1524)	1:A:140:LYS:HA	1:A:140:LYS:HD3	10	0.17
(3,1524)	1:A:140:LYS:HA	1:A:140:LYS:HD2	16	0.17
(3,1524)	1:A:140:LYS:HA	1:A:140:LYS:HD3	16	0.17
(3,1498)	1:A:64:GLU:HA	1:A:66:VAL:HG21	1	0.17
(3,1498)	1:A:64:GLU:HA	1:A:66:VAL:HG22	1	0.17
(3,1498)	1:A:64:GLU:HA	1:A:66:VAL:HG23	1	0.17
(3,1498)	1:A:64:GLU:HA	1:A:66:VAL:HG21	3	0.17
(3,1498)	1:A:64:GLU:HA	1:A:66:VAL:HG22	3	0.17
(3,1498)	1:A:64:GLU:HA	1:A:66:VAL:HG23	3	0.17
(3,1498)	1:A:64:GLU:HA	1:A:66:VAL:HG21	9	0.17
(3,1498)	1:A:64:GLU:HA	1:A:66:VAL:HG22	9	0.17
(3,1498)	1:A:64:GLU:HA	1:A:66:VAL:HG23	9	0.17
(3,1468)	1:A:88:LYS:HD2	1:A:89:GLU:HA	15	0.17
(3,1468)	1:A:88:LYS:HD3	1:A:89:GLU:HA	15	0.17
(3,1445)	1:A:56:LYS:HA	1:A:59:LEU:HD21	24	0.17
(3,1445)	1:A:56:LYS:HA	1:A:59:LEU:HD22	24	0.17
(3,1445)	1:A:56:LYS:HA	1:A:59:LEU:HD23	24	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,1406)	1:A:115:MET:HG2	1:A:120:MET:H	25	0.17
(3,1326)	1:A:116:SER:HB2	1:A:119:ALA:H	10	0.17
(3,1313)	1:A:7:GLN:HG3	1:A:81:VAL:HG11	23	0.17
(3,1313)	1:A:7:GLN:HG3	1:A:81:VAL:HG12	23	0.17
(3,1313)	1:A:7:GLN:HG3	1:A:81:VAL:HG13	23	0.17
(3,1246)	1:A:137:ALA:HB1	1:A:138:ASN:HB3	14	0.17
(3,1246)	1:A:137:ALA:HB2	1:A:138:ASN:HB3	14	0.17
(3,1246)	1:A:137:ALA:HB3	1:A:138:ASN:HB3	14	0.17
(3,1206)	1:A:59:LEU:HB2	1:A:63:ILE:HD11	9	0.17
(3,1206)	1:A:59:LEU:HB2	1:A:63:ILE:HD12	9	0.17
(3,1206)	1:A:59:LEU:HB2	1:A:63:ILE:HD13	9	0.17
(3,1153)	1:A:114:ARG:HA	1:A:114:ARG:HD3	3	0.17
(3,115)	1:A:39:SER:H	1:A:42:GLU:HB3	18	0.17
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB1	1:A:82:MET:HE1	23	0.17
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB1	1:A:82:MET:HE2	23	0.17
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB1	1:A:82:MET:HE3	23	0.17
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB2	1:A:82:MET:HE1	23	0.17
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB2	1:A:82:MET:HE2	23	0.17
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB2	1:A:82:MET:HE3	23	0.17
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB3	1:A:82:MET:HE1	23	0.17
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB3	1:A:82:MET:HE2	23	0.17
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB3	1:A:82:MET:HE3	23	0.17
(3,1066)	1:A:29:MET:HE1	1:A:83:MET:HE1	10	0.17
(3,1066)	1:A:29:MET:HE1	1:A:83:MET:HE2	10	0.17
(3,1066)	1:A:29:MET:HE1	1:A:83:MET:HE3	10	0.17
(3,1066)	1:A:29:MET:HE2	1:A:83:MET:HE1	10	0.17
(3,1066)	1:A:29:MET:HE2	1:A:83:MET:HE2	10	0.17
(3,1066)	1:A:29:MET:HE2	1:A:83:MET:HE3	10	0.17
(3,1066)	1:A:29:MET:HE3	1:A:83:MET:HE1	10	0.17
(3,1066)	1:A:29:MET:HE3	1:A:83:MET:HE2	10	0.17
(3,1066)	1:A:29:MET:HE3	1:A:83:MET:HE3	10	0.17
(3,1065)	1:A:82:MET:HG2	1:A:83:MET:HE1	7	0.17
(3,1065)	1:A:82:MET:HG2	1:A:83:MET:HE2	7	0.17
(3,1065)	1:A:82:MET:HG2	1:A:83:MET:HE3	7	0.17
(3,1065)	1:A:82:MET:HG3	1:A:83:MET:HE1	7	0.17
(3,1065)	1:A:82:MET:HG3	1:A:83:MET:HE2	7	0.17
(3,1065)	1:A:82:MET:HG3	1:A:83:MET:HE3	7	0.17
(3,1065)	1:A:82:MET:HG2	1:A:83:MET:HE1	14	0.17
(3,1065)	1:A:82:MET:HG2	1:A:83:MET:HE2	14	0.17
(3,1065)	1:A:82:MET:HG2	1:A:83:MET:HE3	14	0.17
(3,1065)	1:A:82:MET:HG3	1:A:83:MET:HE1	14	0.17
(3,1065)	1:A:82:MET:HG3	1:A:83:MET:HE2	14	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,1065)	1:A:82:MET:HG3	1:A:83:MET:HE3	14	0.17
(3,1065)	1:A:82:MET:HG2	1:A:83:MET:HE1	23	0.17
(3,1065)	1:A:82:MET:HG2	1:A:83:MET:HE2	23	0.17
(3,1065)	1:A:82:MET:HG2	1:A:83:MET:HE3	23	0.17
(3,1065)	1:A:82:MET:HG3	1:A:83:MET:HE1	23	0.17
(3,1065)	1:A:82:MET:HG3	1:A:83:MET:HE2	23	0.17
(3,1065)	1:A:82:MET:HG3	1:A:83:MET:HE3	23	0.17
(3,998)	1:A:120:MET:HE1	1:A:124:LEU:H	15	0.16
(3,998)	1:A:120:MET:HE2	1:A:124:LEU:H	15	0.16
(3,998)	1:A:120:MET:HE3	1:A:124:LEU:H	15	0.16
(3,880)	1:A:45:THR:HG21	1:A:49:MET:HB3	10	0.16
(3,880)	1:A:45:THR:HG22	1:A:49:MET:HB3	10	0.16
(3,880)	1:A:45:THR:HG23	1:A:49:MET:HB3	10	0.16
(3,880)	1:A:45:THR:HG21	1:A:49:MET:HB3	14	0.16
(3,880)	1:A:45:THR:HG22	1:A:49:MET:HB3	14	0.16
(3,880)	1:A:45:THR:HG23	1:A:49:MET:HB3	14	0.16
(3,873)	1:A:53:THR:HG21	1:A:54:PRO:HD2	21	0.16
(3,873)	1:A:53:THR:HG22	1:A:54:PRO:HD2	21	0.16
(3,873)	1:A:53:THR:HG23	1:A:54:PRO:HD2	21	0.16
(3,868)	1:A:40:VAL:HG21	1:A:56:LYS:HA	20	0.16
(3,868)	1:A:40:VAL:HG22	1:A:56:LYS:HA	20	0.16
(3,868)	1:A:40:VAL:HG23	1:A:56:LYS:HA	20	0.16
(3,854)	1:A:4:MET:HB2	1:A:5:THR:HG21	8	0.16
(3,854)	1:A:4:MET:HB2	1:A:5:THR:HG22	8	0.16
(3,854)	1:A:4:MET:HB2	1:A:5:THR:HG23	8	0.16
(3,854)	1:A:4:MET:HB3	1:A:5:THR:HG21	8	0.16
(3,854)	1:A:4:MET:HB3	1:A:5:THR:HG22	8	0.16
(3,854)	1:A:4:MET:HB3	1:A:5:THR:HG23	8	0.16
(3,825)	1:A:39:SER:H	1:A:73:THR:HG21	9	0.16
(3,825)	1:A:39:SER:H	1:A:73:THR:HG22	9	0.16
(3,825)	1:A:39:SER:H	1:A:73:THR:HG23	9	0.16
(3,803)	1:A:43:LEU:HD11	1:A:44:GLY:H	17	0.16
(3,803)	1:A:43:LEU:HD12	1:A:44:GLY:H	17	0.16
(3,803)	1:A:43:LEU:HD13	1:A:44:GLY:H	17	0.16
(3,790)	1:A:40:VAL:HG11	1:A:56:LYS:HE2	24	0.16
(3,790)	1:A:40:VAL:HG11	1:A:56:LYS:HE3	24	0.16
(3,790)	1:A:40:VAL:HG12	1:A:56:LYS:HE2	24	0.16
(3,790)	1:A:40:VAL:HG12	1:A:56:LYS:HE3	24	0.16
(3,790)	1:A:40:VAL:HG13	1:A:56:LYS:HE2	24	0.16
(3,790)	1:A:40:VAL:HG13	1:A:56:LYS:HE3	24	0.16
(3,772)	1:A:84:VAL:H	1:A:84:VAL:HG11	9	0.16
(3,772)	1:A:84:VAL:H	1:A:84:VAL:HG12	9	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,772)	1:A:84:VAL:H	1:A:84:VAL:HG13	9	0.16
(3,772)	1:A:84:VAL:H	1:A:84:VAL:HG11	14	0.16
(3,772)	1:A:84:VAL:H	1:A:84:VAL:HG12	14	0.16
(3,772)	1:A:84:VAL:H	1:A:84:VAL:HG13	14	0.16
(3,772)	1:A:84:VAL:H	1:A:84:VAL:HG11	16	0.16
(3,772)	1:A:84:VAL:H	1:A:84:VAL:HG12	16	0.16
(3,772)	1:A:84:VAL:H	1:A:84:VAL:HG13	16	0.16
(3,751)	1:A:41:LYS:HG2	1:A:42:GLU:H	15	0.16
(3,734)	1:A:26:ALA:HA	1:A:29:MET:HB3	17	0.16
(3,691)	1:A:143:LYS:HA	1:A:143:LYS:HE2	5	0.16
(3,691)	1:A:143:LYS:HA	1:A:143:LYS:HE3	5	0.16
(3,653)	1:A:111:ARG:HG2	1:A:113:VAL:HB	9	0.16
(3,653)	1:A:111:ARG:HG3	1:A:113:VAL:HB	9	0.16
(3,607)	1:A:125:LEU:HG	1:A:126:GLY:H	13	0.16
(3,607)	1:A:125:LEU:HG	1:A:126:GLY:H	15	0.16
(3,57)	1:A:91:ALA:HB1	1:A:92:GLY:H	4	0.16
(3,57)	1:A:91:ALA:HB2	1:A:92:GLY:H	4	0.16
(3,57)	1:A:91:ALA:HB3	1:A:92:GLY:H	4	0.16
(3,57)	1:A:91:ALA:HB1	1:A:92:GLY:H	23	0.16
(3,57)	1:A:91:ALA:HB2	1:A:92:GLY:H	23	0.16
(3,57)	1:A:91:ALA:HB3	1:A:92:GLY:H	23	0.16
(3,519)	1:A:138:ASN:H	1:A:139:LEU:H	2	0.16
(3,517)	1:A:15:LEU:HB2	1:A:16:SER:H	3	0.16
(3,5)	1:A:32:ALA:H	1:A:34:GLY:H	23	0.16
(3,477)	1:A:5:THR:H	1:A:5:THR:HG21	25	0.16
(3,477)	1:A:5:THR:H	1:A:5:THR:HG22	25	0.16
(3,477)	1:A:5:THR:H	1:A:5:THR:HG23	25	0.16
(3,467)	1:A:19:MET:HG3	1:A:20:ILE:H	5	0.16
(3,467)	1:A:19:MET:HG3	1:A:20:ILE:H	10	0.16
(3,360)	1:A:79:PHE:HB2	1:A:80:LEU:H	4	0.16
(3,328)	1:A:81:VAL:H	1:A:83:MET:HG2	16	0.16
(3,328)	1:A:81:VAL:H	1:A:83:MET:HG3	16	0.16
(3,32)	1:A:52:GLN:H	1:A:52:GLN:HE22	1	0.16
(3,271)	1:A:39:SER:HA	1:A:41:LYS:H	4	0.16
(3,258)	1:A:82:MET:H	1:A:83:MET:HG2	4	0.16
(3,258)	1:A:82:MET:H	1:A:83:MET:HG3	4	0.16
(3,258)	1:A:82:MET:H	1:A:83:MET:HG2	17	0.16
(3,258)	1:A:82:MET:H	1:A:83:MET:HG3	17	0.16
(3,243)	1:A:120:MET:HE1	1:A:122:LYS:H	1	0.16
(3,243)	1:A:120:MET:HE2	1:A:122:LYS:H	1	0.16
(3,243)	1:A:120:MET:HE3	1:A:122:LYS:H	1	0.16
(3,243)	1:A:120:MET:HE1	1:A:122:LYS:H	7	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,243)	1:A:120:MET:HE2	1:A:122:LYS:H	7	0.16
(3,243)	1:A:120:MET:HE3	1:A:122:LYS:H	7	0.16
(3,2217)	1:A:142:VAL:HG11	1:A:143:LYS:HE2	18	0.16
(3,2217)	1:A:142:VAL:HG11	1:A:143:LYS:HE3	18	0.16
(3,2217)	1:A:142:VAL:HG12	1:A:143:LYS:HE2	18	0.16
(3,2217)	1:A:142:VAL:HG12	1:A:143:LYS:HE3	18	0.16
(3,2217)	1:A:142:VAL:HG13	1:A:143:LYS:HE2	18	0.16
(3,2217)	1:A:142:VAL:HG13	1:A:143:LYS:HE3	18	0.16
(3,2217)	1:A:142:VAL:HG21	1:A:143:LYS:HE2	18	0.16
(3,2217)	1:A:142:VAL:HG21	1:A:143:LYS:HE3	18	0.16
(3,2217)	1:A:142:VAL:HG22	1:A:143:LYS:HE2	18	0.16
(3,2217)	1:A:142:VAL:HG22	1:A:143:LYS:HE3	18	0.16
(3,2217)	1:A:142:VAL:HG23	1:A:143:LYS:HE2	18	0.16
(3,2217)	1:A:142:VAL:HG23	1:A:143:LYS:HE3	18	0.16
(3,2105)	1:A:116:SER:HB2	1:A:117:ALA:HB1	7	0.16
(3,2105)	1:A:116:SER:HB2	1:A:117:ALA:HB2	7	0.16
(3,2105)	1:A:116:SER:HB2	1:A:117:ALA:HB3	7	0.16
(3,2105)	1:A:116:SER:HB3	1:A:117:ALA:HB1	7	0.16
(3,2105)	1:A:116:SER:HB3	1:A:117:ALA:HB2	7	0.16
(3,2105)	1:A:116:SER:HB3	1:A:117:ALA:HB3	7	0.16
(3,2089)	1:A:113:VAL:HG11	1:A:114:ARG:HB2	17	0.16
(3,2089)	1:A:113:VAL:HG11	1:A:114:ARG:HB3	17	0.16
(3,2089)	1:A:113:VAL:HG12	1:A:114:ARG:HB2	17	0.16
(3,2089)	1:A:113:VAL:HG12	1:A:114:ARG:HB3	17	0.16
(3,2089)	1:A:113:VAL:HG13	1:A:114:ARG:HB2	17	0.16
(3,2089)	1:A:113:VAL:HG13	1:A:114:ARG:HB3	17	0.16
(3,2089)	1:A:113:VAL:HG21	1:A:114:ARG:HB2	17	0.16
(3,2089)	1:A:113:VAL:HG21	1:A:114:ARG:HB3	17	0.16
(3,2089)	1:A:113:VAL:HG22	1:A:114:ARG:HB2	17	0.16
(3,2089)	1:A:113:VAL:HG22	1:A:114:ARG:HB3	17	0.16
(3,2089)	1:A:113:VAL:HG23	1:A:114:ARG:HB2	17	0.16
(3,2089)	1:A:113:VAL:HG23	1:A:114:ARG:HB3	17	0.16
(3,2058)	1:A:100:ASP:HB2	1:A:101:LEU:H	16	0.16
(3,2058)	1:A:100:ASP:HB3	1:A:101:LEU:H	16	0.16
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD11	13	0.16
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD12	13	0.16
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD13	13	0.16
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD21	13	0.16
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD22	13	0.16
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD23	13	0.16
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD11	13	0.16
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD12	13	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD13	13	0.16
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD21	13	0.16
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD22	13	0.16
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD23	13	0.16
(3,1910)	1:A:61:ALA:HA	1:A:64:GLU:HG2	16	0.16
(3,1910)	1:A:61:ALA:HA	1:A:64:GLU:HG3	16	0.16
(3,1855)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD11	24	0.16
(3,1855)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD12	24	0.16
(3,1855)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD13	24	0.16
(3,1855)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD21	24	0.16
(3,1855)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD22	24	0.16
(3,1855)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD23	24	0.16
(3,1855)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD11	24	0.16
(3,1855)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD12	24	0.16
(3,1855)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD13	24	0.16
(3,1855)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD21	24	0.16
(3,1855)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD22	24	0.16
(3,1855)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD23	24	0.16
(3,1855)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD11	24	0.16
(3,1855)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD12	24	0.16
(3,1855)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD13	24	0.16
(3,1855)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD21	24	0.16
(3,1855)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD22	24	0.16
(3,1855)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD23	24	0.16
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:124:LEU:HA	8	0.16
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG12	1:A:124:LEU:HA	8	0.16
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:124:LEU:HA	8	0.16
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:124:LEU:HA	8	0.16
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:124:LEU:HA	8	0.16
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:124:LEU:HA	8	0.16
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:124:LEU:HA	12	0.16
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG12	1:A:124:LEU:HA	12	0.16
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:124:LEU:HA	12	0.16
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:124:LEU:HA	12	0.16
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:124:LEU:HA	12	0.16
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:124:LEU:HA	12	0.16
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:124:LEU:HA	14	0.16
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG12	1:A:124:LEU:HA	14	0.16
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:124:LEU:HA	14	0.16
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:124:LEU:HA	14	0.16
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:124:LEU:HA	14	0.16
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:124:LEU:HA	14	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:124:LEU:HA	22	0.16
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG12	1:A:124:LEU:HA	22	0.16
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:124:LEU:HA	22	0.16
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:124:LEU:HA	22	0.16
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:124:LEU:HA	22	0.16
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:124:LEU:HA	22	0.16
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG11	17	0.16
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG12	17	0.16
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG13	17	0.16
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG21	17	0.16
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG22	17	0.16
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD11	1:A:46:VAL:HG23	17	0.16
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG11	17	0.16
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG12	17	0.16
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG13	17	0.16
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG21	17	0.16
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG22	17	0.16
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD12	1:A:46:VAL:HG23	17	0.16
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG11	17	0.16
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG12	17	0.16
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG13	17	0.16
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG21	17	0.16
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG22	17	0.16
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD13	1:A:46:VAL:HG23	17	0.16
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG11	17	0.16
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG12	17	0.16
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG13	17	0.16
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG21	17	0.16
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG22	17	0.16
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD21	1:A:46:VAL:HG23	17	0.16
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG11	17	0.16
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG12	17	0.16
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG13	17	0.16
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG21	17	0.16
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG22	17	0.16
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD22	1:A:46:VAL:HG23	17	0.16
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG11	17	0.16
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG12	17	0.16
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG13	17	0.16
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG21	17	0.16
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG22	17	0.16
(3,1804)	1:A:43:LEU:HD23	1:A:46:VAL:HG23	17	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,1745)	1:A:30:PHE:HB2	1:A:46:VAL:H	5	0.16
(3,1745)	1:A:30:PHE:HB3	1:A:46:VAL:H	5	0.16
(3,1745)	1:A:30:PHE:HB2	1:A:46:VAL:H	24	0.16
(3,1745)	1:A:30:PHE:HB3	1:A:46:VAL:H	24	0.16
(3,1732)	1:A:29:MET:HG2	1:A:83:MET:HE1	25	0.16
(3,1732)	1:A:29:MET:HG2	1:A:83:MET:HE2	25	0.16
(3,1732)	1:A:29:MET:HG2	1:A:83:MET:HE3	25	0.16
(3,1732)	1:A:29:MET:HG3	1:A:83:MET:HE1	25	0.16
(3,1732)	1:A:29:MET:HG3	1:A:83:MET:HE2	25	0.16
(3,1732)	1:A:29:MET:HG3	1:A:83:MET:HE3	25	0.16
(3,1713)	1:A:26:ALA:H	1:A:125:LEU:HD11	25	0.16
(3,1713)	1:A:26:ALA:H	1:A:125:LEU:HD12	25	0.16
(3,1713)	1:A:26:ALA:H	1:A:125:LEU:HD13	25	0.16
(3,1713)	1:A:26:ALA:H	1:A:125:LEU:HD21	25	0.16
(3,1713)	1:A:26:ALA:H	1:A:125:LEU:HD22	25	0.16
(3,1713)	1:A:26:ALA:H	1:A:125:LEU:HD23	25	0.16
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB2	1:A:83:MET:HE1	11	0.16
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB2	1:A:83:MET:HE2	11	0.16
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB2	1:A:83:MET:HE3	11	0.16
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB3	1:A:83:MET:HE1	11	0.16
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB3	1:A:83:MET:HE2	11	0.16
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB3	1:A:83:MET:HE3	11	0.16
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB2	1:A:83:MET:HE1	24	0.16
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB2	1:A:83:MET:HE2	24	0.16
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB2	1:A:83:MET:HE3	24	0.16
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB3	1:A:83:MET:HE1	24	0.16
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB3	1:A:83:MET:HE2	24	0.16
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB3	1:A:83:MET:HE3	24	0.16
(3,1672)	1:A:19:MET:HE1	1:A:84:VAL:HG11	13	0.16
(3,1672)	1:A:19:MET:HE1	1:A:84:VAL:HG12	13	0.16
(3,1672)	1:A:19:MET:HE1	1:A:84:VAL:HG13	13	0.16
(3,1672)	1:A:19:MET:HE1	1:A:84:VAL:HG21	13	0.16
(3,1672)	1:A:19:MET:HE1	1:A:84:VAL:HG22	13	0.16
(3,1672)	1:A:19:MET:HE1	1:A:84:VAL:HG23	13	0.16
(3,1672)	1:A:19:MET:HE2	1:A:84:VAL:HG11	13	0.16
(3,1672)	1:A:19:MET:HE2	1:A:84:VAL:HG12	13	0.16
(3,1672)	1:A:19:MET:HE2	1:A:84:VAL:HG13	13	0.16
(3,1672)	1:A:19:MET:HE2	1:A:84:VAL:HG21	13	0.16
(3,1672)	1:A:19:MET:HE2	1:A:84:VAL:HG22	13	0.16
(3,1672)	1:A:19:MET:HE2	1:A:84:VAL:HG23	13	0.16
(3,1672)	1:A:19:MET:HE3	1:A:84:VAL:HG11	13	0.16
(3,1672)	1:A:19:MET:HE3	1:A:84:VAL:HG12	13	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,1672)	1:A:19:MET:HE3	1:A:84:VAL:HG13	13	0.16
(3,1672)	1:A:19:MET:HE3	1:A:84:VAL:HG21	13	0.16
(3,1672)	1:A:19:MET:HE3	1:A:84:VAL:HG22	13	0.16
(3,1672)	1:A:19:MET:HE3	1:A:84:VAL:HG23	13	0.16
(3,1533)	1:A:18:GLU:HB3	1:A:131:VAL:HG11	2	0.16
(3,1533)	1:A:18:GLU:HB3	1:A:131:VAL:HG12	2	0.16
(3,1533)	1:A:18:GLU:HB3	1:A:131:VAL:HG13	2	0.16
(3,1524)	1:A:140:LYS:HA	1:A:140:LYS:HD2	3	0.16
(3,1524)	1:A:140:LYS:HA	1:A:140:LYS:HD3	3	0.16
(3,1498)	1:A:64:GLU:HA	1:A:66:VAL:HG21	15	0.16
(3,1498)	1:A:64:GLU:HA	1:A:66:VAL:HG22	15	0.16
(3,1498)	1:A:64:GLU:HA	1:A:66:VAL:HG23	15	0.16
(3,1498)	1:A:64:GLU:HA	1:A:66:VAL:HG21	17	0.16
(3,1498)	1:A:64:GLU:HA	1:A:66:VAL:HG22	17	0.16
(3,1498)	1:A:64:GLU:HA	1:A:66:VAL:HG23	17	0.16
(3,1498)	1:A:64:GLU:HA	1:A:66:VAL:HG21	24	0.16
(3,1498)	1:A:64:GLU:HA	1:A:66:VAL:HG22	24	0.16
(3,1498)	1:A:64:GLU:HA	1:A:66:VAL:HG23	24	0.16
(3,1474)	1:A:82:MET:HA	1:A:82:MET:HE1	10	0.16
(3,1474)	1:A:82:MET:HA	1:A:82:MET:HE2	10	0.16
(3,1474)	1:A:82:MET:HA	1:A:82:MET:HE3	10	0.16
(3,1404)	1:A:115:MET:HG2	1:A:116:SER:H	19	0.16
(3,1393)	1:A:81:VAL:HA	1:A:84:VAL:HB	11	0.16
(3,1378)	1:A:109:PRO:HB3	1:A:111:ARG:H	9	0.16
(3,120)	1:A:101:LEU:H	1:A:101:LEU:HB3	20	0.16
(3,1196)	1:A:134:ASP:H	1:A:134:ASP:HB2	4	0.16
(3,1175)	1:A:135:LEU:H	1:A:135:LEU:HB2	7	0.16
(3,1175)	1:A:135:LEU:H	1:A:135:LEU:HB2	12	0.16
(3,1128)	1:A:73:THR:HB	1:A:74:ILE:H	2	0.16
(3,1125)	1:A:30:PHE:H	1:A:38:ILE:HD11	18	0.16
(3,1125)	1:A:30:PHE:H	1:A:38:ILE:HD12	18	0.16
(3,1125)	1:A:30:PHE:H	1:A:38:ILE:HD13	18	0.16
(3,1081)	1:A:115:MET:HE1	1:A:122:LYS:H	10	0.16
(3,1081)	1:A:115:MET:HE2	1:A:122:LYS:H	10	0.16
(3,1081)	1:A:115:MET:HE3	1:A:122:LYS:H	10	0.16
(3,1065)	1:A:82:MET:HG2	1:A:83:MET:HE1	24	0.16
(3,1065)	1:A:82:MET:HG2	1:A:83:MET:HE2	24	0.16
(3,1065)	1:A:82:MET:HG2	1:A:83:MET:HE3	24	0.16
(3,1065)	1:A:82:MET:HG3	1:A:83:MET:HE1	24	0.16
(3,1065)	1:A:82:MET:HG3	1:A:83:MET:HE2	24	0.16
(3,1065)	1:A:82:MET:HG3	1:A:83:MET:HE3	24	0.16
(3,1065)	1:A:82:MET:HG2	1:A:83:MET:HE1	25	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,1065)	1:A:82:MET:HG2	1:A:83:MET:HE2	25	0.16
(3,1065)	1:A:82:MET:HG2	1:A:83:MET:HE3	25	0.16
(3,1065)	1:A:82:MET:HG3	1:A:83:MET:HE1	25	0.16
(3,1065)	1:A:82:MET:HG3	1:A:83:MET:HE2	25	0.16
(3,1065)	1:A:82:MET:HG3	1:A:83:MET:HE3	25	0.16
(3,1054)	1:A:83:MET:HA	1:A:83:MET:HE1	18	0.16
(3,1054)	1:A:83:MET:HA	1:A:83:MET:HE2	18	0.16
(3,1054)	1:A:83:MET:HA	1:A:83:MET:HE3	18	0.16
(3,1054)	1:A:83:MET:HA	1:A:83:MET:HE1	22	0.16
(3,1054)	1:A:83:MET:HA	1:A:83:MET:HE2	22	0.16
(3,1054)	1:A:83:MET:HA	1:A:83:MET:HE3	22	0.16
(3,1014)	1:A:83:MET:HE1	1:A:120:MET:HE1	6	0.16
(3,1014)	1:A:83:MET:HE1	1:A:120:MET:HE2	6	0.16
(3,1014)	1:A:83:MET:HE1	1:A:120:MET:HE3	6	0.16
(3,1014)	1:A:83:MET:HE2	1:A:120:MET:HE1	6	0.16
(3,1014)	1:A:83:MET:HE2	1:A:120:MET:HE2	6	0.16
(3,1014)	1:A:83:MET:HE2	1:A:120:MET:HE3	6	0.16
(3,1014)	1:A:83:MET:HE3	1:A:120:MET:HE1	6	0.16
(3,1014)	1:A:83:MET:HE3	1:A:120:MET:HE2	6	0.16
(3,1014)	1:A:83:MET:HE3	1:A:120:MET:HE3	6	0.16
(3,1014)	1:A:83:MET:HE1	1:A:120:MET:HE1	18	0.16
(3,1014)	1:A:83:MET:HE1	1:A:120:MET:HE2	18	0.16
(3,1014)	1:A:83:MET:HE1	1:A:120:MET:HE3	18	0.16
(3,1014)	1:A:83:MET:HE2	1:A:120:MET:HE1	18	0.16
(3,1014)	1:A:83:MET:HE2	1:A:120:MET:HE2	18	0.16
(3,1014)	1:A:83:MET:HE2	1:A:120:MET:HE3	18	0.16
(3,1014)	1:A:83:MET:HE3	1:A:120:MET:HE1	18	0.16
(3,1014)	1:A:83:MET:HE3	1:A:120:MET:HE2	18	0.16
(3,1014)	1:A:83:MET:HE3	1:A:120:MET:HE3	18	0.16
(3,1012)	1:A:38:ILE:HG21	1:A:43:LEU:HG	16	0.16
(3,1012)	1:A:38:ILE:HG22	1:A:43:LEU:HG	16	0.16
(3,1012)	1:A:38:ILE:HG23	1:A:43:LEU:HG	16	0.16
(4,13)	1:A:38:ILE:HB	1:A:73:THR:HB	8	0.15
(3,982)	1:A:117:ALA:HB1	1:A:133:MET:HE1	5	0.15
(3,982)	1:A:117:ALA:HB1	1:A:133:MET:HE2	5	0.15
(3,982)	1:A:117:ALA:HB1	1:A:133:MET:HE3	5	0.15
(3,982)	1:A:117:ALA:HB2	1:A:133:MET:HE1	5	0.15
(3,982)	1:A:117:ALA:HB2	1:A:133:MET:HE2	5	0.15
(3,982)	1:A:117:ALA:HB2	1:A:133:MET:HE3	5	0.15
(3,982)	1:A:117:ALA:HB3	1:A:133:MET:HE1	5	0.15
(3,982)	1:A:117:ALA:HB3	1:A:133:MET:HE2	5	0.15
(3,982)	1:A:117:ALA:HB3	1:A:133:MET:HE3	5	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,923)	1:A:16:SER:HB2	1:A:19:MET:HE1	23	0.15
(3,923)	1:A:16:SER:HB2	1:A:19:MET:HE2	23	0.15
(3,923)	1:A:16:SER:HB2	1:A:19:MET:HE3	23	0.15
(3,923)	1:A:16:SER:HB3	1:A:19:MET:HE1	23	0.15
(3,923)	1:A:16:SER:HB3	1:A:19:MET:HE2	23	0.15
(3,923)	1:A:16:SER:HB3	1:A:19:MET:HE3	23	0.15
(3,915)	1:A:19:MET:HE1	1:A:135:LEU:H	4	0.15
(3,915)	1:A:19:MET:HE2	1:A:135:LEU:H	4	0.15
(3,915)	1:A:19:MET:HE3	1:A:135:LEU:H	4	0.15
(3,915)	1:A:19:MET:HE1	1:A:135:LEU:H	17	0.15
(3,915)	1:A:19:MET:HE2	1:A:135:LEU:H	17	0.15
(3,915)	1:A:19:MET:HE3	1:A:135:LEU:H	17	0.15
(3,907)	1:A:32:ALA:HB1	1:A:33:ASP:HA	19	0.15
(3,907)	1:A:32:ALA:HB2	1:A:33:ASP:HA	19	0.15
(3,907)	1:A:32:ALA:HB3	1:A:33:ASP:HA	19	0.15
(3,904)	1:A:32:ALA:HB1	1:A:33:ASP:H	20	0.15
(3,904)	1:A:32:ALA:HB2	1:A:33:ASP:H	20	0.15
(3,904)	1:A:32:ALA:HB3	1:A:33:ASP:H	20	0.15
(3,888)	1:A:142:VAL:HG11	1:A:143:LYS:HE2	10	0.15
(3,888)	1:A:142:VAL:HG11	1:A:143:LYS:HE3	10	0.15
(3,888)	1:A:142:VAL:HG12	1:A:143:LYS:HE2	10	0.15
(3,888)	1:A:142:VAL:HG12	1:A:143:LYS:HE3	10	0.15
(3,888)	1:A:142:VAL:HG13	1:A:143:LYS:HE2	10	0.15
(3,888)	1:A:142:VAL:HG13	1:A:143:LYS:HE3	10	0.15
(3,880)	1:A:45:THR:HG21	1:A:49:MET:HB3	3	0.15
(3,880)	1:A:45:THR:HG22	1:A:49:MET:HB3	3	0.15
(3,880)	1:A:45:THR:HG23	1:A:49:MET:HB3	3	0.15
(3,880)	1:A:45:THR:HG21	1:A:49:MET:HB3	9	0.15
(3,880)	1:A:45:THR:HG22	1:A:49:MET:HB3	9	0.15
(3,880)	1:A:45:THR:HG23	1:A:49:MET:HB3	9	0.15
(3,880)	1:A:45:THR:HG21	1:A:49:MET:HB3	25	0.15
(3,880)	1:A:45:THR:HG22	1:A:49:MET:HB3	25	0.15
(3,880)	1:A:45:THR:HG23	1:A:49:MET:HB3	25	0.15
(3,825)	1:A:39:SER:H	1:A:73:THR:HG21	11	0.15
(3,825)	1:A:39:SER:H	1:A:73:THR:HG22	11	0.15
(3,825)	1:A:39:SER:H	1:A:73:THR:HG23	11	0.15
(3,776)	1:A:81:VAL:HA	1:A:84:VAL:HG11	24	0.15
(3,776)	1:A:81:VAL:HA	1:A:84:VAL:HG12	24	0.15
(3,776)	1:A:81:VAL:HA	1:A:84:VAL:HG13	24	0.15
(3,752)	1:A:41:LYS:HG3	1:A:42:GLU:H	12	0.15
(3,690)	1:A:130:LYS:HA	1:A:130:LYS:HE2	20	0.15
(3,690)	1:A:130:LYS:HA	1:A:130:LYS:HE3	20	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,675)	1:A:24:LYS:HA	1:A:24:LYS:HD3	24	0.15
(3,665)	1:A:144:LYS:HA	1:A:144:LYS:HE2	2	0.15
(3,665)	1:A:144:LYS:HA	1:A:144:LYS:HE3	2	0.15
(3,647)	1:A:111:ARG:HG2	1:A:113:VAL:H	10	0.15
(3,647)	1:A:111:ARG:HG3	1:A:113:VAL:H	10	0.15
(3,562)	1:A:65:GLU:H	1:A:66:VAL:HG11	24	0.15
(3,562)	1:A:65:GLU:H	1:A:66:VAL:HG12	24	0.15
(3,562)	1:A:65:GLU:H	1:A:66:VAL:HG13	24	0.15
(3,524)	1:A:71:SER:H	1:A:72:GLY:H	2	0.15
(3,517)	1:A:15:LEU:HB2	1:A:16:SER:H	12	0.15
(3,467)	1:A:19:MET:HG3	1:A:20:ILE:H	1	0.15
(3,467)	1:A:19:MET:HG3	1:A:20:ILE:H	20	0.15
(3,460)	1:A:27:PHE:HA	1:A:31:ASP:H	22	0.15
(3,412)	1:A:14:TYR:H	1:A:15:LEU:HG	21	0.15
(3,37)	1:A:52:GLN:HE21	1:A:115:MET:HB2	5	0.15
(3,37)	1:A:52:GLN:HE21	1:A:115:MET:HB3	5	0.15
(3,328)	1:A:81:VAL:H	1:A:83:MET:HG2	3	0.15
(3,328)	1:A:81:VAL:H	1:A:83:MET:HG3	3	0.15
(3,32)	1:A:52:GLN:H	1:A:52:GLN:HE22	22	0.15
(3,32)	1:A:52:GLN:H	1:A:52:GLN:HE22	24	0.15
(3,303)	1:A:80:LEU:HA	1:A:84:VAL:H	13	0.15
(3,258)	1:A:82:MET:H	1:A:83:MET:HG2	5	0.15
(3,258)	1:A:82:MET:H	1:A:83:MET:HG3	5	0.15
(3,258)	1:A:82:MET:H	1:A:83:MET:HG2	12	0.15
(3,258)	1:A:82:MET:H	1:A:83:MET:HG3	12	0.15
(3,258)	1:A:82:MET:H	1:A:83:MET:HG2	21	0.15
(3,258)	1:A:82:MET:H	1:A:83:MET:HG3	21	0.15
(3,243)	1:A:120:MET:HE1	1:A:122:LYS:H	2	0.15
(3,243)	1:A:120:MET:HE2	1:A:122:LYS:H	2	0.15
(3,243)	1:A:120:MET:HE3	1:A:122:LYS:H	2	0.15
(3,243)	1:A:120:MET:HE1	1:A:122:LYS:H	6	0.15
(3,243)	1:A:120:MET:HE2	1:A:122:LYS:H	6	0.15
(3,243)	1:A:120:MET:HE3	1:A:122:LYS:H	6	0.15
(3,243)	1:A:120:MET:HE1	1:A:122:LYS:H	20	0.15
(3,243)	1:A:120:MET:HE2	1:A:122:LYS:H	20	0.15
(3,243)	1:A:120:MET:HE3	1:A:122:LYS:H	20	0.15
(3,243)	1:A:120:MET:HE1	1:A:122:LYS:H	22	0.15
(3,243)	1:A:120:MET:HE2	1:A:122:LYS:H	22	0.15
(3,243)	1:A:120:MET:HE3	1:A:122:LYS:H	22	0.15
(3,227)	1:A:50:LEU:HG	1:A:123:ALA:H	5	0.15
(3,2206)	1:A:140:LYS:HA	1:A:141:GLN:HB2	20	0.15
(3,2206)	1:A:140:LYS:HA	1:A:141:GLN:HB3	20	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,2068)	1:A:102:ARG:HD2	1:A:107:ARG:HB2	15	0.15
(3,2068)	1:A:102:ARG:HD2	1:A:107:ARG:HB3	15	0.15
(3,2068)	1:A:102:ARG:HD3	1:A:107:ARG:HB2	15	0.15
(3,2068)	1:A:102:ARG:HD3	1:A:107:ARG:HB3	15	0.15
(3,2059)	1:A:101:LEU:H	1:A:101:LEU:HB2	7	0.15
(3,2059)	1:A:101:LEU:H	1:A:101:LEU:HB3	7	0.15
(3,2056)	1:A:99:PHE:H	1:A:99:PHE:HB2	25	0.15
(3,2056)	1:A:99:PHE:H	1:A:99:PHE:HB3	25	0.15
(3,2055)	1:A:98:LEU:HD11	1:A:99:PHE:HA	9	0.15
(3,2055)	1:A:98:LEU:HD12	1:A:99:PHE:HA	9	0.15
(3,2055)	1:A:98:LEU:HD13	1:A:99:PHE:HA	9	0.15
(3,2055)	1:A:98:LEU:HD21	1:A:99:PHE:HA	9	0.15
(3,2055)	1:A:98:LEU:HD22	1:A:99:PHE:HA	9	0.15
(3,2055)	1:A:98:LEU:HD23	1:A:99:PHE:HA	9	0.15
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG11	1:A:88:LYS:HE2	23	0.15
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG11	1:A:88:LYS:HE3	23	0.15
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG12	1:A:88:LYS:HE2	23	0.15
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG12	1:A:88:LYS:HE3	23	0.15
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG13	1:A:88:LYS:HE2	23	0.15
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG13	1:A:88:LYS:HE3	23	0.15
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG21	1:A:88:LYS:HE2	23	0.15
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG21	1:A:88:LYS:HE3	23	0.15
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG22	1:A:88:LYS:HE2	23	0.15
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG22	1:A:88:LYS:HE3	23	0.15
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG23	1:A:88:LYS:HE2	23	0.15
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG23	1:A:88:LYS:HE3	23	0.15
(3,1910)	1:A:61:ALA:HA	1:A:64:GLU:HG2	22	0.15
(3,1910)	1:A:61:ALA:HA	1:A:64:GLU:HG3	22	0.15
(3,1872)	1:A:52:GLN:HB2	1:A:53:THR:HB	18	0.15
(3,1872)	1:A:52:GLN:HB3	1:A:53:THR:HB	18	0.15
(3,1845)	1:A:47:MET:HE1	1:A:59:LEU:HD11	24	0.15
(3,1845)	1:A:47:MET:HE1	1:A:59:LEU:HD12	24	0.15
(3,1845)	1:A:47:MET:HE1	1:A:59:LEU:HD13	24	0.15
(3,1845)	1:A:47:MET:HE1	1:A:59:LEU:HD21	24	0.15
(3,1845)	1:A:47:MET:HE1	1:A:59:LEU:HD22	24	0.15
(3,1845)	1:A:47:MET:HE1	1:A:59:LEU:HD23	24	0.15
(3,1845)	1:A:47:MET:HE2	1:A:59:LEU:HD11	24	0.15
(3,1845)	1:A:47:MET:HE2	1:A:59:LEU:HD12	24	0.15
(3,1845)	1:A:47:MET:HE2	1:A:59:LEU:HD13	24	0.15
(3,1845)	1:A:47:MET:HE2	1:A:59:LEU:HD21	24	0.15
(3,1845)	1:A:47:MET:HE2	1:A:59:LEU:HD22	24	0.15
(3,1845)	1:A:47:MET:HE2	1:A:59:LEU:HD23	24	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,1845)	1:A:47:MET:HE3	1:A:59:LEU:HD11	24	0.15
(3,1845)	1:A:47:MET:HE3	1:A:59:LEU:HD12	24	0.15
(3,1845)	1:A:47:MET:HE3	1:A:59:LEU:HD13	24	0.15
(3,1845)	1:A:47:MET:HE3	1:A:59:LEU:HD21	24	0.15
(3,1845)	1:A:47:MET:HE3	1:A:59:LEU:HD22	24	0.15
(3,1845)	1:A:47:MET:HE3	1:A:59:LEU:HD23	24	0.15
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:124:LEU:HA	9	0.15
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG12	1:A:124:LEU:HA	9	0.15
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:124:LEU:HA	9	0.15
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:124:LEU:HA	9	0.15
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:124:LEU:HA	9	0.15
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:124:LEU:HA	9	0.15
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:124:LEU:HA	25	0.15
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG12	1:A:124:LEU:HA	25	0.15
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:124:LEU:HA	25	0.15
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:124:LEU:HA	25	0.15
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:124:LEU:HA	25	0.15
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:124:LEU:HA	25	0.15
(3,1831)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:50:LEU:HG	2	0.15
(3,1831)	1:A:46:VAL:HG12	1:A:50:LEU:HG	2	0.15
(3,1831)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:50:LEU:HG	2	0.15
(3,1831)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:50:LEU:HG	2	0.15
(3,1831)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:50:LEU:HG	2	0.15
(3,1831)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:50:LEU:HG	2	0.15
(3,1755)	1:A:34:GLY:H	1:A:35:GLY:HA2	24	0.15
(3,1755)	1:A:34:GLY:H	1:A:35:GLY:HA3	24	0.15
(3,1735)	1:A:29:MET:HG2	1:A:125:LEU:HD11	5	0.15
(3,1735)	1:A:29:MET:HG2	1:A:125:LEU:HD12	5	0.15
(3,1735)	1:A:29:MET:HG2	1:A:125:LEU:HD13	5	0.15
(3,1735)	1:A:29:MET:HG2	1:A:125:LEU:HD21	5	0.15
(3,1735)	1:A:29:MET:HG2	1:A:125:LEU:HD22	5	0.15
(3,1735)	1:A:29:MET:HG2	1:A:125:LEU:HD23	5	0.15
(3,1735)	1:A:29:MET:HG3	1:A:125:LEU:HD11	5	0.15
(3,1735)	1:A:29:MET:HG3	1:A:125:LEU:HD12	5	0.15
(3,1735)	1:A:29:MET:HG3	1:A:125:LEU:HD13	5	0.15
(3,1735)	1:A:29:MET:HG3	1:A:125:LEU:HD21	5	0.15
(3,1735)	1:A:29:MET:HG3	1:A:125:LEU:HD22	5	0.15
(3,1735)	1:A:29:MET:HG3	1:A:125:LEU:HD23	5	0.15
(3,1715)	1:A:26:ALA:HA	1:A:125:LEU:HD11	9	0.15
(3,1715)	1:A:26:ALA:HA	1:A:125:LEU:HD12	9	0.15
(3,1715)	1:A:26:ALA:HA	1:A:125:LEU:HD13	9	0.15
(3,1715)	1:A:26:ALA:HA	1:A:125:LEU:HD21	9	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,1715)	1:A:26:ALA:HA	1:A:125:LEU:HD22	9	0.15
(3,1715)	1:A:26:ALA:HA	1:A:125:LEU:HD23	9	0.15
(3,167)	1:A:64:GLU:H	1:A:67:ASP:H	6	0.15
(3,167)	1:A:64:GLU:H	1:A:67:ASP:H	22	0.15
(3,1658)	1:A:18:GLU:HG2	1:A:19:MET:HB2	18	0.15
(3,1658)	1:A:18:GLU:HG2	1:A:19:MET:HB3	18	0.15
(3,1658)	1:A:18:GLU:HG3	1:A:19:MET:HB2	18	0.15
(3,1658)	1:A:18:GLU:HG3	1:A:19:MET:HB3	18	0.15
(3,1614)	1:A:14:TYR:HB2	1:A:87:MET:HE1	13	0.15
(3,1614)	1:A:14:TYR:HB2	1:A:87:MET:HE2	13	0.15
(3,1614)	1:A:14:TYR:HB2	1:A:87:MET:HE3	13	0.15
(3,1614)	1:A:14:TYR:HB3	1:A:87:MET:HE1	13	0.15
(3,1614)	1:A:14:TYR:HB3	1:A:87:MET:HE2	13	0.15
(3,1614)	1:A:14:TYR:HB3	1:A:87:MET:HE3	13	0.15
(3,1613)	1:A:14:TYR:HB2	1:A:84:VAL:HG11	7	0.15
(3,1613)	1:A:14:TYR:HB2	1:A:84:VAL:HG12	7	0.15
(3,1613)	1:A:14:TYR:HB2	1:A:84:VAL:HG13	7	0.15
(3,1613)	1:A:14:TYR:HB2	1:A:84:VAL:HG21	7	0.15
(3,1613)	1:A:14:TYR:HB2	1:A:84:VAL:HG22	7	0.15
(3,1613)	1:A:14:TYR:HB2	1:A:84:VAL:HG23	7	0.15
(3,1613)	1:A:14:TYR:HB3	1:A:84:VAL:HG11	7	0.15
(3,1613)	1:A:14:TYR:HB3	1:A:84:VAL:HG12	7	0.15
(3,1613)	1:A:14:TYR:HB3	1:A:84:VAL:HG13	7	0.15
(3,1613)	1:A:14:TYR:HB3	1:A:84:VAL:HG21	7	0.15
(3,1613)	1:A:14:TYR:HB3	1:A:84:VAL:HG22	7	0.15
(3,1613)	1:A:14:TYR:HB3	1:A:84:VAL:HG23	7	0.15
(3,1607)	1:A:14:TYR:H	1:A:15:LEU:HD11	5	0.15
(3,1607)	1:A:14:TYR:H	1:A:15:LEU:HD12	5	0.15
(3,1607)	1:A:14:TYR:H	1:A:15:LEU:HD13	5	0.15
(3,1607)	1:A:14:TYR:H	1:A:15:LEU:HD21	5	0.15
(3,1607)	1:A:14:TYR:H	1:A:15:LEU:HD22	5	0.15
(3,1607)	1:A:14:TYR:H	1:A:15:LEU:HD23	5	0.15
(3,1596)	1:A:12:ARG:HA	1:A:15:LEU:HD11	12	0.15
(3,1596)	1:A:12:ARG:HA	1:A:15:LEU:HD12	12	0.15
(3,1596)	1:A:12:ARG:HA	1:A:15:LEU:HD13	12	0.15
(3,1596)	1:A:12:ARG:HA	1:A:15:LEU:HD21	12	0.15
(3,1596)	1:A:12:ARG:HA	1:A:15:LEU:HD22	12	0.15
(3,1596)	1:A:12:ARG:HA	1:A:15:LEU:HD23	12	0.15
(3,1583)	1:A:10:GLU:H	1:A:81:VAL:HG11	15	0.15
(3,1583)	1:A:10:GLU:H	1:A:81:VAL:HG12	15	0.15
(3,1583)	1:A:10:GLU:H	1:A:81:VAL:HG13	15	0.15
(3,1583)	1:A:10:GLU:H	1:A:81:VAL:HG21	15	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,1583)	1:A:10:GLU:H	1:A:81:VAL:HG22	15	0.15
(3,1583)	1:A:10:GLU:H	1:A:81:VAL:HG23	15	0.15
(3,1555)	1:A:75:ASP:HA	1:A:78:GLU:H	20	0.15
(3,1524)	1:A:140:LYS:HA	1:A:140:LYS:HD2	20	0.15
(3,1524)	1:A:140:LYS:HA	1:A:140:LYS:HD3	20	0.15
(3,1511)	1:A:122:LYS:HA	1:A:122:LYS:HD2	3	0.15
(3,1511)	1:A:122:LYS:HA	1:A:122:LYS:HD3	3	0.15
(3,1498)	1:A:64:GLU:HA	1:A:66:VAL:HG21	16	0.15
(3,1498)	1:A:64:GLU:HA	1:A:66:VAL:HG22	16	0.15
(3,1498)	1:A:64:GLU:HA	1:A:66:VAL:HG23	16	0.15
(3,1492)	1:A:68:GLU:HA	1:A:68:GLU:HG2	5	0.15
(3,1434)	1:A:57:GLU:HA	1:A:57:GLU:HG3	24	0.15
(3,1414)	1:A:30:PHE:HA	1:A:46:VAL:HB	20	0.15
(3,1399)	1:A:22:GLU:HA	1:A:22:GLU:HG2	22	0.15
(3,1332)	1:A:65:GLU:HG3	1:A:66:VAL:HB	17	0.15
(3,1318)	1:A:7:GLN:HG3	1:A:10:GLU:HB2	4	0.15
(3,1318)	1:A:7:GLN:HG3	1:A:10:GLU:HB3	4	0.15
(3,1299)	1:A:64:GLU:HG3	1:A:65:GLU:H	24	0.15
(3,1245)	1:A:68:GLU:HA	1:A:68:GLU:HG3	8	0.15
(3,1206)	1:A:59:LEU:HB2	1:A:63:ILE:HD11	15	0.15
(3,1206)	1:A:59:LEU:HB2	1:A:63:ILE:HD12	15	0.15
(3,1206)	1:A:59:LEU:HB2	1:A:63:ILE:HD13	15	0.15
(3,120)	1:A:101:LEU:H	1:A:101:LEU:HB3	7	0.15
(3,120)	1:A:101:LEU:H	1:A:101:LEU:HB3	24	0.15
(3,1147)	1:A:38:ILE:H	1:A:74:ILE:HD11	11	0.15
(3,1147)	1:A:38:ILE:H	1:A:74:ILE:HD12	11	0.15
(3,1147)	1:A:38:ILE:H	1:A:74:ILE:HD13	11	0.15
(3,1130)	1:A:85:ARG:HA	1:A:85:ARG:HD2	15	0.15
(3,1130)	1:A:85:ARG:HA	1:A:85:ARG:HD3	15	0.15
(3,1100)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD11	17	0.15
(3,1100)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD12	17	0.15
(3,1100)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD13	17	0.15
(3,1100)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD11	17	0.15
(3,1100)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD12	17	0.15
(3,1100)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD13	17	0.15
(3,1100)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD11	17	0.15
(3,1100)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD12	17	0.15
(3,1100)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD13	17	0.15
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB1	1:A:82:MET:HE1	24	0.15
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB1	1:A:82:MET:HE2	24	0.15
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB1	1:A:82:MET:HE3	24	0.15
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB2	1:A:82:MET:HE1	24	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB2	1:A:82:MET:HE2	24	0.15
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB2	1:A:82:MET:HE3	24	0.15
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB3	1:A:82:MET:HE1	24	0.15
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB3	1:A:82:MET:HE2	24	0.15
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB3	1:A:82:MET:HE3	24	0.15
(3,1066)	1:A:29:MET:HE1	1:A:83:MET:HE1	11	0.15
(3,1066)	1:A:29:MET:HE1	1:A:83:MET:HE2	11	0.15
(3,1066)	1:A:29:MET:HE1	1:A:83:MET:HE3	11	0.15
(3,1066)	1:A:29:MET:HE2	1:A:83:MET:HE1	11	0.15
(3,1066)	1:A:29:MET:HE2	1:A:83:MET:HE2	11	0.15
(3,1066)	1:A:29:MET:HE2	1:A:83:MET:HE3	11	0.15
(3,1066)	1:A:29:MET:HE3	1:A:83:MET:HE1	11	0.15
(3,1066)	1:A:29:MET:HE3	1:A:83:MET:HE2	11	0.15
(3,1066)	1:A:29:MET:HE3	1:A:83:MET:HE3	11	0.15
(3,1054)	1:A:83:MET:HA	1:A:83:MET:HE1	21	0.15
(3,1054)	1:A:83:MET:HA	1:A:83:MET:HE2	21	0.15
(3,1054)	1:A:83:MET:HA	1:A:83:MET:HE3	21	0.15
(3,1032)	1:A:29:MET:HE1	1:A:124:LEU:HB2	16	0.15
(3,1032)	1:A:29:MET:HE2	1:A:124:LEU:HB2	16	0.15
(3,1032)	1:A:29:MET:HE3	1:A:124:LEU:HB2	16	0.15
(3,998)	1:A:120:MET:HE1	1:A:124:LEU:H	22	0.14
(3,998)	1:A:120:MET:HE2	1:A:124:LEU:H	22	0.14
(3,998)	1:A:120:MET:HE3	1:A:124:LEU:H	22	0.14
(3,922)	1:A:19:MET:HE1	1:A:135:LEU:HA	14	0.14
(3,922)	1:A:19:MET:HE2	1:A:135:LEU:HA	14	0.14
(3,922)	1:A:19:MET:HE3	1:A:135:LEU:HA	14	0.14
(3,920)	1:A:15:LEU:HA	1:A:19:MET:HE1	8	0.14
(3,920)	1:A:15:LEU:HA	1:A:19:MET:HE2	8	0.14
(3,920)	1:A:15:LEU:HA	1:A:19:MET:HE3	8	0.14
(3,888)	1:A:142:VAL:HG11	1:A:143:LYS:HE2	6	0.14
(3,888)	1:A:142:VAL:HG11	1:A:143:LYS:HE3	6	0.14
(3,888)	1:A:142:VAL:HG12	1:A:143:LYS:HE2	6	0.14
(3,888)	1:A:142:VAL:HG12	1:A:143:LYS:HE3	6	0.14
(3,888)	1:A:142:VAL:HG13	1:A:143:LYS:HE2	6	0.14
(3,888)	1:A:142:VAL:HG13	1:A:143:LYS:HE3	6	0.14
(3,888)	1:A:142:VAL:HG11	1:A:143:LYS:HE2	7	0.14
(3,888)	1:A:142:VAL:HG11	1:A:143:LYS:HE3	7	0.14
(3,888)	1:A:142:VAL:HG12	1:A:143:LYS:HE2	7	0.14
(3,888)	1:A:142:VAL:HG12	1:A:143:LYS:HE3	7	0.14
(3,888)	1:A:142:VAL:HG13	1:A:143:LYS:HE2	7	0.14
(3,888)	1:A:142:VAL:HG13	1:A:143:LYS:HE3	7	0.14
(3,888)	1:A:142:VAL:HG11	1:A:143:LYS:HE2	9	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,888)	1:A:142:VAL:HG11	1:A:143:LYS:HE3	9	0.14
(3,888)	1:A:142:VAL:HG12	1:A:143:LYS:HE2	9	0.14
(3,888)	1:A:142:VAL:HG12	1:A:143:LYS:HE3	9	0.14
(3,888)	1:A:142:VAL:HG13	1:A:143:LYS:HE2	9	0.14
(3,888)	1:A:142:VAL:HG13	1:A:143:LYS:HE3	9	0.14
(3,885)	1:A:142:VAL:HG11	1:A:143:LYS:HG2	19	0.14
(3,885)	1:A:142:VAL:HG11	1:A:143:LYS:HG3	19	0.14
(3,885)	1:A:142:VAL:HG12	1:A:143:LYS:HG2	19	0.14
(3,885)	1:A:142:VAL:HG12	1:A:143:LYS:HG3	19	0.14
(3,885)	1:A:142:VAL:HG13	1:A:143:LYS:HG2	19	0.14
(3,885)	1:A:142:VAL:HG13	1:A:143:LYS:HG3	19	0.14
(3,881)	1:A:102:ARG:HG2	1:A:108:PRO:HD3	1	0.14
(3,881)	1:A:102:ARG:HG3	1:A:108:PRO:HD3	1	0.14
(3,880)	1:A:45:THR:HG21	1:A:49:MET:HB3	6	0.14
(3,880)	1:A:45:THR:HG22	1:A:49:MET:HB3	6	0.14
(3,880)	1:A:45:THR:HG23	1:A:49:MET:HB3	6	0.14
(3,880)	1:A:45:THR:HG21	1:A:49:MET:HB3	18	0.14
(3,880)	1:A:45:THR:HG22	1:A:49:MET:HB3	18	0.14
(3,880)	1:A:45:THR:HG23	1:A:49:MET:HB3	18	0.14
(3,873)	1:A:53:THR:HG21	1:A:54:PRO:HD2	22	0.14
(3,873)	1:A:53:THR:HG22	1:A:54:PRO:HD2	22	0.14
(3,873)	1:A:53:THR:HG23	1:A:54:PRO:HD2	22	0.14
(3,825)	1:A:39:SER:H	1:A:73:THR:HG21	5	0.14
(3,825)	1:A:39:SER:H	1:A:73:THR:HG22	5	0.14
(3,825)	1:A:39:SER:H	1:A:73:THR:HG23	5	0.14
(3,825)	1:A:39:SER:H	1:A:73:THR:HG21	10	0.14
(3,825)	1:A:39:SER:H	1:A:73:THR:HG22	10	0.14
(3,825)	1:A:39:SER:H	1:A:73:THR:HG23	10	0.14
(3,82)	1:A:24:LYS:H	1:A:24:LYS:HB3	9	0.14
(3,82)	1:A:24:LYS:H	1:A:24:LYS:HB3	18	0.14
(3,82)	1:A:24:LYS:H	1:A:24:LYS:HB3	20	0.14
(3,813)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD21	16	0.14
(3,813)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD22	16	0.14
(3,813)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD23	16	0.14
(3,813)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD21	16	0.14
(3,813)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD22	16	0.14
(3,813)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD23	16	0.14
(3,813)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD21	16	0.14
(3,813)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD22	16	0.14
(3,813)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD23	16	0.14
(3,776)	1:A:81:VAL:HA	1:A:84:VAL:HG11	9	0.14
(3,776)	1:A:81:VAL:HA	1:A:84:VAL:HG12	9	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,776)	1:A:81:VAL:HA	1:A:84:VAL:HG13	9	0.14
(3,752)	1:A:41:LYS:HG3	1:A:42:GLU:H	4	0.14
(3,691)	1:A:143:LYS:HA	1:A:143:LYS:HE2	4	0.14
(3,691)	1:A:143:LYS:HA	1:A:143:LYS:HE3	4	0.14
(3,647)	1:A:111:ARG:HG2	1:A:113:VAL:H	24	0.14
(3,647)	1:A:111:ARG:HG3	1:A:113:VAL:H	24	0.14
(3,646)	1:A:101:LEU:HG	1:A:102:ARG:H	24	0.14
(3,632)	1:A:125:LEU:HB3	1:A:129:HIS:HB3	10	0.14
(3,562)	1:A:65:GLU:H	1:A:66:VAL:HG11	15	0.14
(3,562)	1:A:65:GLU:H	1:A:66:VAL:HG12	15	0.14
(3,562)	1:A:65:GLU:H	1:A:66:VAL:HG13	15	0.14
(3,55)	1:A:113:VAL:HA	1:A:114:ARG:H	9	0.14
(3,524)	1:A:71:SER:H	1:A:72:GLY:H	21	0.14
(3,517)	1:A:15:LEU:HB2	1:A:16:SER:H	25	0.14
(3,467)	1:A:19:MET:HG3	1:A:20:ILE:H	12	0.14
(3,390)	1:A:98:LEU:HB2	1:A:99:PHE:H	4	0.14
(3,328)	1:A:81:VAL:H	1:A:83:MET:HG2	6	0.14
(3,328)	1:A:81:VAL:H	1:A:83:MET:HG3	6	0.14
(3,328)	1:A:81:VAL:H	1:A:83:MET:HG2	14	0.14
(3,328)	1:A:81:VAL:H	1:A:83:MET:HG3	14	0.14
(3,32)	1:A:52:GLN:H	1:A:52:GLN:HE22	11	0.14
(3,32)	1:A:52:GLN:H	1:A:52:GLN:HE22	17	0.14
(3,28)	1:A:35:GLY:H	1:A:36:GLY:HA2	15	0.14
(3,2216)	1:A:142:VAL:HG11	1:A:143:LYS:HG2	15	0.14
(3,2216)	1:A:142:VAL:HG11	1:A:143:LYS:HG3	15	0.14
(3,2216)	1:A:142:VAL:HG12	1:A:143:LYS:HG2	15	0.14
(3,2216)	1:A:142:VAL:HG12	1:A:143:LYS:HG3	15	0.14
(3,2216)	1:A:142:VAL:HG13	1:A:143:LYS:HG2	15	0.14
(3,2216)	1:A:142:VAL:HG13	1:A:143:LYS:HG3	15	0.14
(3,2216)	1:A:142:VAL:HG21	1:A:143:LYS:HG2	15	0.14
(3,2216)	1:A:142:VAL:HG21	1:A:143:LYS:HG3	15	0.14
(3,2216)	1:A:142:VAL:HG22	1:A:143:LYS:HG2	15	0.14
(3,2216)	1:A:142:VAL:HG22	1:A:143:LYS:HG3	15	0.14
(3,2216)	1:A:142:VAL:HG23	1:A:143:LYS:HG2	15	0.14
(3,2216)	1:A:142:VAL:HG23	1:A:143:LYS:HG3	15	0.14
(3,2210)	1:A:141:GLN:HG2	1:A:142:VAL:HG11	12	0.14
(3,2210)	1:A:141:GLN:HG2	1:A:142:VAL:HG12	12	0.14
(3,2210)	1:A:141:GLN:HG2	1:A:142:VAL:HG13	12	0.14
(3,2210)	1:A:141:GLN:HG2	1:A:142:VAL:HG21	12	0.14
(3,2210)	1:A:141:GLN:HG2	1:A:142:VAL:HG22	12	0.14
(3,2210)	1:A:141:GLN:HG2	1:A:142:VAL:HG23	12	0.14
(3,2210)	1:A:141:GLN:HG3	1:A:142:VAL:HG11	12	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,2210)	1:A:141:GLN:HG3	1:A:142:VAL:HG12	12	0.14
(3,2210)	1:A:141:GLN:HG3	1:A:142:VAL:HG13	12	0.14
(3,2210)	1:A:141:GLN:HG3	1:A:142:VAL:HG21	12	0.14
(3,2210)	1:A:141:GLN:HG3	1:A:142:VAL:HG22	12	0.14
(3,2210)	1:A:141:GLN:HG3	1:A:142:VAL:HG23	12	0.14
(3,2200)	1:A:139:LEU:HA	1:A:139:LEU:HD11	24	0.14
(3,2200)	1:A:139:LEU:HA	1:A:139:LEU:HD12	24	0.14
(3,2200)	1:A:139:LEU:HA	1:A:139:LEU:HD13	24	0.14
(3,2200)	1:A:139:LEU:HA	1:A:139:LEU:HD21	24	0.14
(3,2200)	1:A:139:LEU:HA	1:A:139:LEU:HD22	24	0.14
(3,2200)	1:A:139:LEU:HA	1:A:139:LEU:HD23	24	0.14
(3,2198)	1:A:139:LEU:H	1:A:139:LEU:HB2	15	0.14
(3,2198)	1:A:139:LEU:H	1:A:139:LEU:HB3	15	0.14
(3,2105)	1:A:116:SER:HB2	1:A:117:ALA:HB1	12	0.14
(3,2105)	1:A:116:SER:HB2	1:A:117:ALA:HB2	12	0.14
(3,2105)	1:A:116:SER:HB2	1:A:117:ALA:HB3	12	0.14
(3,2105)	1:A:116:SER:HB3	1:A:117:ALA:HB1	12	0.14
(3,2105)	1:A:116:SER:HB3	1:A:117:ALA:HB2	12	0.14
(3,2105)	1:A:116:SER:HB3	1:A:117:ALA:HB3	12	0.14
(3,2068)	1:A:102:ARG:HD2	1:A:107:ARG:HB2	25	0.14
(3,2068)	1:A:102:ARG:HD2	1:A:107:ARG:HB3	25	0.14
(3,2068)	1:A:102:ARG:HD3	1:A:107:ARG:HB2	25	0.14
(3,2068)	1:A:102:ARG:HD3	1:A:107:ARG:HB3	25	0.14
(3,2066)	1:A:102:ARG:HG2	1:A:107:ARG:HB2	20	0.14
(3,2066)	1:A:102:ARG:HG2	1:A:107:ARG:HB3	20	0.14
(3,2066)	1:A:102:ARG:HG3	1:A:107:ARG:HB2	20	0.14
(3,2066)	1:A:102:ARG:HG3	1:A:107:ARG:HB3	20	0.14
(3,2058)	1:A:100:ASP:HB2	1:A:101:LEU:H	20	0.14
(3,2058)	1:A:100:ASP:HB3	1:A:101:LEU:H	20	0.14
(3,2049)	1:A:97:LYS:HG2	1:A:98:LEU:H	6	0.14
(3,2049)	1:A:97:LYS:HG3	1:A:98:LEU:H	6	0.14
(3,2049)	1:A:97:LYS:HG2	1:A:98:LEU:H	24	0.14
(3,2049)	1:A:97:LYS:HG3	1:A:98:LEU:H	24	0.14
(3,2046)	1:A:97:LYS:HB2	1:A:98:LEU:H	5	0.14
(3,2046)	1:A:97:LYS:HB3	1:A:98:LEU:H	5	0.14
(3,2032)	1:A:88:LYS:HE2	1:A:135:LEU:HD11	15	0.14
(3,2032)	1:A:88:LYS:HE2	1:A:135:LEU:HD12	15	0.14
(3,2032)	1:A:88:LYS:HE2	1:A:135:LEU:HD13	15	0.14
(3,2032)	1:A:88:LYS:HE2	1:A:135:LEU:HD21	15	0.14
(3,2032)	1:A:88:LYS:HE2	1:A:135:LEU:HD22	15	0.14
(3,2032)	1:A:88:LYS:HE2	1:A:135:LEU:HD23	15	0.14
(3,2032)	1:A:88:LYS:HE3	1:A:135:LEU:HD11	15	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,2032)	1:A:88:LYS:HE3	1:A:135:LEU:HD12	15	0.14
(3,2032)	1:A:88:LYS:HE3	1:A:135:LEU:HD13	15	0.14
(3,2032)	1:A:88:LYS:HE3	1:A:135:LEU:HD21	15	0.14
(3,2032)	1:A:88:LYS:HE3	1:A:135:LEU:HD22	15	0.14
(3,2032)	1:A:88:LYS:HE3	1:A:135:LEU:HD23	15	0.14
(3,2014)	1:A:87:MET:HB2	1:A:135:LEU:HD11	3	0.14
(3,2014)	1:A:87:MET:HB2	1:A:135:LEU:HD12	3	0.14
(3,2014)	1:A:87:MET:HB2	1:A:135:LEU:HD13	3	0.14
(3,2014)	1:A:87:MET:HB2	1:A:135:LEU:HD21	3	0.14
(3,2014)	1:A:87:MET:HB2	1:A:135:LEU:HD22	3	0.14
(3,2014)	1:A:87:MET:HB2	1:A:135:LEU:HD23	3	0.14
(3,2014)	1:A:87:MET:HB3	1:A:135:LEU:HD11	3	0.14
(3,2014)	1:A:87:MET:HB3	1:A:135:LEU:HD12	3	0.14
(3,2014)	1:A:87:MET:HB3	1:A:135:LEU:HD13	3	0.14
(3,2014)	1:A:87:MET:HB3	1:A:135:LEU:HD21	3	0.14
(3,2014)	1:A:87:MET:HB3	1:A:135:LEU:HD22	3	0.14
(3,2014)	1:A:87:MET:HB3	1:A:135:LEU:HD23	3	0.14
(3,1996)	1:A:85:ARG:HA	1:A:88:LYS:HG2	18	0.14
(3,1996)	1:A:85:ARG:HA	1:A:88:LYS:HG3	18	0.14
(3,1986)	1:A:84:VAL:HG11	1:A:87:MET:HE1	10	0.14
(3,1986)	1:A:84:VAL:HG11	1:A:87:MET:HE2	10	0.14
(3,1986)	1:A:84:VAL:HG11	1:A:87:MET:HE3	10	0.14
(3,1986)	1:A:84:VAL:HG12	1:A:87:MET:HE1	10	0.14
(3,1986)	1:A:84:VAL:HG12	1:A:87:MET:HE2	10	0.14
(3,1986)	1:A:84:VAL:HG12	1:A:87:MET:HE3	10	0.14
(3,1986)	1:A:84:VAL:HG13	1:A:87:MET:HE1	10	0.14
(3,1986)	1:A:84:VAL:HG13	1:A:87:MET:HE2	10	0.14
(3,1986)	1:A:84:VAL:HG13	1:A:87:MET:HE3	10	0.14
(3,1986)	1:A:84:VAL:HG21	1:A:87:MET:HE1	10	0.14
(3,1986)	1:A:84:VAL:HG21	1:A:87:MET:HE2	10	0.14
(3,1986)	1:A:84:VAL:HG21	1:A:87:MET:HE3	10	0.14
(3,1986)	1:A:84:VAL:HG22	1:A:87:MET:HE1	10	0.14
(3,1986)	1:A:84:VAL:HG22	1:A:87:MET:HE2	10	0.14
(3,1986)	1:A:84:VAL:HG22	1:A:87:MET:HE3	10	0.14
(3,1986)	1:A:84:VAL:HG23	1:A:87:MET:HE1	10	0.14
(3,1986)	1:A:84:VAL:HG23	1:A:87:MET:HE2	10	0.14
(3,1986)	1:A:84:VAL:HG23	1:A:87:MET:HE3	10	0.14
(3,1983)	1:A:84:VAL:HG11	1:A:86:GLN:H	23	0.14
(3,1983)	1:A:84:VAL:HG12	1:A:86:GLN:H	23	0.14
(3,1983)	1:A:84:VAL:HG13	1:A:86:GLN:H	23	0.14
(3,1983)	1:A:84:VAL:HG21	1:A:86:GLN:H	23	0.14
(3,1983)	1:A:84:VAL:HG22	1:A:86:GLN:H	23	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,1983)	1:A:84:VAL:HG23	1:A:86:GLN:H	23	0.14
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD11	15	0.14
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD12	15	0.14
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD13	15	0.14
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD21	15	0.14
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD22	15	0.14
(3,1965)	1:A:82:MET:HG2	1:A:124:LEU:HD23	15	0.14
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD11	15	0.14
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD12	15	0.14
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD13	15	0.14
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD21	15	0.14
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD22	15	0.14
(3,1965)	1:A:82:MET:HG3	1:A:124:LEU:HD23	15	0.14
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG11	1:A:85:ARG:HD2	15	0.14
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG11	1:A:85:ARG:HD3	15	0.14
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG12	1:A:85:ARG:HD2	15	0.14
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG12	1:A:85:ARG:HD3	15	0.14
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG13	1:A:85:ARG:HD2	15	0.14
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG13	1:A:85:ARG:HD3	15	0.14
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG21	1:A:85:ARG:HD2	15	0.14
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG21	1:A:85:ARG:HD3	15	0.14
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG22	1:A:85:ARG:HD2	15	0.14
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG22	1:A:85:ARG:HD3	15	0.14
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG23	1:A:85:ARG:HD2	15	0.14
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG23	1:A:85:ARG:HD3	15	0.14
(3,1887)	1:A:55:THR:H	1:A:59:LEU:HD11	5	0.14
(3,1887)	1:A:55:THR:H	1:A:59:LEU:HD12	5	0.14
(3,1887)	1:A:55:THR:H	1:A:59:LEU:HD13	5	0.14
(3,1887)	1:A:55:THR:H	1:A:59:LEU:HD21	5	0.14
(3,1887)	1:A:55:THR:H	1:A:59:LEU:HD22	5	0.14
(3,1887)	1:A:55:THR:H	1:A:59:LEU:HD23	5	0.14
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:124:LEU:HA	5	0.14
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG12	1:A:124:LEU:HA	5	0.14
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:124:LEU:HA	5	0.14
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:124:LEU:HA	5	0.14
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:124:LEU:HA	5	0.14
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:124:LEU:HA	5	0.14
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:124:LEU:HA	13	0.14
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG12	1:A:124:LEU:HA	13	0.14
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:124:LEU:HA	13	0.14
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:124:LEU:HA	13	0.14
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:124:LEU:HA	13	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:124:LEU:HA	13	0.14
(3,1831)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:50:LEU:HG	16	0.14
(3,1831)	1:A:46:VAL:HG12	1:A:50:LEU:HG	16	0.14
(3,1831)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:50:LEU:HG	16	0.14
(3,1831)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:50:LEU:HG	16	0.14
(3,1831)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:50:LEU:HG	16	0.14
(3,1831)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:50:LEU:HG	16	0.14
(3,1800)	1:A:43:LEU:HA	1:A:46:VAL:HG11	13	0.14
(3,1800)	1:A:43:LEU:HA	1:A:46:VAL:HG12	13	0.14
(3,1800)	1:A:43:LEU:HA	1:A:46:VAL:HG13	13	0.14
(3,1800)	1:A:43:LEU:HA	1:A:46:VAL:HG21	13	0.14
(3,1800)	1:A:43:LEU:HA	1:A:46:VAL:HG22	13	0.14
(3,1800)	1:A:43:LEU:HA	1:A:46:VAL:HG23	13	0.14
(3,1798)	1:A:43:LEU:H	1:A:59:LEU:HD11	5	0.14
(3,1798)	1:A:43:LEU:H	1:A:59:LEU:HD12	5	0.14
(3,1798)	1:A:43:LEU:H	1:A:59:LEU:HD13	5	0.14
(3,1798)	1:A:43:LEU:H	1:A:59:LEU:HD21	5	0.14
(3,1798)	1:A:43:LEU:H	1:A:59:LEU:HD22	5	0.14
(3,1798)	1:A:43:LEU:H	1:A:59:LEU:HD23	5	0.14
(3,1776)	1:A:40:VAL:HG11	1:A:56:LYS:HG2	23	0.14
(3,1776)	1:A:40:VAL:HG11	1:A:56:LYS:HG3	23	0.14
(3,1776)	1:A:40:VAL:HG12	1:A:56:LYS:HG2	23	0.14
(3,1776)	1:A:40:VAL:HG12	1:A:56:LYS:HG3	23	0.14
(3,1776)	1:A:40:VAL:HG13	1:A:56:LYS:HG2	23	0.14
(3,1776)	1:A:40:VAL:HG13	1:A:56:LYS:HG3	23	0.14
(3,1776)	1:A:40:VAL:HG21	1:A:56:LYS:HG2	23	0.14
(3,1776)	1:A:40:VAL:HG21	1:A:56:LYS:HG3	23	0.14
(3,1776)	1:A:40:VAL:HG22	1:A:56:LYS:HG2	23	0.14
(3,1776)	1:A:40:VAL:HG22	1:A:56:LYS:HG3	23	0.14
(3,1776)	1:A:40:VAL:HG23	1:A:56:LYS:HG2	23	0.14
(3,1776)	1:A:40:VAL:HG23	1:A:56:LYS:HG3	23	0.14
(3,1752)	1:A:33:ASP:H	1:A:33:ASP:HB2	20	0.14
(3,1752)	1:A:33:ASP:H	1:A:33:ASP:HB3	20	0.14
(3,1745)	1:A:30:PHE:HB2	1:A:46:VAL:H	7	0.14
(3,1745)	1:A:30:PHE:HB3	1:A:46:VAL:H	7	0.14
(3,1732)	1:A:29:MET:HG2	1:A:83:MET:HE1	20	0.14
(3,1732)	1:A:29:MET:HG2	1:A:83:MET:HE2	20	0.14
(3,1732)	1:A:29:MET:HG2	1:A:83:MET:HE3	20	0.14
(3,1732)	1:A:29:MET:HG3	1:A:83:MET:HE1	20	0.14
(3,1732)	1:A:29:MET:HG3	1:A:83:MET:HE2	20	0.14
(3,1732)	1:A:29:MET:HG3	1:A:83:MET:HE3	20	0.14
(3,1709)	1:A:24:LYS:HG2	1:A:25:ALA:H	14	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,1709)	1:A:24:LYS:HG3	1:A:25:ALA:H	14	0.14
(3,1703)	1:A:24:LYS:HA	1:A:24:LYS:HD2	4	0.14
(3,1703)	1:A:24:LYS:HA	1:A:24:LYS:HD3	4	0.14
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB2	1:A:83:MET:HE1	6	0.14
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB2	1:A:83:MET:HE2	6	0.14
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB2	1:A:83:MET:HE3	6	0.14
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB3	1:A:83:MET:HE1	6	0.14
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB3	1:A:83:MET:HE2	6	0.14
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB3	1:A:83:MET:HE3	6	0.14
(3,167)	1:A:64:GLU:H	1:A:67:ASP:H	11	0.14
(3,167)	1:A:64:GLU:H	1:A:67:ASP:H	12	0.14
(3,167)	1:A:64:GLU:H	1:A:67:ASP:H	18	0.14
(3,1666)	1:A:19:MET:HB2	1:A:131:VAL:HG11	7	0.14
(3,1666)	1:A:19:MET:HB2	1:A:131:VAL:HG12	7	0.14
(3,1666)	1:A:19:MET:HB2	1:A:131:VAL:HG13	7	0.14
(3,1666)	1:A:19:MET:HB3	1:A:131:VAL:HG11	7	0.14
(3,1666)	1:A:19:MET:HB3	1:A:131:VAL:HG12	7	0.14
(3,1666)	1:A:19:MET:HB3	1:A:131:VAL:HG13	7	0.14
(3,1608)	1:A:14:TYR:H	1:A:80:LEU:HD11	14	0.14
(3,1608)	1:A:14:TYR:H	1:A:80:LEU:HD12	14	0.14
(3,1608)	1:A:14:TYR:H	1:A:80:LEU:HD13	14	0.14
(3,1608)	1:A:14:TYR:H	1:A:80:LEU:HD21	14	0.14
(3,1608)	1:A:14:TYR:H	1:A:80:LEU:HD22	14	0.14
(3,1608)	1:A:14:TYR:H	1:A:80:LEU:HD23	14	0.14
(3,1608)	1:A:14:TYR:H	1:A:80:LEU:HD11	24	0.14
(3,1608)	1:A:14:TYR:H	1:A:80:LEU:HD12	24	0.14
(3,1608)	1:A:14:TYR:H	1:A:80:LEU:HD13	24	0.14
(3,1608)	1:A:14:TYR:H	1:A:80:LEU:HD21	24	0.14
(3,1608)	1:A:14:TYR:H	1:A:80:LEU:HD22	24	0.14
(3,1608)	1:A:14:TYR:H	1:A:80:LEU:HD23	24	0.14
(3,1603)	1:A:12:ARG:HD2	1:A:80:LEU:HD11	23	0.14
(3,1603)	1:A:12:ARG:HD2	1:A:80:LEU:HD12	23	0.14
(3,1603)	1:A:12:ARG:HD2	1:A:80:LEU:HD13	23	0.14
(3,1603)	1:A:12:ARG:HD2	1:A:80:LEU:HD21	23	0.14
(3,1603)	1:A:12:ARG:HD2	1:A:80:LEU:HD22	23	0.14
(3,1603)	1:A:12:ARG:HD2	1:A:80:LEU:HD23	23	0.14
(3,1603)	1:A:12:ARG:HD3	1:A:80:LEU:HD11	23	0.14
(3,1603)	1:A:12:ARG:HD3	1:A:80:LEU:HD12	23	0.14
(3,1603)	1:A:12:ARG:HD3	1:A:80:LEU:HD13	23	0.14
(3,1603)	1:A:12:ARG:HD3	1:A:80:LEU:HD21	23	0.14
(3,1603)	1:A:12:ARG:HD3	1:A:80:LEU:HD22	23	0.14
(3,1603)	1:A:12:ARG:HD3	1:A:80:LEU:HD23	23	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,1552)	1:A:43:LEU:HA	1:A:74:ILE:HD11	20	0.14
(3,1552)	1:A:43:LEU:HA	1:A:74:ILE:HD12	20	0.14
(3,1552)	1:A:43:LEU:HA	1:A:74:ILE:HD13	20	0.14
(3,1536)	1:A:22:GLU:HB3	1:A:131:VAL:HG11	25	0.14
(3,1536)	1:A:22:GLU:HB3	1:A:131:VAL:HG12	25	0.14
(3,1536)	1:A:22:GLU:HB3	1:A:131:VAL:HG13	25	0.14
(3,1521)	1:A:18:GLU:HB3	1:A:19:MET:H	22	0.14
(3,1520)	1:A:22:GLU:H	1:A:22:GLU:HB3	25	0.14
(3,1498)	1:A:64:GLU:HA	1:A:66:VAL:HG21	2	0.14
(3,1498)	1:A:64:GLU:HA	1:A:66:VAL:HG22	2	0.14
(3,1498)	1:A:64:GLU:HA	1:A:66:VAL:HG23	2	0.14
(3,1498)	1:A:64:GLU:HA	1:A:66:VAL:HG21	6	0.14
(3,1498)	1:A:64:GLU:HA	1:A:66:VAL:HG22	6	0.14
(3,1498)	1:A:64:GLU:HA	1:A:66:VAL:HG23	6	0.14
(3,1498)	1:A:64:GLU:HA	1:A:66:VAL:HG21	22	0.14
(3,1498)	1:A:64:GLU:HA	1:A:66:VAL:HG22	22	0.14
(3,1498)	1:A:64:GLU:HA	1:A:66:VAL:HG23	22	0.14
(3,1498)	1:A:64:GLU:HA	1:A:66:VAL:HG21	23	0.14
(3,1498)	1:A:64:GLU:HA	1:A:66:VAL:HG22	23	0.14
(3,1498)	1:A:64:GLU:HA	1:A:66:VAL:HG23	23	0.14
(3,1491)	1:A:58:GLU:HA	1:A:58:GLU:HG2	15	0.14
(3,1445)	1:A:56:LYS:HA	1:A:59:LEU:HD21	14	0.14
(3,1445)	1:A:56:LYS:HA	1:A:59:LEU:HD22	14	0.14
(3,1445)	1:A:56:LYS:HA	1:A:59:LEU:HD23	14	0.14
(3,1414)	1:A:30:PHE:HA	1:A:46:VAL:HB	14	0.14
(3,1406)	1:A:115:MET:HG2	1:A:120:MET:H	9	0.14
(3,1404)	1:A:115:MET:HG2	1:A:116:SER:H	3	0.14
(3,14)	1:A:31:ASP:H	1:A:32:ALA:H	19	0.14
(3,1396)	1:A:83:MET:HB3	1:A:83:MET:HE1	8	0.14
(3,1396)	1:A:83:MET:HB3	1:A:83:MET:HE2	8	0.14
(3,1396)	1:A:83:MET:HB3	1:A:83:MET:HE3	8	0.14
(3,1378)	1:A:109:PRO:HB3	1:A:111:ARG:H	24	0.14
(3,1340)	1:A:144:LYS:HB2	1:A:146:ASP:HB2	23	0.14
(3,1340)	1:A:144:LYS:HB2	1:A:146:ASP:HB3	23	0.14
(3,1331)	1:A:47:MET:HA	1:A:47:MET:HG2	8	0.14
(3,1298)	1:A:64:GLU:HG2	1:A:65:GLU:H	4	0.14
(3,1298)	1:A:64:GLU:HG2	1:A:65:GLU:H	18	0.14
(3,128)	1:A:107:ARG:H	1:A:107:ARG:HD2	8	0.14
(3,128)	1:A:107:ARG:H	1:A:107:ARG:HD3	8	0.14
(3,1246)	1:A:137:ALA:HB1	1:A:138:ASN:HB3	5	0.14
(3,1246)	1:A:137:ALA:HB2	1:A:138:ASN:HB3	5	0.14
(3,1246)	1:A:137:ALA:HB3	1:A:138:ASN:HB3	5	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,1246)	1:A:137:ALA:HB1	1:A:138:ASN:HB3	25	0.14
(3,1246)	1:A:137:ALA:HB2	1:A:138:ASN:HB3	25	0.14
(3,1246)	1:A:137:ALA:HB3	1:A:138:ASN:HB3	25	0.14
(3,1245)	1:A:68:GLU:HA	1:A:68:GLU:HG3	9	0.14
(3,1245)	1:A:68:GLU:HA	1:A:68:GLU:HG3	23	0.14
(3,1216)	1:A:11:ALA:HB1	1:A:80:LEU:HB2	21	0.14
(3,1216)	1:A:11:ALA:HB2	1:A:80:LEU:HB2	21	0.14
(3,1216)	1:A:11:ALA:HB3	1:A:80:LEU:HB2	21	0.14
(3,1206)	1:A:59:LEU:HB2	1:A:63:ILE:HD11	13	0.14
(3,1206)	1:A:59:LEU:HB2	1:A:63:ILE:HD12	13	0.14
(3,1206)	1:A:59:LEU:HB2	1:A:63:ILE:HD13	13	0.14
(3,1206)	1:A:59:LEU:HB2	1:A:63:ILE:HD11	14	0.14
(3,1206)	1:A:59:LEU:HB2	1:A:63:ILE:HD12	14	0.14
(3,1206)	1:A:59:LEU:HB2	1:A:63:ILE:HD13	14	0.14
(3,1182)	1:A:56:LYS:HD2	1:A:59:LEU:HB2	15	0.14
(3,1175)	1:A:135:LEU:H	1:A:135:LEU:HB2	21	0.14
(3,115)	1:A:39:SER:H	1:A:42:GLU:HB3	15	0.14
(3,115)	1:A:39:SER:H	1:A:42:GLU:HB3	16	0.14
(3,1147)	1:A:38:ILE:H	1:A:74:ILE:HD11	3	0.14
(3,1147)	1:A:38:ILE:H	1:A:74:ILE:HD12	3	0.14
(3,1147)	1:A:38:ILE:H	1:A:74:ILE:HD13	3	0.14
(3,1120)	1:A:38:ILE:HD11	1:A:43:LEU:HA	5	0.14
(3,1120)	1:A:38:ILE:HD12	1:A:43:LEU:HA	5	0.14
(3,1120)	1:A:38:ILE:HD13	1:A:43:LEU:HA	5	0.14
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB1	1:A:82:MET:HE1	20	0.14
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB1	1:A:82:MET:HE2	20	0.14
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB1	1:A:82:MET:HE3	20	0.14
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB2	1:A:82:MET:HE1	20	0.14
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB2	1:A:82:MET:HE2	20	0.14
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB2	1:A:82:MET:HE3	20	0.14
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB3	1:A:82:MET:HE1	20	0.14
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB3	1:A:82:MET:HE2	20	0.14
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB3	1:A:82:MET:HE3	20	0.14
(3,1066)	1:A:29:MET:HE1	1:A:83:MET:HE1	16	0.14
(3,1066)	1:A:29:MET:HE1	1:A:83:MET:HE2	16	0.14
(3,1066)	1:A:29:MET:HE1	1:A:83:MET:HE3	16	0.14
(3,1066)	1:A:29:MET:HE2	1:A:83:MET:HE1	16	0.14
(3,1066)	1:A:29:MET:HE2	1:A:83:MET:HE2	16	0.14
(3,1066)	1:A:29:MET:HE2	1:A:83:MET:HE3	16	0.14
(3,1066)	1:A:29:MET:HE3	1:A:83:MET:HE1	16	0.14
(3,1066)	1:A:29:MET:HE3	1:A:83:MET:HE2	16	0.14
(3,1066)	1:A:29:MET:HE3	1:A:83:MET:HE3	16	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,1065)	1:A:82:MET:HG2	1:A:83:MET:HE1	9	0.14
(3,1065)	1:A:82:MET:HG2	1:A:83:MET:HE2	9	0.14
(3,1065)	1:A:82:MET:HG2	1:A:83:MET:HE3	9	0.14
(3,1065)	1:A:82:MET:HG3	1:A:83:MET:HE1	9	0.14
(3,1065)	1:A:82:MET:HG3	1:A:83:MET:HE2	9	0.14
(3,1065)	1:A:82:MET:HG3	1:A:83:MET:HE3	9	0.14
(3,1054)	1:A:83:MET:HA	1:A:83:MET:HE1	14	0.14
(3,1054)	1:A:83:MET:HA	1:A:83:MET:HE2	14	0.14
(3,1054)	1:A:83:MET:HA	1:A:83:MET:HE3	14	0.14
(3,1051)	1:A:87:MET:HE1	1:A:133:MET:HA	3	0.14
(3,1051)	1:A:87:MET:HE2	1:A:133:MET:HA	3	0.14
(3,1051)	1:A:87:MET:HE3	1:A:133:MET:HA	3	0.14
(3,1032)	1:A:29:MET:HE1	1:A:124:LEU:HB2	21	0.14
(3,1032)	1:A:29:MET:HE2	1:A:124:LEU:HB2	21	0.14
(3,1032)	1:A:29:MET:HE3	1:A:124:LEU:HB2	21	0.14
(3,1031)	1:A:25:ALA:HB1	1:A:128:LYS:HE2	10	0.14
(3,1031)	1:A:25:ALA:HB1	1:A:128:LYS:HE3	10	0.14
(3,1031)	1:A:25:ALA:HB2	1:A:128:LYS:HE2	10	0.14
(3,1031)	1:A:25:ALA:HB2	1:A:128:LYS:HE3	10	0.14
(3,1031)	1:A:25:ALA:HB3	1:A:128:LYS:HE2	10	0.14
(3,1031)	1:A:25:ALA:HB3	1:A:128:LYS:HE3	10	0.14
(3,1020)	1:A:20:ILE:HG21	1:A:24:LYS:H	11	0.14
(3,1020)	1:A:20:ILE:HG22	1:A:24:LYS:H	11	0.14
(3,1020)	1:A:20:ILE:HG23	1:A:24:LYS:H	11	0.14
(3,1013)	1:A:38:ILE:HG21	1:A:43:LEU:HB3	22	0.14
(3,1013)	1:A:38:ILE:HG22	1:A:43:LEU:HB3	22	0.14
(3,1013)	1:A:38:ILE:HG23	1:A:43:LEU:HB3	22	0.14
(3,1004)	1:A:117:ALA:HA	1:A:120:MET:HE1	8	0.14
(3,1004)	1:A:117:ALA:HA	1:A:120:MET:HE2	8	0.14
(3,1004)	1:A:117:ALA:HA	1:A:120:MET:HE3	8	0.14
(3,1004)	1:A:117:ALA:HA	1:A:120:MET:HE1	9	0.14
(3,1004)	1:A:117:ALA:HA	1:A:120:MET:HE2	9	0.14
(3,1004)	1:A:117:ALA:HA	1:A:120:MET:HE3	9	0.14
(4,13)	1:A:38:ILE:HB	1:A:73:THR:HB	24	0.13
(3,998)	1:A:120:MET:HE1	1:A:124:LEU:H	13	0.13
(3,998)	1:A:120:MET:HE2	1:A:124:LEU:H	13	0.13
(3,998)	1:A:120:MET:HE3	1:A:124:LEU:H	13	0.13
(3,975)	1:A:11:ALA:HB1	1:A:81:VAL:HB	7	0.13
(3,975)	1:A:11:ALA:HB2	1:A:81:VAL:HB	7	0.13
(3,975)	1:A:11:ALA:HB3	1:A:81:VAL:HB	7	0.13
(3,954)	1:A:122:LYS:H	1:A:133:MET:HE1	6	0.13
(3,954)	1:A:122:LYS:H	1:A:133:MET:HE2	6	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,954)	1:A:122:LYS:H	1:A:133:MET:HE3	6	0.13
(3,952)	1:A:118:ASP:H	1:A:133:MET:HE1	20	0.13
(3,952)	1:A:118:ASP:H	1:A:133:MET:HE2	20	0.13
(3,952)	1:A:118:ASP:H	1:A:133:MET:HE3	20	0.13
(3,922)	1:A:19:MET:HE1	1:A:135:LEU:HA	3	0.13
(3,922)	1:A:19:MET:HE2	1:A:135:LEU:HA	3	0.13
(3,922)	1:A:19:MET:HE3	1:A:135:LEU:HA	3	0.13
(3,885)	1:A:142:VAL:HG11	1:A:143:LYS:HG2	10	0.13
(3,885)	1:A:142:VAL:HG11	1:A:143:LYS:HG3	10	0.13
(3,885)	1:A:142:VAL:HG12	1:A:143:LYS:HG2	10	0.13
(3,885)	1:A:142:VAL:HG12	1:A:143:LYS:HG3	10	0.13
(3,885)	1:A:142:VAL:HG13	1:A:143:LYS:HG2	10	0.13
(3,885)	1:A:142:VAL:HG13	1:A:143:LYS:HG3	10	0.13
(3,880)	1:A:45:THR:HG21	1:A:49:MET:HB3	19	0.13
(3,880)	1:A:45:THR:HG22	1:A:49:MET:HB3	19	0.13
(3,880)	1:A:45:THR:HG23	1:A:49:MET:HB3	19	0.13
(3,873)	1:A:53:THR:HG21	1:A:54:PRO:HD2	14	0.13
(3,873)	1:A:53:THR:HG22	1:A:54:PRO:HD2	14	0.13
(3,873)	1:A:53:THR:HG23	1:A:54:PRO:HD2	14	0.13
(3,864)	1:A:52:GLN:HA	1:A:53:THR:HG21	12	0.13
(3,864)	1:A:52:GLN:HA	1:A:53:THR:HG22	12	0.13
(3,864)	1:A:52:GLN:HA	1:A:53:THR:HG23	12	0.13
(3,854)	1:A:4:MET:HB2	1:A:5:THR:HG21	10	0.13
(3,854)	1:A:4:MET:HB2	1:A:5:THR:HG22	10	0.13
(3,854)	1:A:4:MET:HB2	1:A:5:THR:HG23	10	0.13
(3,854)	1:A:4:MET:HB3	1:A:5:THR:HG21	10	0.13
(3,854)	1:A:4:MET:HB3	1:A:5:THR:HG22	10	0.13
(3,854)	1:A:4:MET:HB3	1:A:5:THR:HG23	10	0.13
(3,825)	1:A:39:SER:H	1:A:73:THR:HG21	1	0.13
(3,825)	1:A:39:SER:H	1:A:73:THR:HG22	1	0.13
(3,825)	1:A:39:SER:H	1:A:73:THR:HG23	1	0.13
(3,825)	1:A:39:SER:H	1:A:73:THR:HG21	19	0.13
(3,825)	1:A:39:SER:H	1:A:73:THR:HG22	19	0.13
(3,825)	1:A:39:SER:H	1:A:73:THR:HG23	19	0.13
(3,82)	1:A:24:LYS:H	1:A:24:LYS:HB3	16	0.13
(3,82)	1:A:24:LYS:H	1:A:24:LYS:HB3	21	0.13
(3,82)	1:A:24:LYS:H	1:A:24:LYS:HB3	22	0.13
(3,817)	1:A:83:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD21	2	0.13
(3,817)	1:A:83:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD22	2	0.13
(3,817)	1:A:83:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD23	2	0.13
(3,817)	1:A:83:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD21	2	0.13
(3,817)	1:A:83:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD22	2	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,817)	1:A:83:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD23	2	0.13
(3,817)	1:A:83:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD21	2	0.13
(3,817)	1:A:83:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD22	2	0.13
(3,817)	1:A:83:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD23	2	0.13
(3,805)	1:A:49:MET:H	1:A:50:LEU:HD11	6	0.13
(3,805)	1:A:49:MET:H	1:A:50:LEU:HD12	6	0.13
(3,805)	1:A:49:MET:H	1:A:50:LEU:HD13	6	0.13
(3,751)	1:A:41:LYS:HG2	1:A:42:GLU:H	23	0.13
(3,750)	1:A:97:LYS:HG2	1:A:98:LEU:H	1	0.13
(3,707)	1:A:83:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD11	19	0.13
(3,707)	1:A:83:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD12	19	0.13
(3,707)	1:A:83:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD13	19	0.13
(3,707)	1:A:83:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD11	19	0.13
(3,707)	1:A:83:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD12	19	0.13
(3,707)	1:A:83:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD13	19	0.13
(3,707)	1:A:83:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD11	19	0.13
(3,707)	1:A:83:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD12	19	0.13
(3,707)	1:A:83:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD13	19	0.13
(3,704)	1:A:50:LEU:H	1:A:50:LEU:HG	19	0.13
(3,676)	1:A:24:LYS:HA	1:A:24:LYS:HD2	4	0.13
(3,675)	1:A:24:LYS:HA	1:A:24:LYS:HD3	9	0.13
(3,672)	1:A:140:LYS:HA	1:A:140:LYS:HG2	24	0.13
(3,672)	1:A:140:LYS:HA	1:A:140:LYS:HG3	24	0.13
(3,661)	1:A:107:ARG:H	1:A:107:ARG:HG2	24	0.13
(3,661)	1:A:107:ARG:H	1:A:107:ARG:HG3	24	0.13
(3,614)	1:A:7:GLN:HE22	1:A:10:GLU:HB2	17	0.13
(3,614)	1:A:7:GLN:HE22	1:A:10:GLU:HB3	17	0.13
(3,544)	1:A:15:LEU:H	1:A:15:LEU:HG	13	0.13
(3,460)	1:A:27:PHE:HA	1:A:31:ASP:H	24	0.13
(3,409)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:HIS:HB3	10	0.13
(3,365)	1:A:84:VAL:HB	1:A:88:LYS:H	8	0.13
(3,358)	1:A:16:SER:HA	1:A:18:GLU:H	1	0.13
(3,328)	1:A:81:VAL:H	1:A:83:MET:HG2	9	0.13
(3,328)	1:A:81:VAL:H	1:A:83:MET:HG3	9	0.13
(3,303)	1:A:80:LEU:HA	1:A:84:VAL:H	7	0.13
(3,28)	1:A:35:GLY:H	1:A:36:GLY:HA2	5	0.13
(3,254)	1:A:139:LEU:HD21	1:A:140:LYS:H	8	0.13
(3,254)	1:A:139:LEU:HD22	1:A:140:LYS:H	8	0.13
(3,254)	1:A:139:LEU:HD23	1:A:140:LYS:H	8	0.13
(3,243)	1:A:120:MET:HE1	1:A:122:LYS:H	15	0.13
(3,243)	1:A:120:MET:HE2	1:A:122:LYS:H	15	0.13
(3,243)	1:A:120:MET:HE3	1:A:122:LYS:H	15	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,243)	1:A:120:MET:HE1	1:A:122:LYS:H	19	0.13
(3,243)	1:A:120:MET:HE2	1:A:122:LYS:H	19	0.13
(3,243)	1:A:120:MET:HE3	1:A:122:LYS:H	19	0.13
(3,2105)	1:A:116:SER:HB2	1:A:117:ALA:HB1	14	0.13
(3,2105)	1:A:116:SER:HB2	1:A:117:ALA:HB2	14	0.13
(3,2105)	1:A:116:SER:HB2	1:A:117:ALA:HB3	14	0.13
(3,2105)	1:A:116:SER:HB3	1:A:117:ALA:HB1	14	0.13
(3,2105)	1:A:116:SER:HB3	1:A:117:ALA:HB2	14	0.13
(3,2105)	1:A:116:SER:HB3	1:A:117:ALA:HB3	14	0.13
(3,2087)	1:A:113:VAL:HA	1:A:114:ARG:HG2	4	0.13
(3,2087)	1:A:113:VAL:HA	1:A:114:ARG:HG3	4	0.13
(3,2068)	1:A:102:ARG:HD2	1:A:107:ARG:HB2	10	0.13
(3,2068)	1:A:102:ARG:HD2	1:A:107:ARG:HB3	10	0.13
(3,2068)	1:A:102:ARG:HD3	1:A:107:ARG:HB2	10	0.13
(3,2068)	1:A:102:ARG:HD3	1:A:107:ARG:HB3	10	0.13
(3,2068)	1:A:102:ARG:HD2	1:A:107:ARG:HB2	20	0.13
(3,2068)	1:A:102:ARG:HD2	1:A:107:ARG:HB3	20	0.13
(3,2068)	1:A:102:ARG:HD3	1:A:107:ARG:HB2	20	0.13
(3,2068)	1:A:102:ARG:HD3	1:A:107:ARG:HB3	20	0.13
(3,2058)	1:A:100:ASP:HB2	1:A:101:LEU:H	25	0.13
(3,2058)	1:A:100:ASP:HB3	1:A:101:LEU:H	25	0.13
(3,2039)	1:A:91:ALA:H	1:A:92:GLY:HA2	24	0.13
(3,2039)	1:A:91:ALA:H	1:A:92:GLY:HA3	24	0.13
(3,2032)	1:A:88:LYS:HE2	1:A:135:LEU:HD11	13	0.13
(3,2032)	1:A:88:LYS:HE2	1:A:135:LEU:HD12	13	0.13
(3,2032)	1:A:88:LYS:HE2	1:A:135:LEU:HD13	13	0.13
(3,2032)	1:A:88:LYS:HE2	1:A:135:LEU:HD21	13	0.13
(3,2032)	1:A:88:LYS:HE2	1:A:135:LEU:HD22	13	0.13
(3,2032)	1:A:88:LYS:HE2	1:A:135:LEU:HD23	13	0.13
(3,2032)	1:A:88:LYS:HE3	1:A:135:LEU:HD11	13	0.13
(3,2032)	1:A:88:LYS:HE3	1:A:135:LEU:HD12	13	0.13
(3,2032)	1:A:88:LYS:HE3	1:A:135:LEU:HD13	13	0.13
(3,2032)	1:A:88:LYS:HE3	1:A:135:LEU:HD21	13	0.13
(3,2032)	1:A:88:LYS:HE3	1:A:135:LEU:HD22	13	0.13
(3,2032)	1:A:88:LYS:HE3	1:A:135:LEU:HD23	13	0.13
(3,2025)	1:A:88:LYS:HB2	1:A:88:LYS:HE2	19	0.13
(3,2025)	1:A:88:LYS:HB2	1:A:88:LYS:HE3	19	0.13
(3,2025)	1:A:88:LYS:HB3	1:A:88:LYS:HE2	19	0.13
(3,2025)	1:A:88:LYS:HB3	1:A:88:LYS:HE3	19	0.13
(3,2014)	1:A:87:MET:HB2	1:A:135:LEU:HD11	2	0.13
(3,2014)	1:A:87:MET:HB2	1:A:135:LEU:HD12	2	0.13
(3,2014)	1:A:87:MET:HB2	1:A:135:LEU:HD13	2	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,2014)	1:A:87:MET:HB2	1:A:135:LEU:HD21	2	0.13
(3,2014)	1:A:87:MET:HB2	1:A:135:LEU:HD22	2	0.13
(3,2014)	1:A:87:MET:HB2	1:A:135:LEU:HD23	2	0.13
(3,2014)	1:A:87:MET:HB3	1:A:135:LEU:HD11	2	0.13
(3,2014)	1:A:87:MET:HB3	1:A:135:LEU:HD12	2	0.13
(3,2014)	1:A:87:MET:HB3	1:A:135:LEU:HD13	2	0.13
(3,2014)	1:A:87:MET:HB3	1:A:135:LEU:HD21	2	0.13
(3,2014)	1:A:87:MET:HB3	1:A:135:LEU:HD22	2	0.13
(3,2014)	1:A:87:MET:HB3	1:A:135:LEU:HD23	2	0.13
(3,1991)	1:A:84:VAL:HG11	1:A:135:LEU:HB2	1	0.13
(3,1991)	1:A:84:VAL:HG11	1:A:135:LEU:HB3	1	0.13
(3,1991)	1:A:84:VAL:HG12	1:A:135:LEU:HB2	1	0.13
(3,1991)	1:A:84:VAL:HG12	1:A:135:LEU:HB3	1	0.13
(3,1991)	1:A:84:VAL:HG13	1:A:135:LEU:HB2	1	0.13
(3,1991)	1:A:84:VAL:HG13	1:A:135:LEU:HB3	1	0.13
(3,1991)	1:A:84:VAL:HG21	1:A:135:LEU:HB2	1	0.13
(3,1991)	1:A:84:VAL:HG21	1:A:135:LEU:HB3	1	0.13
(3,1991)	1:A:84:VAL:HG22	1:A:135:LEU:HB2	1	0.13
(3,1991)	1:A:84:VAL:HG22	1:A:135:LEU:HB3	1	0.13
(3,1991)	1:A:84:VAL:HG23	1:A:135:LEU:HB2	1	0.13
(3,1991)	1:A:84:VAL:HG23	1:A:135:LEU:HB3	1	0.13
(3,1983)	1:A:84:VAL:HG11	1:A:86:GLN:H	16	0.13
(3,1983)	1:A:84:VAL:HG12	1:A:86:GLN:H	16	0.13
(3,1983)	1:A:84:VAL:HG13	1:A:86:GLN:H	16	0.13
(3,1983)	1:A:84:VAL:HG21	1:A:86:GLN:H	16	0.13
(3,1983)	1:A:84:VAL:HG22	1:A:86:GLN:H	16	0.13
(3,1983)	1:A:84:VAL:HG23	1:A:86:GLN:H	16	0.13
(3,1976)	1:A:84:VAL:HA	1:A:135:LEU:HD11	14	0.13
(3,1976)	1:A:84:VAL:HA	1:A:135:LEU:HD12	14	0.13
(3,1976)	1:A:84:VAL:HA	1:A:135:LEU:HD13	14	0.13
(3,1976)	1:A:84:VAL:HA	1:A:135:LEU:HD21	14	0.13
(3,1976)	1:A:84:VAL:HA	1:A:135:LEU:HD22	14	0.13
(3,1976)	1:A:84:VAL:HA	1:A:135:LEU:HD23	14	0.13
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG11	1:A:85:ARG:HD2	9	0.13
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG11	1:A:85:ARG:HD3	9	0.13
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG12	1:A:85:ARG:HD2	9	0.13
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG12	1:A:85:ARG:HD3	9	0.13
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG13	1:A:85:ARG:HD2	9	0.13
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG13	1:A:85:ARG:HD3	9	0.13
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG21	1:A:85:ARG:HD2	9	0.13
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG21	1:A:85:ARG:HD3	9	0.13
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG22	1:A:85:ARG:HD2	9	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG22	1:A:85:ARG:HD3	9	0.13
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG23	1:A:85:ARG:HD2	9	0.13
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG23	1:A:85:ARG:HD3	9	0.13
(3,1910)	1:A:61:ALA:HA	1:A:64:GLU:HG2	17	0.13
(3,1910)	1:A:61:ALA:HA	1:A:64:GLU:HG3	17	0.13
(3,1855)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD11	13	0.13
(3,1855)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD12	13	0.13
(3,1855)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD13	13	0.13
(3,1855)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD21	13	0.13
(3,1855)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD22	13	0.13
(3,1855)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD23	13	0.13
(3,1855)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD11	13	0.13
(3,1855)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD12	13	0.13
(3,1855)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD13	13	0.13
(3,1855)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD21	13	0.13
(3,1855)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD22	13	0.13
(3,1855)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD23	13	0.13
(3,1855)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD11	13	0.13
(3,1855)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD12	13	0.13
(3,1855)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD13	13	0.13
(3,1855)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD21	13	0.13
(3,1855)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD22	13	0.13
(3,1855)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD23	13	0.13
(3,179)	1:A:139:LEU:H	1:A:140:LYS:H	16	0.13
(3,1749)	1:A:32:ALA:H	1:A:42:GLU:HG2	9	0.13
(3,1749)	1:A:32:ALA:H	1:A:42:GLU:HG3	9	0.13
(3,1745)	1:A:30:PHE:HB2	1:A:46:VAL:H	19	0.13
(3,1745)	1:A:30:PHE:HB3	1:A:46:VAL:H	19	0.13
(3,1732)	1:A:29:MET:HG2	1:A:83:MET:HE1	9	0.13
(3,1732)	1:A:29:MET:HG2	1:A:83:MET:HE2	9	0.13
(3,1732)	1:A:29:MET:HG2	1:A:83:MET:HE3	9	0.13
(3,1732)	1:A:29:MET:HG3	1:A:83:MET:HE1	9	0.13
(3,1732)	1:A:29:MET:HG3	1:A:83:MET:HE2	9	0.13
(3,1732)	1:A:29:MET:HG3	1:A:83:MET:HE3	9	0.13
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB2	1:A:83:MET:HE1	3	0.13
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB2	1:A:83:MET:HE2	3	0.13
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB2	1:A:83:MET:HE3	3	0.13
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB3	1:A:83:MET:HE1	3	0.13
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB3	1:A:83:MET:HE2	3	0.13
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB3	1:A:83:MET:HE3	3	0.13
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB2	1:A:83:MET:HE1	10	0.13
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB2	1:A:83:MET:HE2	10	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB2	1:A:83:MET:HE3	10	0.13
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB3	1:A:83:MET:HE1	10	0.13
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB3	1:A:83:MET:HE2	10	0.13
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB3	1:A:83:MET:HE3	10	0.13
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB2	1:A:83:MET:HE1	22	0.13
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB2	1:A:83:MET:HE2	22	0.13
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB2	1:A:83:MET:HE3	22	0.13
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB3	1:A:83:MET:HE1	22	0.13
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB3	1:A:83:MET:HE2	22	0.13
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB3	1:A:83:MET:HE3	22	0.13
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB2	1:A:83:MET:HE1	23	0.13
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB2	1:A:83:MET:HE2	23	0.13
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB2	1:A:83:MET:HE3	23	0.13
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB3	1:A:83:MET:HE1	23	0.13
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB3	1:A:83:MET:HE2	23	0.13
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB3	1:A:83:MET:HE3	23	0.13
(3,1691)	1:A:22:GLU:HG2	1:A:25:ALA:HB1	4	0.13
(3,1691)	1:A:22:GLU:HG2	1:A:25:ALA:HB2	4	0.13
(3,1691)	1:A:22:GLU:HG2	1:A:25:ALA:HB3	4	0.13
(3,1691)	1:A:22:GLU:HG3	1:A:25:ALA:HB1	4	0.13
(3,1691)	1:A:22:GLU:HG3	1:A:25:ALA:HB2	4	0.13
(3,1691)	1:A:22:GLU:HG3	1:A:25:ALA:HB3	4	0.13
(3,167)	1:A:64:GLU:H	1:A:67:ASP:H	3	0.13
(3,167)	1:A:64:GLU:H	1:A:67:ASP:H	5	0.13
(3,167)	1:A:64:GLU:H	1:A:67:ASP:H	16	0.13
(3,163)	1:A:5:THR:HB	1:A:6:ASP:H	4	0.13
(3,1614)	1:A:14:TYR:HB2	1:A:87:MET:HE1	2	0.13
(3,1614)	1:A:14:TYR:HB2	1:A:87:MET:HE2	2	0.13
(3,1614)	1:A:14:TYR:HB2	1:A:87:MET:HE3	2	0.13
(3,1614)	1:A:14:TYR:HB3	1:A:87:MET:HE1	2	0.13
(3,1614)	1:A:14:TYR:HB3	1:A:87:MET:HE2	2	0.13
(3,1614)	1:A:14:TYR:HB3	1:A:87:MET:HE3	2	0.13
(3,1614)	1:A:14:TYR:HB2	1:A:87:MET:HE1	9	0.13
(3,1614)	1:A:14:TYR:HB2	1:A:87:MET:HE2	9	0.13
(3,1614)	1:A:14:TYR:HB2	1:A:87:MET:HE3	9	0.13
(3,1614)	1:A:14:TYR:HB3	1:A:87:MET:HE1	9	0.13
(3,1614)	1:A:14:TYR:HB3	1:A:87:MET:HE2	9	0.13
(3,1614)	1:A:14:TYR:HB3	1:A:87:MET:HE3	9	0.13
(3,1608)	1:A:14:TYR:H	1:A:80:LEU:HD11	18	0.13
(3,1608)	1:A:14:TYR:H	1:A:80:LEU:HD12	18	0.13
(3,1608)	1:A:14:TYR:H	1:A:80:LEU:HD13	18	0.13
(3,1608)	1:A:14:TYR:H	1:A:80:LEU:HD21	18	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,1608)	1:A:14:TYR:H	1:A:80:LEU:HD22	18	0.13
(3,1608)	1:A:14:TYR:H	1:A:80:LEU:HD23	18	0.13
(3,1607)	1:A:14:TYR:H	1:A:15:LEU:HD11	10	0.13
(3,1607)	1:A:14:TYR:H	1:A:15:LEU:HD12	10	0.13
(3,1607)	1:A:14:TYR:H	1:A:15:LEU:HD13	10	0.13
(3,1607)	1:A:14:TYR:H	1:A:15:LEU:HD21	10	0.13
(3,1607)	1:A:14:TYR:H	1:A:15:LEU:HD22	10	0.13
(3,1607)	1:A:14:TYR:H	1:A:15:LEU:HD23	10	0.13
(3,1603)	1:A:12:ARG:HD2	1:A:80:LEU:HD11	8	0.13
(3,1603)	1:A:12:ARG:HD2	1:A:80:LEU:HD12	8	0.13
(3,1603)	1:A:12:ARG:HD2	1:A:80:LEU:HD13	8	0.13
(3,1603)	1:A:12:ARG:HD2	1:A:80:LEU:HD21	8	0.13
(3,1603)	1:A:12:ARG:HD2	1:A:80:LEU:HD22	8	0.13
(3,1603)	1:A:12:ARG:HD2	1:A:80:LEU:HD23	8	0.13
(3,1603)	1:A:12:ARG:HD3	1:A:80:LEU:HD11	8	0.13
(3,1603)	1:A:12:ARG:HD3	1:A:80:LEU:HD12	8	0.13
(3,1603)	1:A:12:ARG:HD3	1:A:80:LEU:HD13	8	0.13
(3,1603)	1:A:12:ARG:HD3	1:A:80:LEU:HD21	8	0.13
(3,1603)	1:A:12:ARG:HD3	1:A:80:LEU:HD22	8	0.13
(3,1603)	1:A:12:ARG:HD3	1:A:80:LEU:HD23	8	0.13
(3,1580)	1:A:8:GLN:HB2	1:A:81:VAL:HG11	20	0.13
(3,1580)	1:A:8:GLN:HB2	1:A:81:VAL:HG12	20	0.13
(3,1580)	1:A:8:GLN:HB2	1:A:81:VAL:HG13	20	0.13
(3,1580)	1:A:8:GLN:HB2	1:A:81:VAL:HG21	20	0.13
(3,1580)	1:A:8:GLN:HB2	1:A:81:VAL:HG22	20	0.13
(3,1580)	1:A:8:GLN:HB2	1:A:81:VAL:HG23	20	0.13
(3,1580)	1:A:8:GLN:HB3	1:A:81:VAL:HG11	20	0.13
(3,1580)	1:A:8:GLN:HB3	1:A:81:VAL:HG12	20	0.13
(3,1580)	1:A:8:GLN:HB3	1:A:81:VAL:HG13	20	0.13
(3,1580)	1:A:8:GLN:HB3	1:A:81:VAL:HG21	20	0.13
(3,1580)	1:A:8:GLN:HB3	1:A:81:VAL:HG22	20	0.13
(3,1580)	1:A:8:GLN:HB3	1:A:81:VAL:HG23	20	0.13
(3,1560)	1:A:115:MET:HE1	1:A:119:ALA:HB1	5	0.13
(3,1560)	1:A:115:MET:HE1	1:A:119:ALA:HB2	5	0.13
(3,1560)	1:A:115:MET:HE1	1:A:119:ALA:HB3	5	0.13
(3,1560)	1:A:115:MET:HE2	1:A:119:ALA:HB1	5	0.13
(3,1560)	1:A:115:MET:HE2	1:A:119:ALA:HB2	5	0.13
(3,1560)	1:A:115:MET:HE2	1:A:119:ALA:HB3	5	0.13
(3,1560)	1:A:115:MET:HE3	1:A:119:ALA:HB1	5	0.13
(3,1560)	1:A:115:MET:HE3	1:A:119:ALA:HB2	5	0.13
(3,1560)	1:A:115:MET:HE3	1:A:119:ALA:HB3	5	0.13
(3,1521)	1:A:18:GLU:HB3	1:A:19:MET:H	16	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,1504)	1:A:42:GLU:HA	1:A:42:GLU:HG2	20	0.13
(3,1498)	1:A:64:GLU:HA	1:A:66:VAL:HG21	12	0.13
(3,1498)	1:A:64:GLU:HA	1:A:66:VAL:HG22	12	0.13
(3,1498)	1:A:64:GLU:HA	1:A:66:VAL:HG23	12	0.13
(3,1498)	1:A:64:GLU:HA	1:A:66:VAL:HG21	18	0.13
(3,1498)	1:A:64:GLU:HA	1:A:66:VAL:HG22	18	0.13
(3,1498)	1:A:64:GLU:HA	1:A:66:VAL:HG23	18	0.13
(3,1470)	1:A:85:ARG:HA	1:A:88:LYS:HD2	15	0.13
(3,1470)	1:A:85:ARG:HA	1:A:88:LYS:HD3	15	0.13
(3,1448)	1:A:52:GLN:HB3	1:A:53:THR:H	18	0.13
(3,1445)	1:A:56:LYS:HA	1:A:59:LEU:HD21	17	0.13
(3,1445)	1:A:56:LYS:HA	1:A:59:LEU:HD22	17	0.13
(3,1445)	1:A:56:LYS:HA	1:A:59:LEU:HD23	17	0.13
(3,1425)	1:A:108:PRO:HB2	1:A:109:PRO:HD3	5	0.13
(3,1419)	1:A:22:GLU:HA	1:A:125:LEU:HD11	9	0.13
(3,1419)	1:A:22:GLU:HA	1:A:125:LEU:HD12	9	0.13
(3,1419)	1:A:22:GLU:HA	1:A:125:LEU:HD13	9	0.13
(3,1406)	1:A:115:MET:HG2	1:A:120:MET:H	15	0.13
(3,1406)	1:A:115:MET:HG2	1:A:120:MET:H	21	0.13
(3,1404)	1:A:115:MET:HG2	1:A:116:SER:H	23	0.13
(3,1395)	1:A:11:ALA:HB1	1:A:84:VAL:HB	22	0.13
(3,1395)	1:A:11:ALA:HB2	1:A:84:VAL:HB	22	0.13
(3,1395)	1:A:11:ALA:HB3	1:A:84:VAL:HB	22	0.13
(3,1366)	1:A:142:VAL:HB	1:A:143:LYS:HG2	11	0.13
(3,1366)	1:A:142:VAL:HB	1:A:143:LYS:HG3	11	0.13
(3,1359)	1:A:130:LYS:H	1:A:131:VAL:HA	9	0.13
(3,1326)	1:A:116:SER:HB2	1:A:119:ALA:H	14	0.13
(3,1318)	1:A:7:GLN:HG3	1:A:10:GLU:HB2	6	0.13
(3,1318)	1:A:7:GLN:HG3	1:A:10:GLU:HB3	6	0.13
(3,1318)	1:A:7:GLN:HG3	1:A:10:GLU:HB2	13	0.13
(3,1318)	1:A:7:GLN:HG3	1:A:10:GLU:HB3	13	0.13
(3,1300)	1:A:10:GLU:HA	1:A:10:GLU:HG3	13	0.13
(3,1299)	1:A:64:GLU:HG3	1:A:65:GLU:H	7	0.13
(3,1298)	1:A:64:GLU:HG2	1:A:65:GLU:H	8	0.13
(3,1298)	1:A:64:GLU:HG2	1:A:65:GLU:H	12	0.13
(3,1246)	1:A:137:ALA:HB1	1:A:138:ASN:HB3	17	0.13
(3,1246)	1:A:137:ALA:HB2	1:A:138:ASN:HB3	17	0.13
(3,1246)	1:A:137:ALA:HB3	1:A:138:ASN:HB3	17	0.13
(3,1245)	1:A:68:GLU:HA	1:A:68:GLU:HG3	12	0.13
(3,1245)	1:A:68:GLU:HA	1:A:68:GLU:HG3	16	0.13
(3,1216)	1:A:11:ALA:HB1	1:A:80:LEU:HB2	16	0.13
(3,1216)	1:A:11:ALA:HB2	1:A:80:LEU:HB2	16	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,1216)	1:A:11:ALA:HB3	1:A:80:LEU:HB2	16	0.13
(3,1206)	1:A:59:LEU:HB2	1:A:63:ILE:HD11	4	0.13
(3,1206)	1:A:59:LEU:HB2	1:A:63:ILE:HD12	4	0.13
(3,1206)	1:A:59:LEU:HB2	1:A:63:ILE:HD13	4	0.13
(3,1196)	1:A:134:ASP:H	1:A:134:ASP:HB2	2	0.13
(3,1181)	1:A:56:LYS:HD3	1:A:59:LEU:HB2	9	0.13
(3,1181)	1:A:56:LYS:HD3	1:A:59:LEU:HB2	14	0.13
(3,1180)	1:A:128:LYS:HA	1:A:128:LYS:HE2	8	0.13
(3,1180)	1:A:128:LYS:HA	1:A:128:LYS:HE3	8	0.13
(3,1170)	1:A:12:ARG:HG2	1:A:20:ILE:HD11	23	0.13
(3,1170)	1:A:12:ARG:HG2	1:A:20:ILE:HD12	23	0.13
(3,1170)	1:A:12:ARG:HG2	1:A:20:ILE:HD13	23	0.13
(3,1170)	1:A:12:ARG:HG3	1:A:20:ILE:HD11	23	0.13
(3,1170)	1:A:12:ARG:HG3	1:A:20:ILE:HD12	23	0.13
(3,1170)	1:A:12:ARG:HG3	1:A:20:ILE:HD13	23	0.13
(3,1154)	1:A:111:ARG:HA	1:A:111:ARG:HD2	10	0.13
(3,1154)	1:A:111:ARG:HA	1:A:111:ARG:HD3	10	0.13
(3,1147)	1:A:38:ILE:H	1:A:74:ILE:HD11	4	0.13
(3,1147)	1:A:38:ILE:H	1:A:74:ILE:HD12	4	0.13
(3,1147)	1:A:38:ILE:H	1:A:74:ILE:HD13	4	0.13
(3,1147)	1:A:38:ILE:H	1:A:74:ILE:HD11	5	0.13
(3,1147)	1:A:38:ILE:H	1:A:74:ILE:HD12	5	0.13
(3,1147)	1:A:38:ILE:H	1:A:74:ILE:HD13	5	0.13
(3,112)	1:A:111:ARG:HA	1:A:112:ARG:H	22	0.13
(3,1101)	1:A:38:ILE:HD11	1:A:82:MET:HE1	20	0.13
(3,1101)	1:A:38:ILE:HD11	1:A:82:MET:HE2	20	0.13
(3,1101)	1:A:38:ILE:HD11	1:A:82:MET:HE3	20	0.13
(3,1101)	1:A:38:ILE:HD12	1:A:82:MET:HE1	20	0.13
(3,1101)	1:A:38:ILE:HD12	1:A:82:MET:HE2	20	0.13
(3,1101)	1:A:38:ILE:HD12	1:A:82:MET:HE3	20	0.13
(3,1101)	1:A:38:ILE:HD13	1:A:82:MET:HE1	20	0.13
(3,1101)	1:A:38:ILE:HD13	1:A:82:MET:HE2	20	0.13
(3,1101)	1:A:38:ILE:HD13	1:A:82:MET:HE3	20	0.13
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB1	1:A:82:MET:HE1	12	0.13
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB1	1:A:82:MET:HE2	12	0.13
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB1	1:A:82:MET:HE3	12	0.13
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB2	1:A:82:MET:HE1	12	0.13
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB2	1:A:82:MET:HE2	12	0.13
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB2	1:A:82:MET:HE3	12	0.13
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB3	1:A:82:MET:HE1	12	0.13
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB3	1:A:82:MET:HE2	12	0.13
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB3	1:A:82:MET:HE3	12	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,1053)	1:A:87:MET:HE1	1:A:134:ASP:HA	5	0.13
(3,1053)	1:A:87:MET:HE2	1:A:134:ASP:HA	5	0.13
(3,1053)	1:A:87:MET:HE3	1:A:134:ASP:HA	5	0.13
(3,1031)	1:A:25:ALA:HB1	1:A:128:LYS:HE2	17	0.13
(3,1031)	1:A:25:ALA:HB1	1:A:128:LYS:HE3	17	0.13
(3,1031)	1:A:25:ALA:HB2	1:A:128:LYS:HE2	17	0.13
(3,1031)	1:A:25:ALA:HB2	1:A:128:LYS:HE3	17	0.13
(3,1031)	1:A:25:ALA:HB3	1:A:128:LYS:HE2	17	0.13
(3,1031)	1:A:25:ALA:HB3	1:A:128:LYS:HE3	17	0.13
(3,1008)	1:A:83:MET:HG2	1:A:120:MET:HE1	20	0.13
(3,1008)	1:A:83:MET:HG2	1:A:120:MET:HE2	20	0.13
(3,1008)	1:A:83:MET:HG2	1:A:120:MET:HE3	20	0.13
(3,1008)	1:A:83:MET:HG3	1:A:120:MET:HE1	20	0.13
(3,1008)	1:A:83:MET:HG3	1:A:120:MET:HE2	20	0.13
(3,1008)	1:A:83:MET:HG3	1:A:120:MET:HE3	20	0.13
(3,1005)	1:A:120:MET:HA	1:A:120:MET:HE1	25	0.13
(3,1005)	1:A:120:MET:HA	1:A:120:MET:HE2	25	0.13
(3,1005)	1:A:120:MET:HA	1:A:120:MET:HE3	25	0.13
(3,1004)	1:A:117:ALA:HA	1:A:120:MET:HE1	16	0.13
(3,1004)	1:A:117:ALA:HA	1:A:120:MET:HE2	16	0.13
(3,1004)	1:A:117:ALA:HA	1:A:120:MET:HE3	16	0.13
(3,10)	1:A:52:GLN:HB2	1:A:53:THR:H	17	0.13
(1,2)	1:A:69:ASP:OD1	2:A:201:CA:CA	5	0.13
(1,2)	1:A:69:ASP:OD2	2:A:201:CA:CA	5	0.13
(4,13)	1:A:38:ILE:HB	1:A:73:THR:HB	2	0.12
(3,986)	1:A:121:LEU:HD21	1:A:133:MET:HE1	10	0.12
(3,986)	1:A:121:LEU:HD21	1:A:133:MET:HE2	10	0.12
(3,986)	1:A:121:LEU:HD21	1:A:133:MET:HE3	10	0.12
(3,986)	1:A:121:LEU:HD22	1:A:133:MET:HE1	10	0.12
(3,986)	1:A:121:LEU:HD22	1:A:133:MET:HE2	10	0.12
(3,986)	1:A:121:LEU:HD22	1:A:133:MET:HE3	10	0.12
(3,986)	1:A:121:LEU:HD23	1:A:133:MET:HE1	10	0.12
(3,986)	1:A:121:LEU:HD23	1:A:133:MET:HE2	10	0.12
(3,986)	1:A:121:LEU:HD23	1:A:133:MET:HE3	10	0.12
(3,962)	1:A:86:GLN:H	1:A:117:ALA:HB1	20	0.12
(3,962)	1:A:86:GLN:H	1:A:117:ALA:HB2	20	0.12
(3,962)	1:A:86:GLN:H	1:A:117:ALA:HB3	20	0.12
(3,922)	1:A:19:MET:HE1	1:A:135:LEU:HA	18	0.12
(3,922)	1:A:19:MET:HE2	1:A:135:LEU:HA	18	0.12
(3,922)	1:A:19:MET:HE3	1:A:135:LEU:HA	18	0.12
(3,902)	1:A:136:ARG:H	1:A:137:ALA:HB1	11	0.12
(3,902)	1:A:136:ARG:H	1:A:137:ALA:HB2	11	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,902)	1:A:136:ARG:H	1:A:137:ALA:HB3	11	0.12
(3,880)	1:A:45:THR:HG21	1:A:49:MET:HB3	2	0.12
(3,880)	1:A:45:THR:HG22	1:A:49:MET:HB3	2	0.12
(3,880)	1:A:45:THR:HG23	1:A:49:MET:HB3	2	0.12
(3,880)	1:A:45:THR:HG21	1:A:49:MET:HB3	11	0.12
(3,880)	1:A:45:THR:HG22	1:A:49:MET:HB3	11	0.12
(3,880)	1:A:45:THR:HG23	1:A:49:MET:HB3	11	0.12
(3,873)	1:A:53:THR:HG21	1:A:54:PRO:HD2	15	0.12
(3,873)	1:A:53:THR:HG22	1:A:54:PRO:HD2	15	0.12
(3,873)	1:A:53:THR:HG23	1:A:54:PRO:HD2	15	0.12
(3,82)	1:A:24:LYS:H	1:A:24:LYS:HB3	6	0.12
(3,818)	1:A:125:LEU:H	1:A:125:LEU:HD21	13	0.12
(3,818)	1:A:125:LEU:H	1:A:125:LEU:HD22	13	0.12
(3,818)	1:A:125:LEU:H	1:A:125:LEU:HD23	13	0.12
(3,813)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD21	5	0.12
(3,813)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD22	5	0.12
(3,813)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD23	5	0.12
(3,813)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD21	5	0.12
(3,813)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD22	5	0.12
(3,813)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD23	5	0.12
(3,813)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD21	5	0.12
(3,813)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD22	5	0.12
(3,813)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD23	5	0.12
(3,776)	1:A:81:VAL:HA	1:A:84:VAL:HG11	15	0.12
(3,776)	1:A:81:VAL:HA	1:A:84:VAL:HG12	15	0.12
(3,776)	1:A:81:VAL:HA	1:A:84:VAL:HG13	15	0.12
(3,776)	1:A:81:VAL:HA	1:A:84:VAL:HG11	16	0.12
(3,776)	1:A:81:VAL:HA	1:A:84:VAL:HG12	16	0.12
(3,776)	1:A:81:VAL:HA	1:A:84:VAL:HG13	16	0.12
(3,752)	1:A:41:LYS:HG3	1:A:42:GLU:H	13	0.12
(3,748)	1:A:97:LYS:HG3	1:A:98:LEU:H	6	0.12
(3,748)	1:A:97:LYS:HG3	1:A:98:LEU:H	16	0.12
(3,707)	1:A:83:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD11	1	0.12
(3,707)	1:A:83:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD12	1	0.12
(3,707)	1:A:83:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD13	1	0.12
(3,707)	1:A:83:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD11	1	0.12
(3,707)	1:A:83:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD12	1	0.12
(3,707)	1:A:83:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD13	1	0.12
(3,707)	1:A:83:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD11	1	0.12
(3,707)	1:A:83:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD12	1	0.12
(3,707)	1:A:83:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD13	1	0.12
(3,704)	1:A:50:LEU:H	1:A:50:LEU:HG	5	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,693)	1:A:29:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD11	6	0.12
(3,693)	1:A:29:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD12	6	0.12
(3,693)	1:A:29:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD13	6	0.12
(3,693)	1:A:29:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD11	6	0.12
(3,693)	1:A:29:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD12	6	0.12
(3,693)	1:A:29:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD13	6	0.12
(3,693)	1:A:29:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD11	6	0.12
(3,693)	1:A:29:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD12	6	0.12
(3,693)	1:A:29:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD13	6	0.12
(3,672)	1:A:140:LYS:HA	1:A:140:LYS:HG2	12	0.12
(3,672)	1:A:140:LYS:HA	1:A:140:LYS:HG3	12	0.12
(3,672)	1:A:140:LYS:HA	1:A:140:LYS:HG2	23	0.12
(3,672)	1:A:140:LYS:HA	1:A:140:LYS:HG3	23	0.12
(3,666)	1:A:140:LYS:HA	1:A:141:GLN:HG2	4	0.12
(3,666)	1:A:140:LYS:HA	1:A:141:GLN:HG3	4	0.12
(3,660)	1:A:140:LYS:HA	1:A:141:GLN:H	20	0.12
(3,606)	1:A:124:LEU:HB2	1:A:126:GLY:H	3	0.12
(3,557)	1:A:61:ALA:HA	1:A:65:GLU:H	6	0.12
(3,553)	1:A:76:PHE:HB3	1:A:77:GLU:H	18	0.12
(3,517)	1:A:15:LEU:HB2	1:A:16:SER:H	10	0.12
(3,517)	1:A:15:LEU:HB2	1:A:16:SER:H	18	0.12
(3,49)	1:A:143:LYS:H	1:A:143:LYS:HD2	24	0.12
(3,49)	1:A:143:LYS:H	1:A:143:LYS:HD3	24	0.12
(3,467)	1:A:19:MET:HG3	1:A:20:ILE:H	21	0.12
(3,460)	1:A:27:PHE:HA	1:A:31:ASP:H	10	0.12
(3,438)	1:A:60:ASP:H	1:A:60:ASP:HB3	1	0.12
(3,424)	1:A:43:LEU:HA	1:A:45:THR:H	6	0.12
(3,424)	1:A:43:LEU:HA	1:A:45:THR:H	7	0.12
(3,424)	1:A:43:LEU:HA	1:A:45:THR:H	11	0.12
(3,409)	1:A:128:LYS:H	1:A:129:HIS:HB3	17	0.12
(3,328)	1:A:81:VAL:H	1:A:83:MET:HG2	18	0.12
(3,328)	1:A:81:VAL:H	1:A:83:MET:HG3	18	0.12
(3,258)	1:A:82:MET:H	1:A:83:MET:HG2	3	0.12
(3,258)	1:A:82:MET:H	1:A:83:MET:HG3	3	0.12
(3,258)	1:A:82:MET:H	1:A:83:MET:HG2	6	0.12
(3,258)	1:A:82:MET:H	1:A:83:MET:HG3	6	0.12
(3,258)	1:A:82:MET:H	1:A:83:MET:HG2	16	0.12
(3,258)	1:A:82:MET:H	1:A:83:MET:HG3	16	0.12
(3,243)	1:A:120:MET:HE1	1:A:122:LYS:H	12	0.12
(3,243)	1:A:120:MET:HE2	1:A:122:LYS:H	12	0.12
(3,243)	1:A:120:MET:HE3	1:A:122:LYS:H	12	0.12
(3,232)	1:A:58:GLU:H	1:A:61:ALA:HB1	20	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,232)	1:A:58:GLU:H	1:A:61:ALA:HB2	20	0.12
(3,232)	1:A:58:GLU:H	1:A:61:ALA:HB3	20	0.12
(3,2182)	1:A:134:ASP:H	1:A:134:ASP:HB2	4	0.12
(3,2182)	1:A:134:ASP:H	1:A:134:ASP:HB3	4	0.12
(3,2179)	1:A:132:CYS:HB2	1:A:133:MET:H	6	0.12
(3,2179)	1:A:132:CYS:HB3	1:A:133:MET:H	6	0.12
(3,2072)	1:A:104:LYS:HG2	1:A:105:PHE:H	4	0.12
(3,2072)	1:A:104:LYS:HG3	1:A:105:PHE:H	4	0.12
(3,2065)	1:A:102:ARG:HB2	1:A:108:PRO:HD2	24	0.12
(3,2065)	1:A:102:ARG:HB2	1:A:108:PRO:HD3	24	0.12
(3,2065)	1:A:102:ARG:HB3	1:A:108:PRO:HD2	24	0.12
(3,2065)	1:A:102:ARG:HB3	1:A:108:PRO:HD3	24	0.12
(3,2038)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:91:ALA:HB1	24	0.12
(3,2038)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:91:ALA:HB2	24	0.12
(3,2038)	1:A:90:ASP:HB2	1:A:91:ALA:HB3	24	0.12
(3,2038)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:91:ALA:HB1	24	0.12
(3,2038)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:91:ALA:HB2	24	0.12
(3,2038)	1:A:90:ASP:HB3	1:A:91:ALA:HB3	24	0.12
(3,2025)	1:A:88:LYS:HB2	1:A:88:LYS:HE2	23	0.12
(3,2025)	1:A:88:LYS:HB2	1:A:88:LYS:HE3	23	0.12
(3,2025)	1:A:88:LYS:HB3	1:A:88:LYS:HE2	23	0.12
(3,2025)	1:A:88:LYS:HB3	1:A:88:LYS:HE3	23	0.12
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG11	1:A:88:LYS:HE2	2	0.12
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG11	1:A:88:LYS:HE3	2	0.12
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG12	1:A:88:LYS:HE2	2	0.12
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG12	1:A:88:LYS:HE3	2	0.12
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG13	1:A:88:LYS:HE2	2	0.12
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG13	1:A:88:LYS:HE3	2	0.12
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG21	1:A:88:LYS:HE2	2	0.12
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG21	1:A:88:LYS:HE3	2	0.12
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG22	1:A:88:LYS:HE2	2	0.12
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG22	1:A:88:LYS:HE3	2	0.12
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG23	1:A:88:LYS:HE2	2	0.12
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG23	1:A:88:LYS:HE3	2	0.12
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG11	1:A:88:LYS:HE2	18	0.12
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG11	1:A:88:LYS:HE3	18	0.12
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG12	1:A:88:LYS:HE2	18	0.12
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG12	1:A:88:LYS:HE3	18	0.12
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG13	1:A:88:LYS:HE2	18	0.12
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG13	1:A:88:LYS:HE3	18	0.12
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG21	1:A:88:LYS:HE2	18	0.12
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG21	1:A:88:LYS:HE3	18	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG22	1:A:88:LYS:HE2	18	0.12
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG22	1:A:88:LYS:HE3	18	0.12
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG23	1:A:88:LYS:HE2	18	0.12
(3,1990)	1:A:84:VAL:HG23	1:A:88:LYS:HE3	18	0.12
(3,1884)	1:A:54:PRO:HB2	1:A:58:GLU:HG2	16	0.12
(3,1884)	1:A:54:PRO:HB2	1:A:58:GLU:HG3	16	0.12
(3,1884)	1:A:54:PRO:HB3	1:A:58:GLU:HG2	16	0.12
(3,1884)	1:A:54:PRO:HB3	1:A:58:GLU:HG3	16	0.12
(3,1872)	1:A:52:GLN:HB2	1:A:53:THR:HB	2	0.12
(3,1872)	1:A:52:GLN:HB3	1:A:53:THR:HB	2	0.12
(3,1872)	1:A:52:GLN:HB2	1:A:53:THR:HB	21	0.12
(3,1872)	1:A:52:GLN:HB3	1:A:53:THR:HB	21	0.12
(3,1862)	1:A:50:LEU:HD11	1:A:123:ALA:H	6	0.12
(3,1862)	1:A:50:LEU:HD12	1:A:123:ALA:H	6	0.12
(3,1862)	1:A:50:LEU:HD13	1:A:123:ALA:H	6	0.12
(3,1862)	1:A:50:LEU:HD21	1:A:123:ALA:H	6	0.12
(3,1862)	1:A:50:LEU:HD22	1:A:123:ALA:H	6	0.12
(3,1862)	1:A:50:LEU:HD23	1:A:123:ALA:H	6	0.12
(3,1861)	1:A:50:LEU:HD11	1:A:120:MET:HE1	9	0.12
(3,1861)	1:A:50:LEU:HD11	1:A:120:MET:HE2	9	0.12
(3,1861)	1:A:50:LEU:HD11	1:A:120:MET:HE3	9	0.12
(3,1861)	1:A:50:LEU:HD12	1:A:120:MET:HE1	9	0.12
(3,1861)	1:A:50:LEU:HD12	1:A:120:MET:HE2	9	0.12
(3,1861)	1:A:50:LEU:HD12	1:A:120:MET:HE3	9	0.12
(3,1861)	1:A:50:LEU:HD13	1:A:120:MET:HE1	9	0.12
(3,1861)	1:A:50:LEU:HD13	1:A:120:MET:HE2	9	0.12
(3,1861)	1:A:50:LEU:HD13	1:A:120:MET:HE3	9	0.12
(3,1861)	1:A:50:LEU:HD21	1:A:120:MET:HE1	9	0.12
(3,1861)	1:A:50:LEU:HD21	1:A:120:MET:HE2	9	0.12
(3,1861)	1:A:50:LEU:HD21	1:A:120:MET:HE3	9	0.12
(3,1861)	1:A:50:LEU:HD22	1:A:120:MET:HE1	9	0.12
(3,1861)	1:A:50:LEU:HD22	1:A:120:MET:HE2	9	0.12
(3,1861)	1:A:50:LEU:HD22	1:A:120:MET:HE3	9	0.12
(3,1861)	1:A:50:LEU:HD23	1:A:120:MET:HE1	9	0.12
(3,1861)	1:A:50:LEU:HD23	1:A:120:MET:HE2	9	0.12
(3,1861)	1:A:50:LEU:HD23	1:A:120:MET:HE3	9	0.12
(3,1861)	1:A:50:LEU:HD11	1:A:120:MET:HE1	11	0.12
(3,1861)	1:A:50:LEU:HD11	1:A:120:MET:HE2	11	0.12
(3,1861)	1:A:50:LEU:HD11	1:A:120:MET:HE3	11	0.12
(3,1861)	1:A:50:LEU:HD12	1:A:120:MET:HE1	11	0.12
(3,1861)	1:A:50:LEU:HD12	1:A:120:MET:HE2	11	0.12
(3,1861)	1:A:50:LEU:HD12	1:A:120:MET:HE3	11	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,1861)	1:A:50:LEU:HD13	1:A:120:MET:HE1	11	0.12
(3,1861)	1:A:50:LEU:HD13	1:A:120:MET:HE2	11	0.12
(3,1861)	1:A:50:LEU:HD13	1:A:120:MET:HE3	11	0.12
(3,1861)	1:A:50:LEU:HD21	1:A:120:MET:HE1	11	0.12
(3,1861)	1:A:50:LEU:HD21	1:A:120:MET:HE2	11	0.12
(3,1861)	1:A:50:LEU:HD21	1:A:120:MET:HE3	11	0.12
(3,1861)	1:A:50:LEU:HD22	1:A:120:MET:HE1	11	0.12
(3,1861)	1:A:50:LEU:HD22	1:A:120:MET:HE2	11	0.12
(3,1861)	1:A:50:LEU:HD22	1:A:120:MET:HE3	11	0.12
(3,1861)	1:A:50:LEU:HD23	1:A:120:MET:HE1	11	0.12
(3,1861)	1:A:50:LEU:HD23	1:A:120:MET:HE2	11	0.12
(3,1861)	1:A:50:LEU:HD23	1:A:120:MET:HE3	11	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD11	1	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD12	1	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD13	1	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD21	1	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD22	1	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD23	1	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD11	1	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD12	1	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD13	1	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD21	1	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD22	1	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD23	1	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD11	1	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD12	1	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD13	1	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD21	1	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD22	1	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD23	1	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD11	4	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD12	4	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD13	4	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD21	4	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD22	4	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD23	4	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD11	4	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD12	4	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD13	4	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD21	4	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD22	4	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD23	4	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,1855)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD11	4	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD12	4	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD13	4	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD21	4	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD22	4	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD23	4	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD11	8	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD12	8	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD13	8	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD21	8	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD22	8	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD23	8	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD11	8	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD12	8	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD13	8	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD21	8	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD22	8	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD23	8	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD11	8	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD12	8	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD13	8	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD21	8	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD22	8	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD23	8	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD11	23	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD12	23	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD13	23	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD21	23	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD22	23	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD23	23	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD11	23	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD12	23	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD13	23	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD21	23	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD22	23	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD23	23	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD11	23	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD12	23	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD13	23	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD21	23	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD22	23	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD23	23	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,1855)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD11	25	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD12	25	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD13	25	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD21	25	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD22	25	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD23	25	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD11	25	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD12	25	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD13	25	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD21	25	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD22	25	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD23	25	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD11	25	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD12	25	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD13	25	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD21	25	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD22	25	0.12
(3,1855)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD23	25	0.12
(3,1845)	1:A:47:MET:HE1	1:A:59:LEU:HD11	15	0.12
(3,1845)	1:A:47:MET:HE1	1:A:59:LEU:HD12	15	0.12
(3,1845)	1:A:47:MET:HE1	1:A:59:LEU:HD13	15	0.12
(3,1845)	1:A:47:MET:HE1	1:A:59:LEU:HD21	15	0.12
(3,1845)	1:A:47:MET:HE1	1:A:59:LEU:HD22	15	0.12
(3,1845)	1:A:47:MET:HE1	1:A:59:LEU:HD23	15	0.12
(3,1845)	1:A:47:MET:HE2	1:A:59:LEU:HD11	15	0.12
(3,1845)	1:A:47:MET:HE2	1:A:59:LEU:HD12	15	0.12
(3,1845)	1:A:47:MET:HE2	1:A:59:LEU:HD13	15	0.12
(3,1845)	1:A:47:MET:HE2	1:A:59:LEU:HD21	15	0.12
(3,1845)	1:A:47:MET:HE2	1:A:59:LEU:HD22	15	0.12
(3,1845)	1:A:47:MET:HE2	1:A:59:LEU:HD23	15	0.12
(3,1845)	1:A:47:MET:HE3	1:A:59:LEU:HD11	15	0.12
(3,1845)	1:A:47:MET:HE3	1:A:59:LEU:HD12	15	0.12
(3,1845)	1:A:47:MET:HE3	1:A:59:LEU:HD13	15	0.12
(3,1845)	1:A:47:MET:HE3	1:A:59:LEU:HD21	15	0.12
(3,1845)	1:A:47:MET:HE3	1:A:59:LEU:HD22	15	0.12
(3,1845)	1:A:47:MET:HE3	1:A:59:LEU:HD23	15	0.12
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:124:LEU:HA	10	0.12
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG12	1:A:124:LEU:HA	10	0.12
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:124:LEU:HA	10	0.12
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:124:LEU:HA	10	0.12
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:124:LEU:HA	10	0.12
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:124:LEU:HA	10	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,181)	1:A:99:PHE:HA	1:A:100:ASP:H	9	0.12
(3,1805)	1:A:43:LEU:HD11	1:A:47:MET:H	7	0.12
(3,1805)	1:A:43:LEU:HD12	1:A:47:MET:H	7	0.12
(3,1805)	1:A:43:LEU:HD13	1:A:47:MET:H	7	0.12
(3,1805)	1:A:43:LEU:HD21	1:A:47:MET:H	7	0.12
(3,1805)	1:A:43:LEU:HD22	1:A:47:MET:H	7	0.12
(3,1805)	1:A:43:LEU:HD23	1:A:47:MET:H	7	0.12
(3,1799)	1:A:43:LEU:HA	1:A:43:LEU:HD11	17	0.12
(3,1799)	1:A:43:LEU:HA	1:A:43:LEU:HD12	17	0.12
(3,1799)	1:A:43:LEU:HA	1:A:43:LEU:HD13	17	0.12
(3,1799)	1:A:43:LEU:HA	1:A:43:LEU:HD21	17	0.12
(3,1799)	1:A:43:LEU:HA	1:A:43:LEU:HD22	17	0.12
(3,1799)	1:A:43:LEU:HA	1:A:43:LEU:HD23	17	0.12
(3,1745)	1:A:30:PHE:HB2	1:A:46:VAL:H	9	0.12
(3,1745)	1:A:30:PHE:HB3	1:A:46:VAL:H	9	0.12
(3,1736)	1:A:29:MET:HE1	1:A:46:VAL:HG11	7	0.12
(3,1736)	1:A:29:MET:HE1	1:A:46:VAL:HG12	7	0.12
(3,1736)	1:A:29:MET:HE1	1:A:46:VAL:HG13	7	0.12
(3,1736)	1:A:29:MET:HE1	1:A:46:VAL:HG21	7	0.12
(3,1736)	1:A:29:MET:HE1	1:A:46:VAL:HG22	7	0.12
(3,1736)	1:A:29:MET:HE1	1:A:46:VAL:HG23	7	0.12
(3,1736)	1:A:29:MET:HE2	1:A:46:VAL:HG11	7	0.12
(3,1736)	1:A:29:MET:HE2	1:A:46:VAL:HG12	7	0.12
(3,1736)	1:A:29:MET:HE2	1:A:46:VAL:HG13	7	0.12
(3,1736)	1:A:29:MET:HE2	1:A:46:VAL:HG21	7	0.12
(3,1736)	1:A:29:MET:HE2	1:A:46:VAL:HG22	7	0.12
(3,1736)	1:A:29:MET:HE2	1:A:46:VAL:HG23	7	0.12
(3,1736)	1:A:29:MET:HE3	1:A:46:VAL:HG11	7	0.12
(3,1736)	1:A:29:MET:HE3	1:A:46:VAL:HG12	7	0.12
(3,1736)	1:A:29:MET:HE3	1:A:46:VAL:HG13	7	0.12
(3,1736)	1:A:29:MET:HE3	1:A:46:VAL:HG21	7	0.12
(3,1736)	1:A:29:MET:HE3	1:A:46:VAL:HG22	7	0.12
(3,1736)	1:A:29:MET:HE3	1:A:46:VAL:HG23	7	0.12
(3,1735)	1:A:29:MET:HG2	1:A:125:LEU:HD11	22	0.12
(3,1735)	1:A:29:MET:HG2	1:A:125:LEU:HD12	22	0.12
(3,1735)	1:A:29:MET:HG2	1:A:125:LEU:HD13	22	0.12
(3,1735)	1:A:29:MET:HG2	1:A:125:LEU:HD21	22	0.12
(3,1735)	1:A:29:MET:HG2	1:A:125:LEU:HD22	22	0.12
(3,1735)	1:A:29:MET:HG2	1:A:125:LEU:HD23	22	0.12
(3,1735)	1:A:29:MET:HG3	1:A:125:LEU:HD11	22	0.12
(3,1735)	1:A:29:MET:HG3	1:A:125:LEU:HD12	22	0.12
(3,1735)	1:A:29:MET:HG3	1:A:125:LEU:HD13	22	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,1735)	1:A:29:MET:HG3	1:A:125:LEU:HD21	22	0.12
(3,1735)	1:A:29:MET:HG3	1:A:125:LEU:HD22	22	0.12
(3,1735)	1:A:29:MET:HG3	1:A:125:LEU:HD23	22	0.12
(3,1732)	1:A:29:MET:HG2	1:A:83:MET:HE1	6	0.12
(3,1732)	1:A:29:MET:HG2	1:A:83:MET:HE2	6	0.12
(3,1732)	1:A:29:MET:HG2	1:A:83:MET:HE3	6	0.12
(3,1732)	1:A:29:MET:HG3	1:A:83:MET:HE1	6	0.12
(3,1732)	1:A:29:MET:HG3	1:A:83:MET:HE2	6	0.12
(3,1732)	1:A:29:MET:HG3	1:A:83:MET:HE3	6	0.12
(3,1715)	1:A:26:ALA:HA	1:A:125:LEU:HD11	24	0.12
(3,1715)	1:A:26:ALA:HA	1:A:125:LEU:HD12	24	0.12
(3,1715)	1:A:26:ALA:HA	1:A:125:LEU:HD13	24	0.12
(3,1715)	1:A:26:ALA:HA	1:A:125:LEU:HD21	24	0.12
(3,1715)	1:A:26:ALA:HA	1:A:125:LEU:HD22	24	0.12
(3,1715)	1:A:26:ALA:HA	1:A:125:LEU:HD23	24	0.12
(3,1713)	1:A:26:ALA:H	1:A:125:LEU:HD11	13	0.12
(3,1713)	1:A:26:ALA:H	1:A:125:LEU:HD12	13	0.12
(3,1713)	1:A:26:ALA:H	1:A:125:LEU:HD13	13	0.12
(3,1713)	1:A:26:ALA:H	1:A:125:LEU:HD21	13	0.12
(3,1713)	1:A:26:ALA:H	1:A:125:LEU:HD22	13	0.12
(3,1713)	1:A:26:ALA:H	1:A:125:LEU:HD23	13	0.12
(3,1703)	1:A:24:LYS:HA	1:A:24:LYS:HD2	6	0.12
(3,1703)	1:A:24:LYS:HA	1:A:24:LYS:HD3	6	0.12
(3,1703)	1:A:24:LYS:HA	1:A:24:LYS:HD2	15	0.12
(3,1703)	1:A:24:LYS:HA	1:A:24:LYS:HD3	15	0.12
(3,1697)	1:A:23:PHE:H	1:A:80:LEU:HD11	5	0.12
(3,1697)	1:A:23:PHE:H	1:A:80:LEU:HD12	5	0.12
(3,1697)	1:A:23:PHE:H	1:A:80:LEU:HD13	5	0.12
(3,1697)	1:A:23:PHE:H	1:A:80:LEU:HD21	5	0.12
(3,1697)	1:A:23:PHE:H	1:A:80:LEU:HD22	5	0.12
(3,1697)	1:A:23:PHE:H	1:A:80:LEU:HD23	5	0.12
(3,167)	1:A:64:GLU:H	1:A:67:ASP:H	21	0.12
(3,167)	1:A:64:GLU:H	1:A:67:ASP:H	23	0.12
(3,1666)	1:A:19:MET:HB2	1:A:131:VAL:HG11	1	0.12
(3,1666)	1:A:19:MET:HB2	1:A:131:VAL:HG12	1	0.12
(3,1666)	1:A:19:MET:HB2	1:A:131:VAL:HG13	1	0.12
(3,1666)	1:A:19:MET:HB3	1:A:131:VAL:HG11	1	0.12
(3,1666)	1:A:19:MET:HB3	1:A:131:VAL:HG12	1	0.12
(3,1666)	1:A:19:MET:HB3	1:A:131:VAL:HG13	1	0.12
(3,1666)	1:A:19:MET:HB2	1:A:131:VAL:HG11	21	0.12
(3,1666)	1:A:19:MET:HB2	1:A:131:VAL:HG12	21	0.12
(3,1666)	1:A:19:MET:HB2	1:A:131:VAL:HG13	21	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,1666)	1:A:19:MET:HB3	1:A:131:VAL:HG11	21	0.12
(3,1666)	1:A:19:MET:HB3	1:A:131:VAL:HG12	21	0.12
(3,1666)	1:A:19:MET:HB3	1:A:131:VAL:HG13	21	0.12
(3,164)	1:A:141:GLN:HA	1:A:142:VAL:H	18	0.12
(3,1608)	1:A:14:TYR:H	1:A:80:LEU:HD11	25	0.12
(3,1608)	1:A:14:TYR:H	1:A:80:LEU:HD12	25	0.12
(3,1608)	1:A:14:TYR:H	1:A:80:LEU:HD13	25	0.12
(3,1608)	1:A:14:TYR:H	1:A:80:LEU:HD21	25	0.12
(3,1608)	1:A:14:TYR:H	1:A:80:LEU:HD22	25	0.12
(3,1608)	1:A:14:TYR:H	1:A:80:LEU:HD23	25	0.12
(3,1595)	1:A:12:ARG:H	1:A:15:LEU:HD11	6	0.12
(3,1595)	1:A:12:ARG:H	1:A:15:LEU:HD12	6	0.12
(3,1595)	1:A:12:ARG:H	1:A:15:LEU:HD13	6	0.12
(3,1595)	1:A:12:ARG:H	1:A:15:LEU:HD21	6	0.12
(3,1595)	1:A:12:ARG:H	1:A:15:LEU:HD22	6	0.12
(3,1595)	1:A:12:ARG:H	1:A:15:LEU:HD23	6	0.12
(3,1595)	1:A:12:ARG:H	1:A:15:LEU:HD11	9	0.12
(3,1595)	1:A:12:ARG:H	1:A:15:LEU:HD12	9	0.12
(3,1595)	1:A:12:ARG:H	1:A:15:LEU:HD13	9	0.12
(3,1595)	1:A:12:ARG:H	1:A:15:LEU:HD21	9	0.12
(3,1595)	1:A:12:ARG:H	1:A:15:LEU:HD22	9	0.12
(3,1595)	1:A:12:ARG:H	1:A:15:LEU:HD23	9	0.12
(3,1583)	1:A:10:GLU:H	1:A:81:VAL:HG11	5	0.12
(3,1583)	1:A:10:GLU:H	1:A:81:VAL:HG12	5	0.12
(3,1583)	1:A:10:GLU:H	1:A:81:VAL:HG13	5	0.12
(3,1583)	1:A:10:GLU:H	1:A:81:VAL:HG21	5	0.12
(3,1583)	1:A:10:GLU:H	1:A:81:VAL:HG22	5	0.12
(3,1583)	1:A:10:GLU:H	1:A:81:VAL:HG23	5	0.12
(3,1521)	1:A:18:GLU:HB3	1:A:19:MET:H	21	0.12
(3,1518)	1:A:140:LYS:HD2	1:A:141:GLN:H	1	0.12
(3,1518)	1:A:140:LYS:HD3	1:A:141:GLN:H	1	0.12
(3,1518)	1:A:140:LYS:HD2	1:A:141:GLN:H	15	0.12
(3,1518)	1:A:140:LYS:HD3	1:A:141:GLN:H	15	0.12
(3,1504)	1:A:42:GLU:HA	1:A:42:GLU:HG2	4	0.12
(3,1498)	1:A:64:GLU:HA	1:A:66:VAL:HG21	20	0.12
(3,1498)	1:A:64:GLU:HA	1:A:66:VAL:HG22	20	0.12
(3,1498)	1:A:64:GLU:HA	1:A:66:VAL:HG23	20	0.12
(3,1468)	1:A:88:LYS:HD2	1:A:89:GLU:HA	6	0.12
(3,1468)	1:A:88:LYS:HD3	1:A:89:GLU:HA	6	0.12
(3,1468)	1:A:88:LYS:HD2	1:A:89:GLU:HA	16	0.12
(3,1468)	1:A:88:LYS:HD3	1:A:89:GLU:HA	16	0.12
(3,1444)	1:A:71:SER:HA	1:A:73:THR:HG21	10	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,1444)	1:A:71:SER:HA	1:A:73:THR:HG22	10	0.12
(3,1444)	1:A:71:SER:HA	1:A:73:THR:HG23	10	0.12
(3,1425)	1:A:108:PRO:HB2	1:A:109:PRO:HD3	9	0.12
(3,1406)	1:A:115:MET:HG2	1:A:120:MET:H	18	0.12
(3,1399)	1:A:22:GLU:HA	1:A:22:GLU:HG2	19	0.12
(3,1399)	1:A:22:GLU:HA	1:A:22:GLU:HG2	24	0.12
(3,1393)	1:A:81:VAL:HA	1:A:84:VAL:HB	4	0.12
(3,1393)	1:A:81:VAL:HA	1:A:84:VAL:HB	10	0.12
(3,1393)	1:A:81:VAL:HA	1:A:84:VAL:HB	17	0.12
(3,1378)	1:A:109:PRO:HB3	1:A:111:ARG:H	1	0.12
(3,1378)	1:A:109:PRO:HB3	1:A:111:ARG:H	17	0.12
(3,1378)	1:A:109:PRO:HB3	1:A:111:ARG:H	18	0.12
(3,1370)	1:A:114:ARG:H	1:A:114:ARG:HB3	22	0.12
(3,1358)	1:A:27:PHE:HA	1:A:38:ILE:HD11	10	0.12
(3,1358)	1:A:27:PHE:HA	1:A:38:ILE:HD12	10	0.12
(3,1358)	1:A:27:PHE:HA	1:A:38:ILE:HD13	10	0.12
(3,1340)	1:A:144:LYS:HB2	1:A:146:ASP:HB2	4	0.12
(3,1340)	1:A:144:LYS:HB2	1:A:146:ASP:HB3	4	0.12
(3,1340)	1:A:144:LYS:HB2	1:A:146:ASP:HB2	14	0.12
(3,1340)	1:A:144:LYS:HB2	1:A:146:ASP:HB3	14	0.12
(3,1318)	1:A:7:GLN:HG3	1:A:10:GLU:HB2	1	0.12
(3,1318)	1:A:7:GLN:HG3	1:A:10:GLU:HB3	1	0.12
(3,13)	1:A:32:ALA:H	1:A:42:GLU:HB3	23	0.12
(3,1299)	1:A:64:GLU:HG3	1:A:65:GLU:H	20	0.12
(3,1246)	1:A:137:ALA:HB1	1:A:138:ASN:HB3	7	0.12
(3,1246)	1:A:137:ALA:HB2	1:A:138:ASN:HB3	7	0.12
(3,1246)	1:A:137:ALA:HB3	1:A:138:ASN:HB3	7	0.12
(3,1178)	1:A:135:LEU:HB3	1:A:136:ARG:H	22	0.12
(3,115)	1:A:39:SER:H	1:A:42:GLU:HB3	12	0.12
(3,115)	1:A:39:SER:H	1:A:42:GLU:HB3	24	0.12
(3,1125)	1:A:30:PHE:H	1:A:38:ILE:HD11	9	0.12
(3,1125)	1:A:30:PHE:H	1:A:38:ILE:HD12	9	0.12
(3,1125)	1:A:30:PHE:H	1:A:38:ILE:HD13	9	0.12
(3,1120)	1:A:38:ILE:HD11	1:A:43:LEU:HA	15	0.12
(3,1120)	1:A:38:ILE:HD12	1:A:43:LEU:HA	15	0.12
(3,1120)	1:A:38:ILE:HD13	1:A:43:LEU:HA	15	0.12
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB1	1:A:82:MET:HE1	16	0.12
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB1	1:A:82:MET:HE2	16	0.12
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB1	1:A:82:MET:HE3	16	0.12
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB2	1:A:82:MET:HE1	16	0.12
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB2	1:A:82:MET:HE2	16	0.12
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB2	1:A:82:MET:HE3	16	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB3	1:A:82:MET:HE1	16	0.12
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB3	1:A:82:MET:HE2	16	0.12
(3,1068)	1:A:26:ALA:HB3	1:A:82:MET:HE3	16	0.12
(3,1066)	1:A:29:MET:HE1	1:A:83:MET:HE1	9	0.12
(3,1066)	1:A:29:MET:HE1	1:A:83:MET:HE2	9	0.12
(3,1066)	1:A:29:MET:HE1	1:A:83:MET:HE3	9	0.12
(3,1066)	1:A:29:MET:HE2	1:A:83:MET:HE1	9	0.12
(3,1066)	1:A:29:MET:HE2	1:A:83:MET:HE2	9	0.12
(3,1066)	1:A:29:MET:HE2	1:A:83:MET:HE3	9	0.12
(3,1066)	1:A:29:MET:HE3	1:A:83:MET:HE1	9	0.12
(3,1066)	1:A:29:MET:HE3	1:A:83:MET:HE2	9	0.12
(3,1066)	1:A:29:MET:HE3	1:A:83:MET:HE3	9	0.12
(3,1065)	1:A:82:MET:HG2	1:A:83:MET:HE1	15	0.12
(3,1065)	1:A:82:MET:HG2	1:A:83:MET:HE2	15	0.12
(3,1065)	1:A:82:MET:HG2	1:A:83:MET:HE3	15	0.12
(3,1065)	1:A:82:MET:HG3	1:A:83:MET:HE1	15	0.12
(3,1065)	1:A:82:MET:HG3	1:A:83:MET:HE2	15	0.12
(3,1065)	1:A:82:MET:HG3	1:A:83:MET:HE3	15	0.12
(3,1058)	1:A:47:MET:HE1	1:A:54:PRO:HD2	24	0.12
(3,1058)	1:A:47:MET:HE2	1:A:54:PRO:HD2	24	0.12
(3,1058)	1:A:47:MET:HE3	1:A:54:PRO:HD2	24	0.12
(3,1051)	1:A:87:MET:HE1	1:A:133:MET:HA	1	0.12
(3,1051)	1:A:87:MET:HE2	1:A:133:MET:HA	1	0.12
(3,1051)	1:A:87:MET:HE3	1:A:133:MET:HA	1	0.12
(3,1050)	1:A:87:MET:HE1	1:A:134:ASP:H	11	0.12
(3,1050)	1:A:87:MET:HE2	1:A:134:ASP:H	11	0.12
(3,1050)	1:A:87:MET:HE3	1:A:134:ASP:H	11	0.12
(3,1049)	1:A:47:MET:HE1	1:A:55:THR:H	8	0.12
(3,1049)	1:A:47:MET:HE2	1:A:55:THR:H	8	0.12
(3,1049)	1:A:47:MET:HE3	1:A:55:THR:H	8	0.12
(3,1023)	1:A:20:ILE:HG21	1:A:22:GLU:H	25	0.12
(3,1023)	1:A:20:ILE:HG22	1:A:22:GLU:H	25	0.12
(3,1023)	1:A:20:ILE:HG23	1:A:22:GLU:H	25	0.12
(3,1005)	1:A:120:MET:HA	1:A:120:MET:HE1	24	0.12
(3,1005)	1:A:120:MET:HA	1:A:120:MET:HE2	24	0.12
(3,1005)	1:A:120:MET:HA	1:A:120:MET:HE3	24	0.12
(3,1004)	1:A:117:ALA:HA	1:A:120:MET:HE1	22	0.12
(3,1004)	1:A:117:ALA:HA	1:A:120:MET:HE2	22	0.12
(3,1004)	1:A:117:ALA:HA	1:A:120:MET:HE3	22	0.12
(4,13)	1:A:38:ILE:HB	1:A:73:THR:HB	4	0.11
(3,998)	1:A:120:MET:HE1	1:A:124:LEU:H	25	0.11
(3,998)	1:A:120:MET:HE2	1:A:124:LEU:H	25	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,998)	1:A:120:MET:HE3	1:A:124:LEU:H	25	0.11
(3,920)	1:A:15:LEU:HA	1:A:19:MET:HE1	2	0.11
(3,920)	1:A:15:LEU:HA	1:A:19:MET:HE2	2	0.11
(3,920)	1:A:15:LEU:HA	1:A:19:MET:HE3	2	0.11
(3,920)	1:A:15:LEU:HA	1:A:19:MET:HE1	15	0.11
(3,920)	1:A:15:LEU:HA	1:A:19:MET:HE2	15	0.11
(3,920)	1:A:15:LEU:HA	1:A:19:MET:HE3	15	0.11
(3,888)	1:A:142:VAL:HG11	1:A:143:LYS:HE2	8	0.11
(3,888)	1:A:142:VAL:HG11	1:A:143:LYS:HE3	8	0.11
(3,888)	1:A:142:VAL:HG12	1:A:143:LYS:HE2	8	0.11
(3,888)	1:A:142:VAL:HG12	1:A:143:LYS:HE3	8	0.11
(3,888)	1:A:142:VAL:HG13	1:A:143:LYS:HE2	8	0.11
(3,888)	1:A:142:VAL:HG13	1:A:143:LYS:HE3	8	0.11
(3,880)	1:A:45:THR:HG21	1:A:49:MET:HB3	24	0.11
(3,880)	1:A:45:THR:HG22	1:A:49:MET:HB3	24	0.11
(3,880)	1:A:45:THR:HG23	1:A:49:MET:HB3	24	0.11
(3,879)	1:A:142:VAL:HG21	1:A:143:LYS:HE2	24	0.11
(3,879)	1:A:142:VAL:HG21	1:A:143:LYS:HE3	24	0.11
(3,879)	1:A:142:VAL:HG22	1:A:143:LYS:HE2	24	0.11
(3,879)	1:A:142:VAL:HG22	1:A:143:LYS:HE3	24	0.11
(3,879)	1:A:142:VAL:HG23	1:A:143:LYS:HE2	24	0.11
(3,879)	1:A:142:VAL:HG23	1:A:143:LYS:HE3	24	0.11
(3,873)	1:A:53:THR:HG21	1:A:54:PRO:HD2	20	0.11
(3,873)	1:A:53:THR:HG22	1:A:54:PRO:HD2	20	0.11
(3,873)	1:A:53:THR:HG23	1:A:54:PRO:HD2	20	0.11
(3,868)	1:A:40:VAL:HG21	1:A:56:LYS:HA	8	0.11
(3,868)	1:A:40:VAL:HG22	1:A:56:LYS:HA	8	0.11
(3,868)	1:A:40:VAL:HG23	1:A:56:LYS:HA	8	0.11
(3,864)	1:A:52:GLN:HA	1:A:53:THR:HG21	25	0.11
(3,864)	1:A:52:GLN:HA	1:A:53:THR:HG22	25	0.11
(3,864)	1:A:52:GLN:HA	1:A:53:THR:HG23	25	0.11
(3,856)	1:A:21:ALA:HB1	1:A:131:VAL:HG11	9	0.11
(3,856)	1:A:21:ALA:HB1	1:A:131:VAL:HG12	9	0.11
(3,856)	1:A:21:ALA:HB1	1:A:131:VAL:HG13	9	0.11
(3,856)	1:A:21:ALA:HB2	1:A:131:VAL:HG11	9	0.11
(3,856)	1:A:21:ALA:HB2	1:A:131:VAL:HG12	9	0.11
(3,856)	1:A:21:ALA:HB2	1:A:131:VAL:HG13	9	0.11
(3,856)	1:A:21:ALA:HB3	1:A:131:VAL:HG11	9	0.11
(3,856)	1:A:21:ALA:HB3	1:A:131:VAL:HG12	9	0.11
(3,856)	1:A:21:ALA:HB3	1:A:131:VAL:HG13	9	0.11
(3,825)	1:A:39:SER:H	1:A:73:THR:HG21	25	0.11
(3,825)	1:A:39:SER:H	1:A:73:THR:HG22	25	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,825)	1:A:39:SER:H	1:A:73:THR:HG23	25	0.11
(3,818)	1:A:125:LEU:H	1:A:125:LEU:HD21	15	0.11
(3,818)	1:A:125:LEU:H	1:A:125:LEU:HD22	15	0.11
(3,818)	1:A:125:LEU:H	1:A:125:LEU:HD23	15	0.11
(3,813)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD21	10	0.11
(3,813)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD22	10	0.11
(3,813)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD23	10	0.11
(3,813)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD21	10	0.11
(3,813)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD22	10	0.11
(3,813)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD23	10	0.11
(3,813)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD21	10	0.11
(3,813)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD22	10	0.11
(3,813)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD23	10	0.11
(3,788)	1:A:40:VAL:HG11	1:A:56:LYS:HA	9	0.11
(3,788)	1:A:40:VAL:HG12	1:A:56:LYS:HA	9	0.11
(3,788)	1:A:40:VAL:HG13	1:A:56:LYS:HA	9	0.11
(3,776)	1:A:81:VAL:HA	1:A:84:VAL:HG11	23	0.11
(3,776)	1:A:81:VAL:HA	1:A:84:VAL:HG12	23	0.11
(3,776)	1:A:81:VAL:HA	1:A:84:VAL:HG13	23	0.11
(3,734)	1:A:26:ALA:HA	1:A:29:MET:HB3	6	0.11
(3,675)	1:A:24:LYS:HA	1:A:24:LYS:HD3	15	0.11
(3,675)	1:A:24:LYS:HA	1:A:24:LYS:HD3	17	0.11
(3,675)	1:A:24:LYS:HA	1:A:24:LYS:HD3	25	0.11
(3,672)	1:A:140:LYS:HA	1:A:140:LYS:HG2	9	0.11
(3,672)	1:A:140:LYS:HA	1:A:140:LYS:HG3	9	0.11
(3,672)	1:A:140:LYS:HA	1:A:140:LYS:HG2	16	0.11
(3,672)	1:A:140:LYS:HA	1:A:140:LYS:HG3	16	0.11
(3,672)	1:A:140:LYS:HA	1:A:140:LYS:HG2	18	0.11
(3,672)	1:A:140:LYS:HA	1:A:140:LYS:HG3	18	0.11
(3,665)	1:A:144:LYS:HA	1:A:144:LYS:HE2	15	0.11
(3,665)	1:A:144:LYS:HA	1:A:144:LYS:HE3	15	0.11
(3,664)	1:A:102:ARG:HA	1:A:102:ARG:HD2	23	0.11
(3,664)	1:A:102:ARG:HA	1:A:102:ARG:HD3	23	0.11
(3,646)	1:A:101:LEU:HG	1:A:102:ARG:H	20	0.11
(3,629)	1:A:83:MET:HA	1:A:117:ALA:HB1	19	0.11
(3,629)	1:A:83:MET:HA	1:A:117:ALA:HB2	19	0.11
(3,629)	1:A:83:MET:HA	1:A:117:ALA:HB3	19	0.11
(3,607)	1:A:125:LEU:HG	1:A:126:GLY:H	17	0.11
(3,590)	1:A:125:LEU:H	1:A:125:LEU:HG	9	0.11
(3,524)	1:A:71:SER:H	1:A:72:GLY:H	1	0.11
(3,519)	1:A:138:ASN:H	1:A:139:LEU:H	7	0.11
(3,519)	1:A:138:ASN:H	1:A:139:LEU:H	19	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,519)	1:A:138:ASN:H	1:A:139:LEU:H	20	0.11
(3,5)	1:A:32:ALA:H	1:A:34:GLY:H	20	0.11
(3,414)	1:A:87:MET:H	1:A:87:MET:HE1	2	0.11
(3,414)	1:A:87:MET:H	1:A:87:MET:HE2	2	0.11
(3,414)	1:A:87:MET:H	1:A:87:MET:HE3	2	0.11
(3,414)	1:A:87:MET:H	1:A:87:MET:HE1	7	0.11
(3,414)	1:A:87:MET:H	1:A:87:MET:HE2	7	0.11
(3,414)	1:A:87:MET:H	1:A:87:MET:HE3	7	0.11
(3,414)	1:A:87:MET:H	1:A:87:MET:HE1	9	0.11
(3,414)	1:A:87:MET:H	1:A:87:MET:HE2	9	0.11
(3,414)	1:A:87:MET:H	1:A:87:MET:HE3	9	0.11
(3,414)	1:A:87:MET:H	1:A:87:MET:HE1	11	0.11
(3,414)	1:A:87:MET:H	1:A:87:MET:HE2	11	0.11
(3,414)	1:A:87:MET:H	1:A:87:MET:HE3	11	0.11
(3,414)	1:A:87:MET:H	1:A:87:MET:HE1	25	0.11
(3,414)	1:A:87:MET:H	1:A:87:MET:HE2	25	0.11
(3,414)	1:A:87:MET:H	1:A:87:MET:HE3	25	0.11
(3,4)	1:A:34:GLY:H	1:A:35:GLY:H	22	0.11
(3,390)	1:A:98:LEU:HB2	1:A:99:PHE:H	8	0.11
(3,37)	1:A:52:GLN:HE21	1:A:115:MET:HB2	17	0.11
(3,37)	1:A:52:GLN:HE21	1:A:115:MET:HB3	17	0.11
(3,344)	1:A:80:LEU:H	1:A:80:LEU:HD21	11	0.11
(3,344)	1:A:80:LEU:H	1:A:80:LEU:HD22	11	0.11
(3,344)	1:A:80:LEU:H	1:A:80:LEU:HD23	11	0.11
(3,328)	1:A:81:VAL:H	1:A:83:MET:HG2	5	0.11
(3,328)	1:A:81:VAL:H	1:A:83:MET:HG3	5	0.11
(3,328)	1:A:81:VAL:H	1:A:83:MET:HG2	19	0.11
(3,328)	1:A:81:VAL:H	1:A:83:MET:HG3	19	0.11
(3,32)	1:A:52:GLN:H	1:A:52:GLN:HE22	7	0.11
(3,32)	1:A:52:GLN:H	1:A:52:GLN:HE22	20	0.11
(3,300)	1:A:7:GLN:H	1:A:10:GLU:HB2	23	0.11
(3,300)	1:A:7:GLN:H	1:A:10:GLU:HB3	23	0.11
(3,283)	1:A:135:LEU:HB2	1:A:136:ARG:H	6	0.11
(3,28)	1:A:35:GLY:H	1:A:36:GLY:HA2	19	0.11
(3,271)	1:A:39:SER:HA	1:A:41:LYS:H	23	0.11
(3,27)	1:A:35:GLY:H	1:A:36:GLY:H	3	0.11
(3,258)	1:A:82:MET:H	1:A:83:MET:HG2	14	0.11
(3,258)	1:A:82:MET:H	1:A:83:MET:HG3	14	0.11
(3,258)	1:A:82:MET:H	1:A:83:MET:HG2	22	0.11
(3,258)	1:A:82:MET:H	1:A:83:MET:HG3	22	0.11
(3,243)	1:A:120:MET:HE1	1:A:122:LYS:H	24	0.11
(3,243)	1:A:120:MET:HE2	1:A:122:LYS:H	24	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,243)	1:A:120:MET:HE3	1:A:122:LYS:H	24	0.11
(3,227)	1:A:50:LEU:HG	1:A:123:ALA:H	17	0.11
(3,2207)	1:A:140:LYS:HB2	1:A:141:GLN:H	15	0.11
(3,2207)	1:A:140:LYS:HB3	1:A:141:GLN:H	15	0.11
(3,2192)	1:A:137:ALA:H	1:A:138:ASN:HB2	15	0.11
(3,2192)	1:A:137:ALA:H	1:A:138:ASN:HB3	15	0.11
(3,2081)	1:A:111:ARG:HB2	1:A:113:VAL:HG11	21	0.11
(3,2081)	1:A:111:ARG:HB2	1:A:113:VAL:HG12	21	0.11
(3,2081)	1:A:111:ARG:HB2	1:A:113:VAL:HG13	21	0.11
(3,2081)	1:A:111:ARG:HB2	1:A:113:VAL:HG21	21	0.11
(3,2081)	1:A:111:ARG:HB2	1:A:113:VAL:HG22	21	0.11
(3,2081)	1:A:111:ARG:HB2	1:A:113:VAL:HG23	21	0.11
(3,2081)	1:A:111:ARG:HB3	1:A:113:VAL:HG11	21	0.11
(3,2081)	1:A:111:ARG:HB3	1:A:113:VAL:HG12	21	0.11
(3,2081)	1:A:111:ARG:HB3	1:A:113:VAL:HG13	21	0.11
(3,2081)	1:A:111:ARG:HB3	1:A:113:VAL:HG21	21	0.11
(3,2081)	1:A:111:ARG:HB3	1:A:113:VAL:HG22	21	0.11
(3,2081)	1:A:111:ARG:HB3	1:A:113:VAL:HG23	21	0.11
(3,2080)	1:A:110:LEU:H	1:A:110:LEU:HB2	22	0.11
(3,2080)	1:A:110:LEU:H	1:A:110:LEU:HB3	22	0.11
(3,2072)	1:A:104:LYS:HG2	1:A:105:PHE:H	5	0.11
(3,2072)	1:A:104:LYS:HG3	1:A:105:PHE:H	5	0.11
(3,2068)	1:A:102:ARG:HD2	1:A:107:ARG:HB2	18	0.11
(3,2068)	1:A:102:ARG:HD2	1:A:107:ARG:HB3	18	0.11
(3,2068)	1:A:102:ARG:HD3	1:A:107:ARG:HB2	18	0.11
(3,2068)	1:A:102:ARG:HD3	1:A:107:ARG:HB3	18	0.11
(3,2068)	1:A:102:ARG:HD2	1:A:107:ARG:HB2	24	0.11
(3,2068)	1:A:102:ARG:HD2	1:A:107:ARG:HB3	24	0.11
(3,2068)	1:A:102:ARG:HD3	1:A:107:ARG:HB2	24	0.11
(3,2068)	1:A:102:ARG:HD3	1:A:107:ARG:HB3	24	0.11
(3,2066)	1:A:102:ARG:HG2	1:A:107:ARG:HB2	9	0.11
(3,2066)	1:A:102:ARG:HG2	1:A:107:ARG:HB3	9	0.11
(3,2066)	1:A:102:ARG:HG3	1:A:107:ARG:HB2	9	0.11
(3,2066)	1:A:102:ARG:HG3	1:A:107:ARG:HB3	9	0.11
(3,2042)	1:A:91:ALA:HB1	1:A:92:GLY:HA2	23	0.11
(3,2042)	1:A:91:ALA:HB1	1:A:92:GLY:HA3	23	0.11
(3,2042)	1:A:91:ALA:HB2	1:A:92:GLY:HA2	23	0.11
(3,2042)	1:A:91:ALA:HB2	1:A:92:GLY:HA3	23	0.11
(3,2042)	1:A:91:ALA:HB3	1:A:92:GLY:HA2	23	0.11
(3,2042)	1:A:91:ALA:HB3	1:A:92:GLY:HA3	23	0.11
(3,2032)	1:A:88:LYS:HE2	1:A:135:LEU:HD11	17	0.11
(3,2032)	1:A:88:LYS:HE2	1:A:135:LEU:HD12	17	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,2032)	1:A:88:LYS:HE2	1:A:135:LEU:HD13	17	0.11
(3,2032)	1:A:88:LYS:HE2	1:A:135:LEU:HD21	17	0.11
(3,2032)	1:A:88:LYS:HE2	1:A:135:LEU:HD22	17	0.11
(3,2032)	1:A:88:LYS:HE2	1:A:135:LEU:HD23	17	0.11
(3,2032)	1:A:88:LYS:HE3	1:A:135:LEU:HD11	17	0.11
(3,2032)	1:A:88:LYS:HE3	1:A:135:LEU:HD12	17	0.11
(3,2032)	1:A:88:LYS:HE3	1:A:135:LEU:HD13	17	0.11
(3,2032)	1:A:88:LYS:HE3	1:A:135:LEU:HD21	17	0.11
(3,2032)	1:A:88:LYS:HE3	1:A:135:LEU:HD22	17	0.11
(3,2032)	1:A:88:LYS:HE3	1:A:135:LEU:HD23	17	0.11
(3,2014)	1:A:87:MET:HB2	1:A:135:LEU:HD11	15	0.11
(3,2014)	1:A:87:MET:HB2	1:A:135:LEU:HD12	15	0.11
(3,2014)	1:A:87:MET:HB2	1:A:135:LEU:HD13	15	0.11
(3,2014)	1:A:87:MET:HB2	1:A:135:LEU:HD21	15	0.11
(3,2014)	1:A:87:MET:HB2	1:A:135:LEU:HD22	15	0.11
(3,2014)	1:A:87:MET:HB2	1:A:135:LEU:HD23	15	0.11
(3,2014)	1:A:87:MET:HB3	1:A:135:LEU:HD11	15	0.11
(3,2014)	1:A:87:MET:HB3	1:A:135:LEU:HD12	15	0.11
(3,2014)	1:A:87:MET:HB3	1:A:135:LEU:HD13	15	0.11
(3,2014)	1:A:87:MET:HB3	1:A:135:LEU:HD21	15	0.11
(3,2014)	1:A:87:MET:HB3	1:A:135:LEU:HD22	15	0.11
(3,2014)	1:A:87:MET:HB3	1:A:135:LEU:HD23	15	0.11
(3,1991)	1:A:84:VAL:HG11	1:A:135:LEU:HB2	4	0.11
(3,1991)	1:A:84:VAL:HG11	1:A:135:LEU:HB3	4	0.11
(3,1991)	1:A:84:VAL:HG12	1:A:135:LEU:HB2	4	0.11
(3,1991)	1:A:84:VAL:HG12	1:A:135:LEU:HB3	4	0.11
(3,1991)	1:A:84:VAL:HG13	1:A:135:LEU:HB2	4	0.11
(3,1991)	1:A:84:VAL:HG13	1:A:135:LEU:HB3	4	0.11
(3,1991)	1:A:84:VAL:HG21	1:A:135:LEU:HB2	4	0.11
(3,1991)	1:A:84:VAL:HG21	1:A:135:LEU:HB3	4	0.11
(3,1991)	1:A:84:VAL:HG22	1:A:135:LEU:HB2	4	0.11
(3,1991)	1:A:84:VAL:HG22	1:A:135:LEU:HB3	4	0.11
(3,1991)	1:A:84:VAL:HG23	1:A:135:LEU:HB2	4	0.11
(3,1991)	1:A:84:VAL:HG23	1:A:135:LEU:HB3	4	0.11
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG11	1:A:88:LYS:HG2	18	0.11
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG11	1:A:88:LYS:HG3	18	0.11
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG12	1:A:88:LYS:HG2	18	0.11
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG12	1:A:88:LYS:HG3	18	0.11
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG13	1:A:88:LYS:HG2	18	0.11
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG13	1:A:88:LYS:HG3	18	0.11
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG21	1:A:88:LYS:HG2	18	0.11
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG21	1:A:88:LYS:HG3	18	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG22	1:A:88:LYS:HG2	18	0.11
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG22	1:A:88:LYS:HG3	18	0.11
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG23	1:A:88:LYS:HG2	18	0.11
(3,1988)	1:A:84:VAL:HG23	1:A:88:LYS:HG3	18	0.11
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG11	1:A:85:ARG:HD2	10	0.11
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG11	1:A:85:ARG:HD3	10	0.11
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG12	1:A:85:ARG:HD2	10	0.11
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG12	1:A:85:ARG:HD3	10	0.11
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG13	1:A:85:ARG:HD2	10	0.11
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG13	1:A:85:ARG:HD3	10	0.11
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG21	1:A:85:ARG:HD2	10	0.11
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG21	1:A:85:ARG:HD3	10	0.11
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG22	1:A:85:ARG:HD2	10	0.11
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG22	1:A:85:ARG:HD3	10	0.11
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG23	1:A:85:ARG:HD2	10	0.11
(3,1962)	1:A:81:VAL:HG23	1:A:85:ARG:HD3	10	0.11
(3,1904)	1:A:58:GLU:HG2	1:A:59:LEU:HD11	11	0.11
(3,1904)	1:A:58:GLU:HG2	1:A:59:LEU:HD12	11	0.11
(3,1904)	1:A:58:GLU:HG2	1:A:59:LEU:HD13	11	0.11
(3,1904)	1:A:58:GLU:HG2	1:A:59:LEU:HD21	11	0.11
(3,1904)	1:A:58:GLU:HG2	1:A:59:LEU:HD22	11	0.11
(3,1904)	1:A:58:GLU:HG2	1:A:59:LEU:HD23	11	0.11
(3,1904)	1:A:58:GLU:HG3	1:A:59:LEU:HD11	11	0.11
(3,1904)	1:A:58:GLU:HG3	1:A:59:LEU:HD12	11	0.11
(3,1904)	1:A:58:GLU:HG3	1:A:59:LEU:HD13	11	0.11
(3,1904)	1:A:58:GLU:HG3	1:A:59:LEU:HD21	11	0.11
(3,1904)	1:A:58:GLU:HG3	1:A:59:LEU:HD22	11	0.11
(3,1904)	1:A:58:GLU:HG3	1:A:59:LEU:HD23	11	0.11
(3,1903)	1:A:58:GLU:HB3	1:A:59:LEU:HD11	3	0.11
(3,1903)	1:A:58:GLU:HB3	1:A:59:LEU:HD12	3	0.11
(3,1903)	1:A:58:GLU:HB3	1:A:59:LEU:HD13	3	0.11
(3,1903)	1:A:58:GLU:HB3	1:A:59:LEU:HD21	3	0.11
(3,1903)	1:A:58:GLU:HB3	1:A:59:LEU:HD22	3	0.11
(3,1903)	1:A:58:GLU:HB3	1:A:59:LEU:HD23	3	0.11
(3,1902)	1:A:58:GLU:HB2	1:A:59:LEU:HD11	1	0.11
(3,1902)	1:A:58:GLU:HB2	1:A:59:LEU:HD12	1	0.11
(3,1902)	1:A:58:GLU:HB2	1:A:59:LEU:HD13	1	0.11
(3,1902)	1:A:58:GLU:HB2	1:A:59:LEU:HD21	1	0.11
(3,1902)	1:A:58:GLU:HB2	1:A:59:LEU:HD22	1	0.11
(3,1902)	1:A:58:GLU:HB2	1:A:59:LEU:HD23	1	0.11
(3,1898)	1:A:57:GLU:HA	1:A:57:GLU:HG2	21	0.11
(3,1898)	1:A:57:GLU:HA	1:A:57:GLU:HG3	21	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,1884)	1:A:54:PRO:HB2	1:A:58:GLU:HG2	6	0.11
(3,1884)	1:A:54:PRO:HB2	1:A:58:GLU:HG3	6	0.11
(3,1884)	1:A:54:PRO:HB3	1:A:58:GLU:HG2	6	0.11
(3,1884)	1:A:54:PRO:HB3	1:A:58:GLU:HG3	6	0.11
(3,1873)	1:A:52:GLN:HB2	1:A:54:PRO:HD2	4	0.11
(3,1873)	1:A:52:GLN:HB2	1:A:54:PRO:HD3	4	0.11
(3,1873)	1:A:52:GLN:HB3	1:A:54:PRO:HD2	4	0.11
(3,1873)	1:A:52:GLN:HB3	1:A:54:PRO:HD3	4	0.11
(3,1861)	1:A:50:LEU:HD11	1:A:120:MET:HE1	4	0.11
(3,1861)	1:A:50:LEU:HD11	1:A:120:MET:HE2	4	0.11
(3,1861)	1:A:50:LEU:HD11	1:A:120:MET:HE3	4	0.11
(3,1861)	1:A:50:LEU:HD12	1:A:120:MET:HE1	4	0.11
(3,1861)	1:A:50:LEU:HD12	1:A:120:MET:HE2	4	0.11
(3,1861)	1:A:50:LEU:HD12	1:A:120:MET:HE3	4	0.11
(3,1861)	1:A:50:LEU:HD13	1:A:120:MET:HE1	4	0.11
(3,1861)	1:A:50:LEU:HD13	1:A:120:MET:HE2	4	0.11
(3,1861)	1:A:50:LEU:HD13	1:A:120:MET:HE3	4	0.11
(3,1861)	1:A:50:LEU:HD21	1:A:120:MET:HE1	4	0.11
(3,1861)	1:A:50:LEU:HD21	1:A:120:MET:HE2	4	0.11
(3,1861)	1:A:50:LEU:HD21	1:A:120:MET:HE3	4	0.11
(3,1861)	1:A:50:LEU:HD22	1:A:120:MET:HE1	4	0.11
(3,1861)	1:A:50:LEU:HD22	1:A:120:MET:HE2	4	0.11
(3,1861)	1:A:50:LEU:HD22	1:A:120:MET:HE3	4	0.11
(3,1861)	1:A:50:LEU:HD23	1:A:120:MET:HE1	4	0.11
(3,1861)	1:A:50:LEU:HD23	1:A:120:MET:HE2	4	0.11
(3,1861)	1:A:50:LEU:HD23	1:A:120:MET:HE3	4	0.11
(3,1855)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD11	7	0.11
(3,1855)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD12	7	0.11
(3,1855)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD13	7	0.11
(3,1855)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD21	7	0.11
(3,1855)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD22	7	0.11
(3,1855)	1:A:49:MET:HE1	1:A:124:LEU:HD23	7	0.11
(3,1855)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD11	7	0.11
(3,1855)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD12	7	0.11
(3,1855)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD13	7	0.11
(3,1855)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD21	7	0.11
(3,1855)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD22	7	0.11
(3,1855)	1:A:49:MET:HE2	1:A:124:LEU:HD23	7	0.11
(3,1855)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD11	7	0.11
(3,1855)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD12	7	0.11
(3,1855)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD13	7	0.11
(3,1855)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD21	7	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,1855)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD22	7	0.11
(3,1855)	1:A:49:MET:HE3	1:A:124:LEU:HD23	7	0.11
(3,1845)	1:A:47:MET:HE1	1:A:59:LEU:HD11	6	0.11
(3,1845)	1:A:47:MET:HE1	1:A:59:LEU:HD12	6	0.11
(3,1845)	1:A:47:MET:HE1	1:A:59:LEU:HD13	6	0.11
(3,1845)	1:A:47:MET:HE1	1:A:59:LEU:HD21	6	0.11
(3,1845)	1:A:47:MET:HE1	1:A:59:LEU:HD22	6	0.11
(3,1845)	1:A:47:MET:HE1	1:A:59:LEU:HD23	6	0.11
(3,1845)	1:A:47:MET:HE2	1:A:59:LEU:HD11	6	0.11
(3,1845)	1:A:47:MET:HE2	1:A:59:LEU:HD12	6	0.11
(3,1845)	1:A:47:MET:HE2	1:A:59:LEU:HD13	6	0.11
(3,1845)	1:A:47:MET:HE2	1:A:59:LEU:HD21	6	0.11
(3,1845)	1:A:47:MET:HE2	1:A:59:LEU:HD22	6	0.11
(3,1845)	1:A:47:MET:HE2	1:A:59:LEU:HD23	6	0.11
(3,1845)	1:A:47:MET:HE3	1:A:59:LEU:HD11	6	0.11
(3,1845)	1:A:47:MET:HE3	1:A:59:LEU:HD12	6	0.11
(3,1845)	1:A:47:MET:HE3	1:A:59:LEU:HD13	6	0.11
(3,1845)	1:A:47:MET:HE3	1:A:59:LEU:HD21	6	0.11
(3,1845)	1:A:47:MET:HE3	1:A:59:LEU:HD22	6	0.11
(3,1845)	1:A:47:MET:HE3	1:A:59:LEU:HD23	6	0.11
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:124:LEU:HA	15	0.11
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG12	1:A:124:LEU:HA	15	0.11
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:124:LEU:HA	15	0.11
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:124:LEU:HA	15	0.11
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:124:LEU:HA	15	0.11
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:124:LEU:HA	15	0.11
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:124:LEU:HA	20	0.11
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG12	1:A:124:LEU:HA	20	0.11
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:124:LEU:HA	20	0.11
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:124:LEU:HA	20	0.11
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:124:LEU:HA	20	0.11
(3,1834)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:124:LEU:HA	20	0.11
(3,1831)	1:A:46:VAL:HG11	1:A:50:LEU:HG	10	0.11
(3,1831)	1:A:46:VAL:HG12	1:A:50:LEU:HG	10	0.11
(3,1831)	1:A:46:VAL:HG13	1:A:50:LEU:HG	10	0.11
(3,1831)	1:A:46:VAL:HG21	1:A:50:LEU:HG	10	0.11
(3,1831)	1:A:46:VAL:HG22	1:A:50:LEU:HG	10	0.11
(3,1831)	1:A:46:VAL:HG23	1:A:50:LEU:HG	10	0.11
(3,181)	1:A:99:PHE:HA	1:A:100:ASP:H	17	0.11
(3,1800)	1:A:43:LEU:HA	1:A:46:VAL:HG11	12	0.11
(3,1800)	1:A:43:LEU:HA	1:A:46:VAL:HG12	12	0.11
(3,1800)	1:A:43:LEU:HA	1:A:46:VAL:HG13	12	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,1800)	1:A:43:LEU:HA	1:A:46:VAL:HG21	12	0.11
(3,1800)	1:A:43:LEU:HA	1:A:46:VAL:HG22	12	0.11
(3,1800)	1:A:43:LEU:HA	1:A:46:VAL:HG23	12	0.11
(3,1798)	1:A:43:LEU:H	1:A:59:LEU:HD11	16	0.11
(3,1798)	1:A:43:LEU:H	1:A:59:LEU:HD12	16	0.11
(3,1798)	1:A:43:LEU:H	1:A:59:LEU:HD13	16	0.11
(3,1798)	1:A:43:LEU:H	1:A:59:LEU:HD21	16	0.11
(3,1798)	1:A:43:LEU:H	1:A:59:LEU:HD22	16	0.11
(3,1798)	1:A:43:LEU:H	1:A:59:LEU:HD23	16	0.11
(3,1776)	1:A:40:VAL:HG11	1:A:56:LYS:HG2	17	0.11
(3,1776)	1:A:40:VAL:HG11	1:A:56:LYS:HG3	17	0.11
(3,1776)	1:A:40:VAL:HG12	1:A:56:LYS:HG2	17	0.11
(3,1776)	1:A:40:VAL:HG12	1:A:56:LYS:HG3	17	0.11
(3,1776)	1:A:40:VAL:HG13	1:A:56:LYS:HG2	17	0.11
(3,1776)	1:A:40:VAL:HG13	1:A:56:LYS:HG3	17	0.11
(3,1776)	1:A:40:VAL:HG21	1:A:56:LYS:HG2	17	0.11
(3,1776)	1:A:40:VAL:HG21	1:A:56:LYS:HG3	17	0.11
(3,1776)	1:A:40:VAL:HG22	1:A:56:LYS:HG2	17	0.11
(3,1776)	1:A:40:VAL:HG22	1:A:56:LYS:HG3	17	0.11
(3,1776)	1:A:40:VAL:HG23	1:A:56:LYS:HG2	17	0.11
(3,1776)	1:A:40:VAL:HG23	1:A:56:LYS:HG3	17	0.11
(3,1754)	1:A:33:ASP:HB2	1:A:35:GLY:H	20	0.11
(3,1754)	1:A:33:ASP:HB3	1:A:35:GLY:H	20	0.11
(3,1751)	1:A:32:ALA:HB1	1:A:42:GLU:HG2	20	0.11
(3,1751)	1:A:32:ALA:HB1	1:A:42:GLU:HG3	20	0.11
(3,1751)	1:A:32:ALA:HB2	1:A:42:GLU:HG2	20	0.11
(3,1751)	1:A:32:ALA:HB2	1:A:42:GLU:HG3	20	0.11
(3,1751)	1:A:32:ALA:HB3	1:A:42:GLU:HG2	20	0.11
(3,1751)	1:A:32:ALA:HB3	1:A:42:GLU:HG3	20	0.11
(3,1703)	1:A:24:LYS:HA	1:A:24:LYS:HD2	1	0.11
(3,1703)	1:A:24:LYS:HA	1:A:24:LYS:HD3	1	0.11
(3,1703)	1:A:24:LYS:HA	1:A:24:LYS:HD2	17	0.11
(3,1703)	1:A:24:LYS:HA	1:A:24:LYS:HD3	17	0.11
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB2	1:A:83:MET:HE1	2	0.11
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB2	1:A:83:MET:HE2	2	0.11
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB2	1:A:83:MET:HE3	2	0.11
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB3	1:A:83:MET:HE1	2	0.11
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB3	1:A:83:MET:HE2	2	0.11
(3,1700)	1:A:23:PHE:HB3	1:A:83:MET:HE3	2	0.11
(3,1658)	1:A:18:GLU:HG2	1:A:19:MET:HB2	9	0.11
(3,1658)	1:A:18:GLU:HG2	1:A:19:MET:HB3	9	0.11
(3,1658)	1:A:18:GLU:HG3	1:A:19:MET:HB2	9	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,1658)	1:A:18:GLU:HG3	1:A:19:MET:HB3	9	0.11
(3,1658)	1:A:18:GLU:HG2	1:A:19:MET:HB2	17	0.11
(3,1658)	1:A:18:GLU:HG2	1:A:19:MET:HB3	17	0.11
(3,1658)	1:A:18:GLU:HG3	1:A:19:MET:HB2	17	0.11
(3,1658)	1:A:18:GLU:HG3	1:A:19:MET:HB3	17	0.11
(3,1649)	1:A:17:GLU:HG2	1:A:20:ILE:HD11	4	0.11
(3,1649)	1:A:17:GLU:HG2	1:A:20:ILE:HD12	4	0.11
(3,1649)	1:A:17:GLU:HG2	1:A:20:ILE:HD13	4	0.11
(3,1649)	1:A:17:GLU:HG3	1:A:20:ILE:HD11	4	0.11
(3,1649)	1:A:17:GLU:HG3	1:A:20:ILE:HD12	4	0.11
(3,1649)	1:A:17:GLU:HG3	1:A:20:ILE:HD13	4	0.11
(3,1608)	1:A:14:TYR:H	1:A:80:LEU:HD11	23	0.11
(3,1608)	1:A:14:TYR:H	1:A:80:LEU:HD12	23	0.11
(3,1608)	1:A:14:TYR:H	1:A:80:LEU:HD13	23	0.11
(3,1608)	1:A:14:TYR:H	1:A:80:LEU:HD21	23	0.11
(3,1608)	1:A:14:TYR:H	1:A:80:LEU:HD22	23	0.11
(3,1608)	1:A:14:TYR:H	1:A:80:LEU:HD23	23	0.11
(3,1607)	1:A:14:TYR:H	1:A:15:LEU:HD11	2	0.11
(3,1607)	1:A:14:TYR:H	1:A:15:LEU:HD12	2	0.11
(3,1607)	1:A:14:TYR:H	1:A:15:LEU:HD13	2	0.11
(3,1607)	1:A:14:TYR:H	1:A:15:LEU:HD21	2	0.11
(3,1607)	1:A:14:TYR:H	1:A:15:LEU:HD22	2	0.11
(3,1607)	1:A:14:TYR:H	1:A:15:LEU:HD23	2	0.11
(3,1595)	1:A:12:ARG:H	1:A:15:LEU:HD11	11	0.11
(3,1595)	1:A:12:ARG:H	1:A:15:LEU:HD12	11	0.11
(3,1595)	1:A:12:ARG:H	1:A:15:LEU:HD13	11	0.11
(3,1595)	1:A:12:ARG:H	1:A:15:LEU:HD21	11	0.11
(3,1595)	1:A:12:ARG:H	1:A:15:LEU:HD22	11	0.11
(3,1595)	1:A:12:ARG:H	1:A:15:LEU:HD23	11	0.11
(3,1560)	1:A:115:MET:HE1	1:A:119:ALA:HB1	14	0.11
(3,1560)	1:A:115:MET:HE1	1:A:119:ALA:HB2	14	0.11
(3,1560)	1:A:115:MET:HE1	1:A:119:ALA:HB3	14	0.11
(3,1560)	1:A:115:MET:HE2	1:A:119:ALA:HB1	14	0.11
(3,1560)	1:A:115:MET:HE2	1:A:119:ALA:HB2	14	0.11
(3,1560)	1:A:115:MET:HE2	1:A:119:ALA:HB3	14	0.11
(3,1560)	1:A:115:MET:HE3	1:A:119:ALA:HB1	14	0.11
(3,1560)	1:A:115:MET:HE3	1:A:119:ALA:HB2	14	0.11
(3,1560)	1:A:115:MET:HE3	1:A:119:ALA:HB3	14	0.11
(3,1524)	1:A:140:LYS:HA	1:A:140:LYS:HD2	5	0.11
(3,1524)	1:A:140:LYS:HA	1:A:140:LYS:HD3	5	0.11
(3,1524)	1:A:140:LYS:HA	1:A:140:LYS:HD2	18	0.11
(3,1524)	1:A:140:LYS:HA	1:A:140:LYS:HD3	18	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,1524)	1:A:140:LYS:HA	1:A:140:LYS:HD2	22	0.11
(3,1524)	1:A:140:LYS:HA	1:A:140:LYS:HD3	22	0.11
(3,1524)	1:A:140:LYS:HA	1:A:140:LYS:HD2	24	0.11
(3,1524)	1:A:140:LYS:HA	1:A:140:LYS:HD3	24	0.11
(3,1518)	1:A:140:LYS:HD2	1:A:141:GLN:H	6	0.11
(3,1518)	1:A:140:LYS:HD3	1:A:141:GLN:H	6	0.11
(3,1518)	1:A:140:LYS:HD2	1:A:141:GLN:H	18	0.11
(3,1518)	1:A:140:LYS:HD3	1:A:141:GLN:H	18	0.11
(3,1505)	1:A:42:GLU:HA	1:A:42:GLU:HG3	15	0.11
(3,1486)	1:A:54:PRO:HA	1:A:58:GLU:HB2	4	0.11
(3,148)	1:A:39:SER:HB2	1:A:42:GLU:H	16	0.11
(3,148)	1:A:39:SER:HB3	1:A:42:GLU:H	16	0.11
(3,1451)	1:A:88:LYS:HA	1:A:91:ALA:H	24	0.11
(3,1445)	1:A:56:LYS:HA	1:A:59:LEU:HD21	20	0.11
(3,1445)	1:A:56:LYS:HA	1:A:59:LEU:HD22	20	0.11
(3,1445)	1:A:56:LYS:HA	1:A:59:LEU:HD23	20	0.11
(3,1444)	1:A:71:SER:HA	1:A:73:THR:HG21	16	0.11
(3,1444)	1:A:71:SER:HA	1:A:73:THR:HG22	16	0.11
(3,1444)	1:A:71:SER:HA	1:A:73:THR:HG23	16	0.11
(3,1424)	1:A:108:PRO:HB3	1:A:109:PRO:HD3	18	0.11
(3,1414)	1:A:30:PHE:HA	1:A:46:VAL:HB	1	0.11
(3,1392)	1:A:46:VAL:HA	1:A:49:MET:HG2	6	0.11
(3,1392)	1:A:46:VAL:HA	1:A:49:MET:HG2	8	0.11
(3,1378)	1:A:109:PRO:HB3	1:A:111:ARG:H	12	0.11
(3,1376)	1:A:79:PHE:HA	1:A:82:MET:HG2	22	0.11
(3,1376)	1:A:79:PHE:HA	1:A:82:MET:HG3	22	0.11
(3,1370)	1:A:114:ARG:H	1:A:114:ARG:HB3	20	0.11
(3,1332)	1:A:65:GLU:HG3	1:A:66:VAL:HB	2	0.11
(3,1327)	1:A:116:SER:HB3	1:A:119:ALA:H	9	0.11
(3,1318)	1:A:7:GLN:HG3	1:A:10:GLU:HB2	10	0.11
(3,1318)	1:A:7:GLN:HG3	1:A:10:GLU:HB3	10	0.11
(3,1318)	1:A:7:GLN:HG3	1:A:10:GLU:HB2	21	0.11
(3,1318)	1:A:7:GLN:HG3	1:A:10:GLU:HB3	21	0.11
(3,1313)	1:A:7:GLN:HG3	1:A:81:VAL:HG11	20	0.11
(3,1313)	1:A:7:GLN:HG3	1:A:81:VAL:HG12	20	0.11
(3,1313)	1:A:7:GLN:HG3	1:A:81:VAL:HG13	20	0.11
(3,128)	1:A:107:ARG:H	1:A:107:ARG:HD2	18	0.11
(3,128)	1:A:107:ARG:H	1:A:107:ARG:HD3	18	0.11
(3,1206)	1:A:59:LEU:HB2	1:A:63:ILE:HD11	16	0.11
(3,1206)	1:A:59:LEU:HB2	1:A:63:ILE:HD12	16	0.11
(3,1206)	1:A:59:LEU:HB2	1:A:63:ILE:HD13	16	0.11
(3,1195)	1:A:41:LYS:H	1:A:63:ILE:HD11	2	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,1195)	1:A:41:LYS:H	1:A:63:ILE:HD12	2	0.11
(3,1195)	1:A:41:LYS:H	1:A:63:ILE:HD13	2	0.11
(3,1186)	1:A:139:LEU:HB3	1:A:140:LYS:HG2	22	0.11
(3,1186)	1:A:139:LEU:HB3	1:A:140:LYS:HG3	22	0.11
(3,1181)	1:A:56:LYS:HD3	1:A:59:LEU:HB2	8	0.11
(3,1181)	1:A:56:LYS:HD3	1:A:59:LEU:HB2	13	0.11
(3,1167)	1:A:12:ARG:HD2	1:A:20:ILE:HD11	22	0.11
(3,1167)	1:A:12:ARG:HD2	1:A:20:ILE:HD12	22	0.11
(3,1167)	1:A:12:ARG:HD2	1:A:20:ILE:HD13	22	0.11
(3,1167)	1:A:12:ARG:HD3	1:A:20:ILE:HD11	22	0.11
(3,1167)	1:A:12:ARG:HD3	1:A:20:ILE:HD12	22	0.11
(3,1167)	1:A:12:ARG:HD3	1:A:20:ILE:HD13	22	0.11
(3,116)	1:A:100:ASP:HB2	1:A:101:LEU:H	5	0.11
(3,1153)	1:A:114:ARG:HA	1:A:114:ARG:HD3	13	0.11
(3,115)	1:A:39:SER:H	1:A:42:GLU:HB3	13	0.11
(3,115)	1:A:39:SER:H	1:A:42:GLU:HB3	17	0.11
(3,1147)	1:A:38:ILE:H	1:A:74:ILE:HD11	2	0.11
(3,1147)	1:A:38:ILE:H	1:A:74:ILE:HD12	2	0.11
(3,1147)	1:A:38:ILE:H	1:A:74:ILE:HD13	2	0.11
(3,113)	1:A:104:LYS:HA	1:A:106:LYS:H	12	0.11
(3,1120)	1:A:38:ILE:HD11	1:A:43:LEU:HA	17	0.11
(3,1120)	1:A:38:ILE:HD12	1:A:43:LEU:HA	17	0.11
(3,1120)	1:A:38:ILE:HD13	1:A:43:LEU:HA	17	0.11
(3,111)	1:A:100:ASP:HA	1:A:101:LEU:H	7	0.11
(3,1056)	1:A:87:MET:HE1	1:A:135:LEU:HA	10	0.11
(3,1056)	1:A:87:MET:HE2	1:A:135:LEU:HA	10	0.11
(3,1056)	1:A:87:MET:HE3	1:A:135:LEU:HA	10	0.11
(3,1054)	1:A:83:MET:HA	1:A:83:MET:HE1	17	0.11
(3,1054)	1:A:83:MET:HA	1:A:83:MET:HE2	17	0.11
(3,1054)	1:A:83:MET:HA	1:A:83:MET:HE3	17	0.11
(3,1053)	1:A:87:MET:HE1	1:A:134:ASP:HA	14	0.11
(3,1053)	1:A:87:MET:HE2	1:A:134:ASP:HA	14	0.11
(3,1053)	1:A:87:MET:HE3	1:A:134:ASP:HA	14	0.11
(3,1008)	1:A:83:MET:HG2	1:A:120:MET:HE1	24	0.11
(3,1008)	1:A:83:MET:HG2	1:A:120:MET:HE2	24	0.11
(3,1008)	1:A:83:MET:HG2	1:A:120:MET:HE3	24	0.11
(3,1008)	1:A:83:MET:HG3	1:A:120:MET:HE1	24	0.11
(3,1008)	1:A:83:MET:HG3	1:A:120:MET:HE2	24	0.11
(3,1008)	1:A:83:MET:HG3	1:A:120:MET:HE3	24	0.11
(3,1005)	1:A:120:MET:HA	1:A:120:MET:HE1	1	0.11
(3,1005)	1:A:120:MET:HA	1:A:120:MET:HE2	1	0.11
(3,1005)	1:A:120:MET:HA	1:A:120:MET:HE3	1	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(3,1004)	1:A:117:ALA:HA	1:A:120:MET:HE1	3	0.11
(3,1004)	1:A:117:ALA:HA	1:A:120:MET:HE2	3	0.11
(3,1004)	1:A:117:ALA:HA	1:A:120:MET:HE3	3	0.11
(3,1004)	1:A:117:ALA:HA	1:A:120:MET:HE1	4	0.11
(3,1004)	1:A:117:ALA:HA	1:A:120:MET:HE2	4	0.11
(3,1004)	1:A:117:ALA:HA	1:A:120:MET:HE3	4	0.11
(3,10)	1:A:52:GLN:HB2	1:A:53:THR:H	19	0.11

10 Dihedral-angle violation analysis (i)

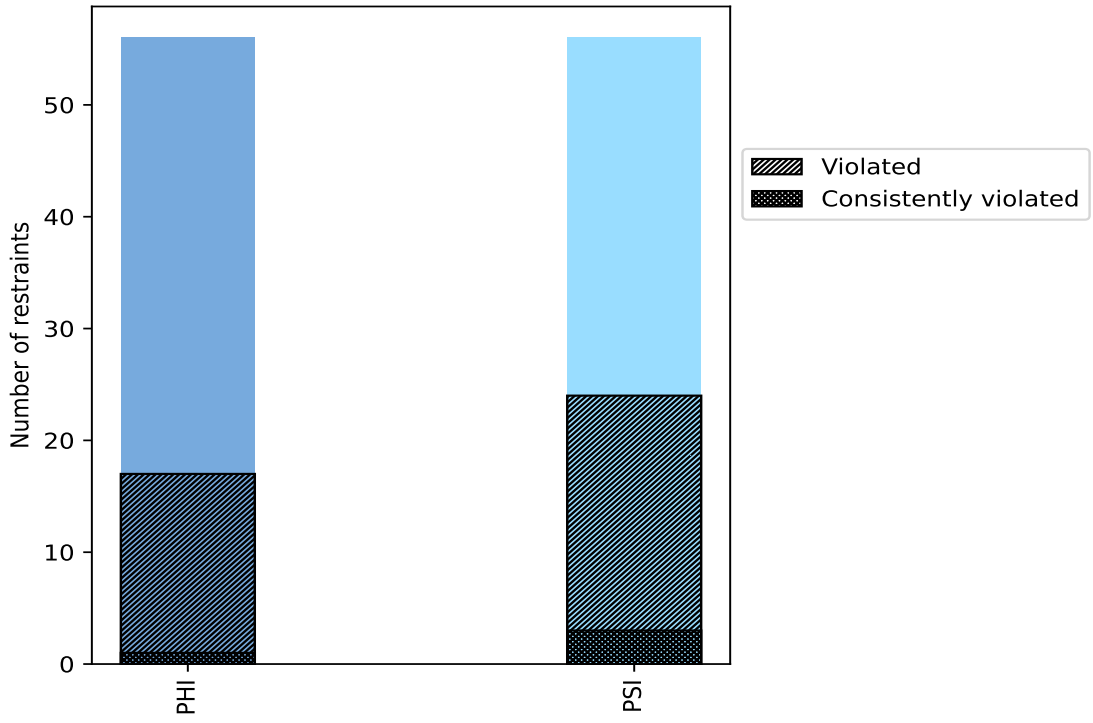
10.1 Summary of dihedral-angle violations (i)

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

Angle type	Count	%[1]	Violated[3]			Consistently Violated[4]		
			Count	%[2]	%[1]	Count	%[2]	%[1]
PHI	56	50.0	17	30.4	15.2	1	1.8	0.9
PSI	56	50.0	24	42.9	21.4	3	5.4	2.7
Total	112	100.0	41	36.6	36.6	4	3.6	3.6

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

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



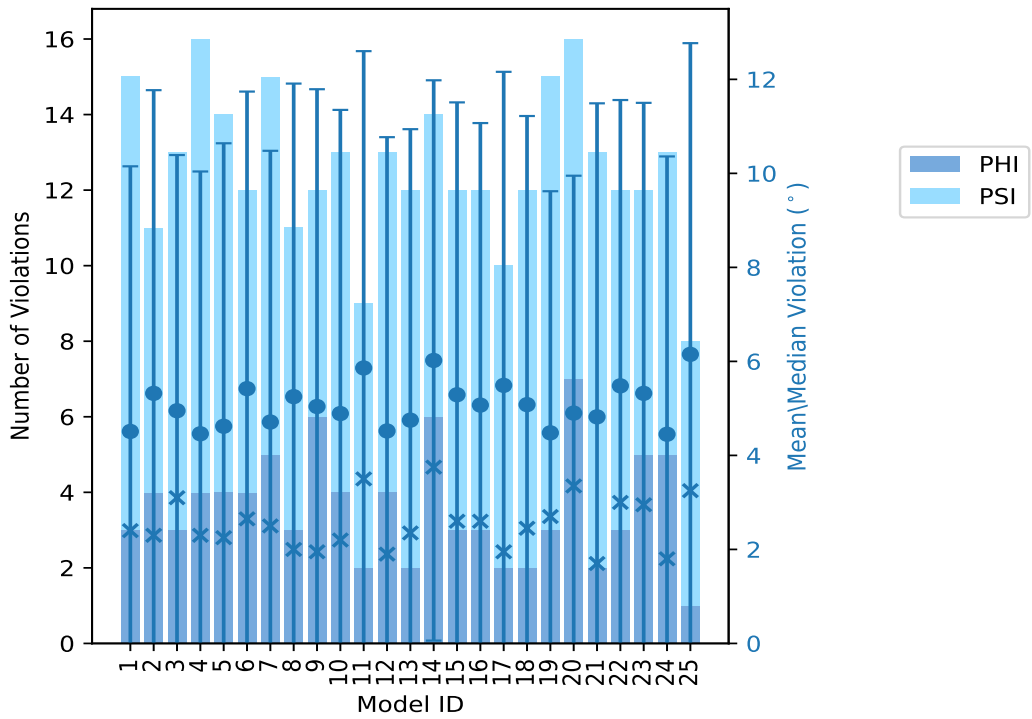
Violated and consistently violated restraints are shown using different hatch patterns in their respective categories

10.2 Dihedral-angle violation statistics for each model (i)

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

Model ID	Number of violations			Mean (°)	Max (°)	SD (°)	Median (°)
	PHI	PSI	Total				
1	3	12	15	4.51	21.3	5.64	2.4
2	4	7	11	5.32	21.7	6.45	2.3
3	3	10	13	4.95	20.6	5.44	3.1
4	4	12	16	4.46	21.8	5.58	2.3
5	4	10	14	4.62	22.2	6.02	2.25
6	4	8	12	5.42	23.0	6.32	2.65
7	5	10	15	4.71	22.0	5.77	2.5
8	3	8	11	5.25	22.8	6.66	2.0
9	6	6	12	5.04	23.7	6.75	1.95
10	4	9	13	4.89	23.0	6.46	2.2
11	2	7	9	5.86	21.8	6.74	3.5
12	4	9	13	4.52	21.5	6.25	1.9
13	2	10	12	4.75	21.7	6.19	2.35
14	6	8	14	6.02	22.4	5.96	3.75
15	3	9	12	5.29	21.6	6.22	2.6
16	3	9	12	5.07	21.5	6.0	2.6
17	2	8	10	5.49	22.2	6.67	1.95
18	2	10	12	5.08	21.8	6.14	2.45
19	3	12	15	4.48	20.3	5.14	2.7
20	7	9	16	4.9	21.1	5.05	3.35
21	2	11	13	4.82	23.8	6.67	1.7
22	3	9	12	5.48	21.6	6.08	3.0
23	5	7	12	5.32	22.6	6.18	2.95
24	5	8	13	4.45	21.3	5.91	1.8
25	1	7	8	6.15	20.4	6.62	3.25

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



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

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

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

Number of violated restraints			Fraction of the ensemble	
PHI	PSI	Total	Count[1]	%
6	6	12	1	4.0
2	1	3	2	8.0
3	3	6	3	12.0
1	0	1	4	16.0
0	1	1	5	20.0
1	0	1	6	24.0
0	2	2	7	28.0
0	2	2	8	32.0
0	0	0	9	36.0
1	1	2	10	40.0
1	0	1	11	44.0

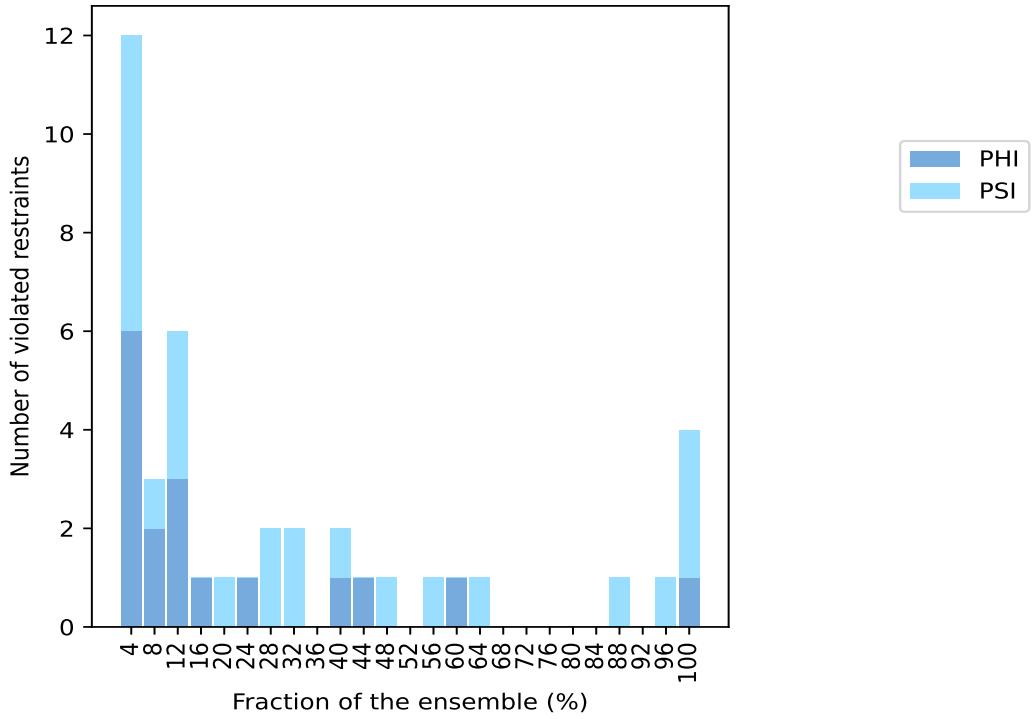
Continued on next page...

Continued from previous page...

Number of violated restraints			Fraction of the ensemble	
PHI	PSI	Total	Count[1]	%
0	1	1	12	48.0
0	0	0	13	52.0
0	1	1	14	56.0
1	0	1	15	60.0
0	1	1	16	64.0
0	0	0	17	68.0
0	0	0	18	72.0
0	0	0	19	76.0
0	0	0	20	80.0
0	0	0	21	84.0
0	1	1	22	88.0
0	0	0	23	92.0
0	1	1	24	96.0
1	3	4	25	100.0

[1] Number of models with violations

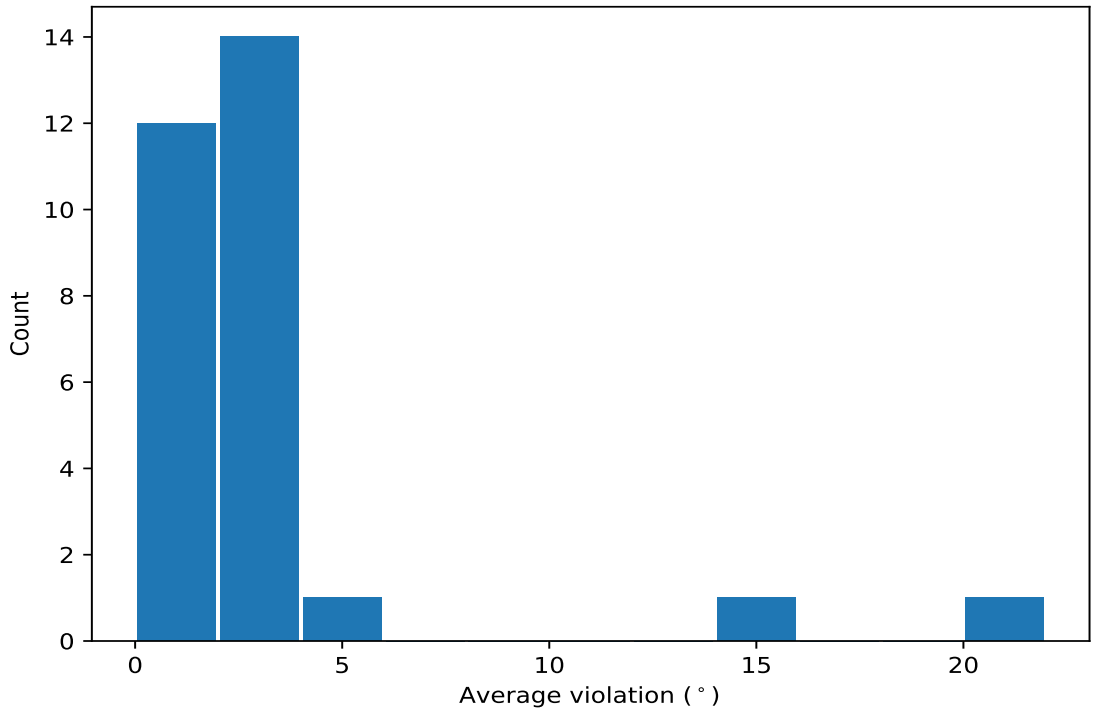
10.3.1 Bar graph : Dihedral-angle Violation statistics for the ensemble (i)



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

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

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



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

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

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models[1]	Mean	SD[2]	Median
(1,70)	1:A:72:GLY:N	1:A:72:GLY:CA	1:A:72:GLY:C	1:A:73:THR:N	25	21.91	0.88	21.8
(1,71)	1:A:72:GLY:C	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	25	14.87	0.95	14.8
(1,74)	1:A:74:ILE:N	1:A:74:ILE:CA	1:A:74:ILE:C	1:A:75:ASP:N	25	3.9	0.56	4.0
(1,28)	1:A:26:ALA:N	1:A:26:ALA:CA	1:A:26:ALA:C	1:A:27:PHE:N	25	3.62	1.02	3.7
(1,38)	1:A:38:ILE:N	1:A:38:ILE:CA	1:A:38:ILE:C	1:A:39:SER:N	24	2.4	0.95	2.4
(1,78)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	1:A:79:PHE:N	22	2.23	0.77	2.05
(1,72)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:ILE:N	16	2.21	0.56	2.0
(1,35)	1:A:36:GLY:C	1:A:37:ASP:N	1:A:37:ASP:CA	1:A:37:ASP:C	15	2.68	1.67	2.3
(1,90)	1:A:84:VAL:N	1:A:84:VAL:CA	1:A:84:VAL:C	1:A:85:ARG:N	14	2.78	1.23	2.5
(1,36)	1:A:37:ASP:N	1:A:37:ASP:CA	1:A:37:ASP:C	1:A:38:ILE:N	12	1.65	0.37	1.65
(1,69)	1:A:71:SER:C	1:A:72:GLY:N	1:A:72:GLY:CA	1:A:72:GLY:C	11	3.0	0.78	3.0
(1,24)	1:A:24:LYS:N	1:A:24:LYS:CA	1:A:24:LYS:C	1:A:25:ALA:N	10	1.72	0.4	1.65
(1,75)	1:A:76:PHE:C	1:A:77:GLU:N	1:A:77:GLU:CA	1:A:77:GLU:C	10	1.61	0.37	1.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

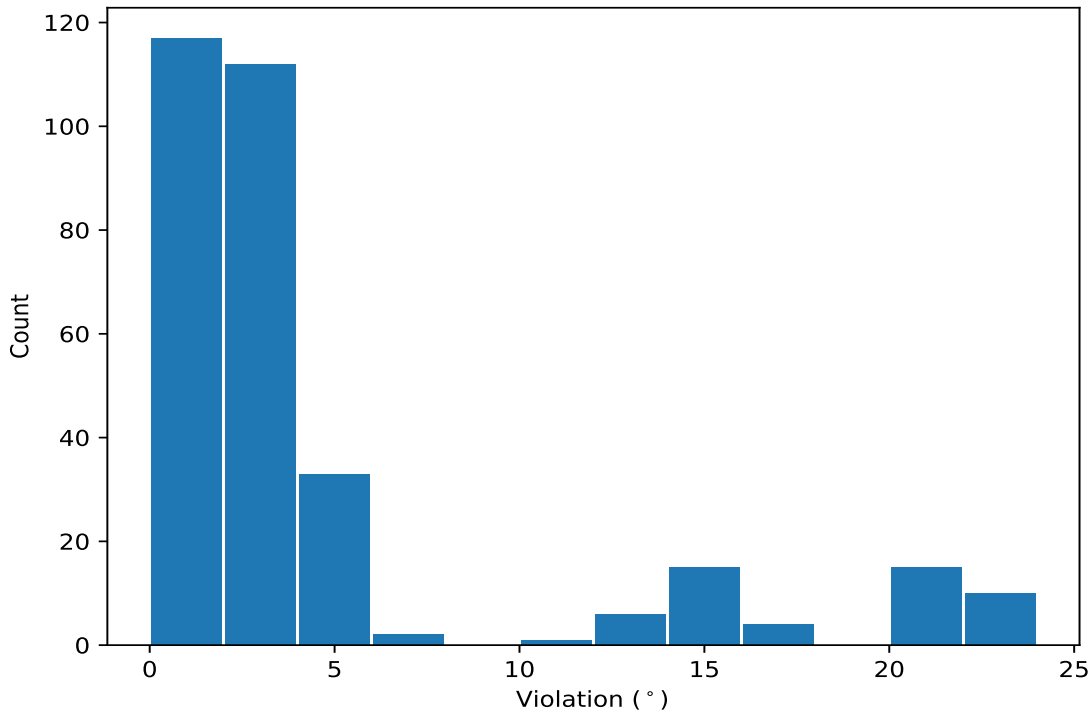
Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Models[1]	Mean	SD[2]	Median
(1,34)	1:A:36:GLY:N	1:A:36:GLY:CA	1:A:36:GLY:C	1:A:37:ASP:N	8	4.55	2.84	3.6
(1,96)	1:A:87:MET:N	1:A:87:MET:CA	1:A:87:MET:C	1:A:88:LYS:N	8	1.8	0.79	1.5
(1,22)	1:A:23:PHE:N	1:A:23:PHE:CA	1:A:23:PHE:C	1:A:24:LYS:N	7	1.91	0.57	1.8
(1,32)	1:A:28:ASP:N	1:A:28:ASP:CA	1:A:28:ASP:C	1:A:29:MET:N	7	1.4	0.26	1.2
(1,91)	1:A:84:VAL:C	1:A:85:ARG:N	1:A:85:ARG:CA	1:A:85:ARG:C	6	2.35	0.55	2.35
(1,26)	1:A:25:ALA:N	1:A:25:ALA:CA	1:A:25:ALA:C	1:A:26:ALA:N	5	2.06	0.85	1.9
(1,87)	1:A:82:MET:C	1:A:83:MET:N	1:A:83:MET:CA	1:A:83:MET:C	4	1.75	0.38	1.55
(1,33)	1:A:35:GLY:C	1:A:36:GLY:N	1:A:36:GLY:CA	1:A:36:GLY:C	3	2.37	0.78	2.4
(1,84)	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	1:A:82:MET:N	3	2.3	0.43	2.1
(1,106)	1:A:121:LEU:N	1:A:121:LEU:CA	1:A:121:LEU:C	1:A:122:LYS:N	3	1.37	0.25	1.3
(1,27)	1:A:25:ALA:C	1:A:26:ALA:N	1:A:26:ALA:CA	1:A:26:ALA:C	3	1.33	0.21	1.3
(1,109)	1:A:122:LYS:C	1:A:123:ALA:N	1:A:123:ALA:CA	1:A:123:ALA:C	3	1.33	0.26	1.2
(1,10)	1:A:12:ARG:N	1:A:12:ARG:CA	1:A:12:ARG:C	1:A:13:SER:N	3	1.3	0.16	1.3
(1,73)	1:A:73:THR:C	1:A:74:ILE:N	1:A:74:ILE:CA	1:A:74:ILE:C	2	3.1	0.4	3.1
(1,94)	1:A:86:GLN:N	1:A:86:GLN:CA	1:A:86:GLN:C	1:A:87:MET:N	2	2.05	0.05	2.05
(1,101)	1:A:118:ASP:C	1:A:119:ALA:N	1:A:119:ALA:CA	1:A:119:ALA:C	2	1.95	0.25	1.95

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

10.5 All violated dihedral-angle restraints (i)

10.5.1 Histogram : Distribution of violations (i)

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



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

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

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,70)	1:A:72:GLY:N	1:A:72:GLY:CA	1:A:72:GLY:C	1:A:73:THR:N	21	23.8
(1,70)	1:A:72:GLY:N	1:A:72:GLY:CA	1:A:72:GLY:C	1:A:73:THR:N	9	23.7
(1,70)	1:A:72:GLY:N	1:A:72:GLY:CA	1:A:72:GLY:C	1:A:73:THR:N	6	23.0
(1,70)	1:A:72:GLY:N	1:A:72:GLY:CA	1:A:72:GLY:C	1:A:73:THR:N	10	23.0
(1,70)	1:A:72:GLY:N	1:A:72:GLY:CA	1:A:72:GLY:C	1:A:73:THR:N	8	22.8
(1,70)	1:A:72:GLY:N	1:A:72:GLY:CA	1:A:72:GLY:C	1:A:73:THR:N	23	22.6
(1,70)	1:A:72:GLY:N	1:A:72:GLY:CA	1:A:72:GLY:C	1:A:73:THR:N	14	22.4
(1,70)	1:A:72:GLY:N	1:A:72:GLY:CA	1:A:72:GLY:C	1:A:73:THR:N	5	22.2
(1,70)	1:A:72:GLY:N	1:A:72:GLY:CA	1:A:72:GLY:C	1:A:73:THR:N	17	22.2
(1,70)	1:A:72:GLY:N	1:A:72:GLY:CA	1:A:72:GLY:C	1:A:73:THR:N	7	22.0
(1,70)	1:A:72:GLY:N	1:A:72:GLY:CA	1:A:72:GLY:C	1:A:73:THR:N	4	21.8
(1,70)	1:A:72:GLY:N	1:A:72:GLY:CA	1:A:72:GLY:C	1:A:73:THR:N	11	21.8
(1,70)	1:A:72:GLY:N	1:A:72:GLY:CA	1:A:72:GLY:C	1:A:73:THR:N	18	21.8
(1,70)	1:A:72:GLY:N	1:A:72:GLY:CA	1:A:72:GLY:C	1:A:73:THR:N	2	21.7
(1,70)	1:A:72:GLY:N	1:A:72:GLY:CA	1:A:72:GLY:C	1:A:73:THR:N	13	21.7
(1,70)	1:A:72:GLY:N	1:A:72:GLY:CA	1:A:72:GLY:C	1:A:73:THR:N	15	21.6
(1,70)	1:A:72:GLY:N	1:A:72:GLY:CA	1:A:72:GLY:C	1:A:73:THR:N	22	21.6
(1,70)	1:A:72:GLY:N	1:A:72:GLY:CA	1:A:72:GLY:C	1:A:73:THR:N	12	21.5
(1,70)	1:A:72:GLY:N	1:A:72:GLY:CA	1:A:72:GLY:C	1:A:73:THR:N	16	21.5
(1,70)	1:A:72:GLY:N	1:A:72:GLY:CA	1:A:72:GLY:C	1:A:73:THR:N	1	21.3
(1,70)	1:A:72:GLY:N	1:A:72:GLY:CA	1:A:72:GLY:C	1:A:73:THR:N	24	21.3
(1,70)	1:A:72:GLY:N	1:A:72:GLY:CA	1:A:72:GLY:C	1:A:73:THR:N	20	21.1
(1,70)	1:A:72:GLY:N	1:A:72:GLY:CA	1:A:72:GLY:C	1:A:73:THR:N	3	20.6
(1,70)	1:A:72:GLY:N	1:A:72:GLY:CA	1:A:72:GLY:C	1:A:73:THR:N	25	20.4
(1,70)	1:A:72:GLY:N	1:A:72:GLY:CA	1:A:72:GLY:C	1:A:73:THR:N	19	20.3
(1,71)	1:A:72:GLY:C	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	12	16.2
(1,71)	1:A:72:GLY:C	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	10	16.1
(1,71)	1:A:72:GLY:C	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	14	16.0
(1,71)	1:A:72:GLY:C	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	15	16.0
(1,71)	1:A:72:GLY:C	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	21	15.8
(1,71)	1:A:72:GLY:C	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	4	15.7
(1,71)	1:A:72:GLY:C	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	22	15.7
(1,71)	1:A:72:GLY:C	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1	15.6
(1,71)	1:A:72:GLY:C	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	5	15.6
(1,71)	1:A:72:GLY:C	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	7	15.6
(1,71)	1:A:72:GLY:C	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	9	15.5
(1,71)	1:A:72:GLY:C	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	2	15.2
(1,71)	1:A:72:GLY:C	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	8	14.8
(1,71)	1:A:72:GLY:C	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	18	14.8
(1,71)	1:A:72:GLY:C	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	6	14.6
(1,71)	1:A:72:GLY:C	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	13	14.6
(1,71)	1:A:72:GLY:C	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	16	14.2
(1,71)	1:A:72:GLY:C	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	17	14.2
(1,71)	1:A:72:GLY:C	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	24	14.0
(1,71)	1:A:72:GLY:C	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	23	13.9
(1,71)	1:A:72:GLY:C	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	25	13.9
(1,71)	1:A:72:GLY:C	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	11	13.8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,71)	1:A:72:GLY:C	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	19	13.4
(1,71)	1:A:72:GLY:C	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	3	13.3
(1,71)	1:A:72:GLY:C	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	20	13.2
(1,34)	1:A:36:GLY:N	1:A:36:GLY:CA	1:A:36:GLY:C	1:A:37:ASP:N	14	10.0
(1,34)	1:A:36:GLY:N	1:A:36:GLY:CA	1:A:36:GLY:C	1:A:37:ASP:N	20	7.7
(1,35)	1:A:36:GLY:C	1:A:37:ASP:N	1:A:37:ASP:CA	1:A:37:ASP:C	14	7.2
(1,34)	1:A:36:GLY:N	1:A:36:GLY:CA	1:A:36:GLY:C	1:A:37:ASP:N	23	5.8
(1,74)	1:A:74:ILE:N	1:A:74:ILE:CA	1:A:74:ILE:C	1:A:75:ASP:N	7	5.2
(1,28)	1:A:26:ALA:N	1:A:26:ALA:CA	1:A:26:ALA:C	1:A:27:PHE:N	22	5.1
(1,28)	1:A:26:ALA:N	1:A:26:ALA:CA	1:A:26:ALA:C	1:A:27:PHE:N	24	5.1
(1,35)	1:A:36:GLY:C	1:A:37:ASP:N	1:A:37:ASP:CA	1:A:37:ASP:C	20	5.0
(1,90)	1:A:84:VAL:N	1:A:84:VAL:CA	1:A:84:VAL:C	1:A:85:ARG:N	6	4.9
(1,90)	1:A:84:VAL:N	1:A:84:VAL:CA	1:A:84:VAL:C	1:A:85:ARG:N	7	4.9
(1,74)	1:A:74:ILE:N	1:A:74:ILE:CA	1:A:74:ILE:C	1:A:75:ASP:N	6	4.9
(1,28)	1:A:26:ALA:N	1:A:26:ALA:CA	1:A:26:ALA:C	1:A:27:PHE:N	2	4.9
(1,28)	1:A:26:ALA:N	1:A:26:ALA:CA	1:A:26:ALA:C	1:A:27:PHE:N	3	4.9
(1,35)	1:A:36:GLY:C	1:A:37:ASP:N	1:A:37:ASP:CA	1:A:37:ASP:C	19	4.7
(1,28)	1:A:26:ALA:N	1:A:26:ALA:CA	1:A:26:ALA:C	1:A:27:PHE:N	17	4.7
(1,74)	1:A:74:ILE:N	1:A:74:ILE:CA	1:A:74:ILE:C	1:A:75:ASP:N	3	4.6
(1,28)	1:A:26:ALA:N	1:A:26:ALA:CA	1:A:26:ALA:C	1:A:27:PHE:N	14	4.6
(1,28)	1:A:26:ALA:N	1:A:26:ALA:CA	1:A:26:ALA:C	1:A:27:PHE:N	8	4.5
(1,28)	1:A:26:ALA:N	1:A:26:ALA:CA	1:A:26:ALA:C	1:A:27:PHE:N	21	4.5
(1,90)	1:A:84:VAL:N	1:A:84:VAL:CA	1:A:84:VAL:C	1:A:85:ARG:N	4	4.4
(1,74)	1:A:74:ILE:N	1:A:74:ILE:CA	1:A:74:ILE:C	1:A:75:ASP:N	15	4.4
(1,74)	1:A:74:ILE:N	1:A:74:ILE:CA	1:A:74:ILE:C	1:A:75:ASP:N	2	4.3
(1,74)	1:A:74:ILE:N	1:A:74:ILE:CA	1:A:74:ILE:C	1:A:75:ASP:N	5	4.3
(1,74)	1:A:74:ILE:N	1:A:74:ILE:CA	1:A:74:ILE:C	1:A:75:ASP:N	21	4.3
(1,38)	1:A:38:ILE:N	1:A:38:ILE:CA	1:A:38:ILE:C	1:A:39:SER:N	19	4.3
(1,74)	1:A:74:ILE:N	1:A:74:ILE:CA	1:A:74:ILE:C	1:A:75:ASP:N	4	4.2
(1,74)	1:A:74:ILE:N	1:A:74:ILE:CA	1:A:74:ILE:C	1:A:75:ASP:N	14	4.2
(1,69)	1:A:71:SER:C	1:A:72:GLY:N	1:A:72:GLY:CA	1:A:72:GLY:C	15	4.2
(1,28)	1:A:26:ALA:N	1:A:26:ALA:CA	1:A:26:ALA:C	1:A:27:PHE:N	16	4.2
(1,38)	1:A:38:ILE:N	1:A:38:ILE:CA	1:A:38:ILE:C	1:A:39:SER:N	16	4.1
(1,34)	1:A:36:GLY:N	1:A:36:GLY:CA	1:A:36:GLY:C	1:A:37:ASP:N	19	4.1
(1,90)	1:A:84:VAL:N	1:A:84:VAL:CA	1:A:84:VAL:C	1:A:85:ARG:N	1	4.0
(1,74)	1:A:74:ILE:N	1:A:74:ILE:CA	1:A:74:ILE:C	1:A:75:ASP:N	12	4.0
(1,74)	1:A:74:ILE:N	1:A:74:ILE:CA	1:A:74:ILE:C	1:A:75:ASP:N	16	4.0
(1,74)	1:A:74:ILE:N	1:A:74:ILE:CA	1:A:74:ILE:C	1:A:75:ASP:N	18	4.0
(1,74)	1:A:74:ILE:N	1:A:74:ILE:CA	1:A:74:ILE:C	1:A:75:ASP:N	23	4.0
(1,74)	1:A:74:ILE:N	1:A:74:ILE:CA	1:A:74:ILE:C	1:A:75:ASP:N	11	3.9
(1,28)	1:A:26:ALA:N	1:A:26:ALA:CA	1:A:26:ALA:C	1:A:27:PHE:N	10	3.9
(1,28)	1:A:26:ALA:N	1:A:26:ALA:CA	1:A:26:ALA:C	1:A:27:PHE:N	11	3.9
(1,28)	1:A:26:ALA:N	1:A:26:ALA:CA	1:A:26:ALA:C	1:A:27:PHE:N	18	3.9
(1,96)	1:A:87:MET:N	1:A:87:MET:CA	1:A:87:MET:C	1:A:88:LYS:N	3	3.8
(1,74)	1:A:74:ILE:N	1:A:74:ILE:CA	1:A:74:ILE:C	1:A:75:ASP:N	19	3.8
(1,74)	1:A:74:ILE:N	1:A:74:ILE:CA	1:A:74:ILE:C	1:A:75:ASP:N	25	3.8
(1,69)	1:A:71:SER:C	1:A:72:GLY:N	1:A:72:GLY:CA	1:A:72:GLY:C	14	3.8
(1,38)	1:A:38:ILE:N	1:A:38:ILE:CA	1:A:38:ILE:C	1:A:39:SER:N	1	3.8
(1,78)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	1:A:79:PHE:N	14	3.7
(1,69)	1:A:71:SER:C	1:A:72:GLY:N	1:A:72:GLY:CA	1:A:72:GLY:C	1	3.7
(1,38)	1:A:38:ILE:N	1:A:38:ILE:CA	1:A:38:ILE:C	1:A:39:SER:N	10	3.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,28)	1:A:26:ALA:N	1:A:26:ALA:CA	1:A:26:ALA:C	1:A:27:PHE:N	25	3.7
(1,74)	1:A:74:ILE:N	1:A:74:ILE:CA	1:A:74:ILE:C	1:A:75:ASP:N	17	3.5
(1,73)	1:A:73:THR:C	1:A:74:ILE:N	1:A:74:ILE:CA	1:A:74:ILE:C	11	3.5
(1,69)	1:A:71:SER:C	1:A:72:GLY:N	1:A:72:GLY:CA	1:A:72:GLY:C	22	3.5
(1,28)	1:A:26:ALA:N	1:A:26:ALA:CA	1:A:26:ALA:C	1:A:27:PHE:N	9	3.5
(1,28)	1:A:26:ALA:N	1:A:26:ALA:CA	1:A:26:ALA:C	1:A:27:PHE:N	20	3.5
(1,78)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	1:A:79:PHE:N	20	3.4
(1,78)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	1:A:79:PHE:N	23	3.4
(1,74)	1:A:74:ILE:N	1:A:74:ILE:CA	1:A:74:ILE:C	1:A:75:ASP:N	9	3.4
(1,74)	1:A:74:ILE:N	1:A:74:ILE:CA	1:A:74:ILE:C	1:A:75:ASP:N	10	3.4
(1,74)	1:A:74:ILE:N	1:A:74:ILE:CA	1:A:74:ILE:C	1:A:75:ASP:N	20	3.4
(1,74)	1:A:74:ILE:N	1:A:74:ILE:CA	1:A:74:ILE:C	1:A:75:ASP:N	24	3.4
(1,35)	1:A:36:GLY:C	1:A:37:ASP:N	1:A:37:ASP:CA	1:A:37:ASP:C	22	3.4
(1,28)	1:A:26:ALA:N	1:A:26:ALA:CA	1:A:26:ALA:C	1:A:27:PHE:N	23	3.4
(1,26)	1:A:25:ALA:N	1:A:25:ALA:CA	1:A:25:ALA:C	1:A:26:ALA:N	20	3.4
(1,78)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	1:A:79:PHE:N	3	3.3
(1,74)	1:A:74:ILE:N	1:A:74:ILE:CA	1:A:74:ILE:C	1:A:75:ASP:N	1	3.3
(1,38)	1:A:38:ILE:N	1:A:38:ILE:CA	1:A:38:ILE:C	1:A:39:SER:N	5	3.3
(1,33)	1:A:35:GLY:C	1:A:36:GLY:N	1:A:36:GLY:CA	1:A:36:GLY:C	20	3.3
(1,91)	1:A:84:VAL:C	1:A:85:ARG:N	1:A:85:ARG:CA	1:A:85:ARG:C	4	3.2
(1,78)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	1:A:79:PHE:N	18	3.2
(1,72)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:ILE:N	15	3.2
(1,69)	1:A:71:SER:C	1:A:72:GLY:N	1:A:72:GLY:CA	1:A:72:GLY:C	4	3.2
(1,38)	1:A:38:ILE:N	1:A:38:ILE:CA	1:A:38:ILE:C	1:A:39:SER:N	7	3.2
(1,74)	1:A:74:ILE:N	1:A:74:ILE:CA	1:A:74:ILE:C	1:A:75:ASP:N	8	3.1
(1,74)	1:A:74:ILE:N	1:A:74:ILE:CA	1:A:74:ILE:C	1:A:75:ASP:N	13	3.1
(1,72)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:ILE:N	3	3.1
(1,34)	1:A:36:GLY:N	1:A:36:GLY:CA	1:A:36:GLY:C	1:A:37:ASP:N	22	3.1
(1,28)	1:A:26:ALA:N	1:A:26:ALA:CA	1:A:26:ALA:C	1:A:27:PHE:N	5	3.1
(1,28)	1:A:26:ALA:N	1:A:26:ALA:CA	1:A:26:ALA:C	1:A:27:PHE:N	6	3.1
(1,72)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:ILE:N	19	3.0
(1,69)	1:A:71:SER:C	1:A:72:GLY:N	1:A:72:GLY:CA	1:A:72:GLY:C	7	3.0
(1,69)	1:A:71:SER:C	1:A:72:GLY:N	1:A:72:GLY:CA	1:A:72:GLY:C	21	3.0
(1,84)	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	1:A:82:MET:N	3	2.9
(1,74)	1:A:74:ILE:N	1:A:74:ILE:CA	1:A:74:ILE:C	1:A:75:ASP:N	22	2.9
(1,69)	1:A:71:SER:C	1:A:72:GLY:N	1:A:72:GLY:CA	1:A:72:GLY:C	12	2.9
(1,38)	1:A:38:ILE:N	1:A:38:ILE:CA	1:A:38:ILE:C	1:A:39:SER:N	14	2.9
(1,91)	1:A:84:VAL:C	1:A:85:ARG:N	1:A:85:ARG:CA	1:A:85:ARG:C	6	2.8
(1,90)	1:A:84:VAL:N	1:A:84:VAL:CA	1:A:84:VAL:C	1:A:85:ARG:N	13	2.8
(1,78)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	1:A:79:PHE:N	22	2.8
(1,72)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:ILE:N	16	2.8
(1,38)	1:A:38:ILE:N	1:A:38:ILE:CA	1:A:38:ILE:C	1:A:39:SER:N	25	2.8
(1,28)	1:A:26:ALA:N	1:A:26:ALA:CA	1:A:26:ALA:C	1:A:27:PHE:N	4	2.8
(1,90)	1:A:84:VAL:N	1:A:84:VAL:CA	1:A:84:VAL:C	1:A:85:ARG:N	5	2.7
(1,78)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	1:A:79:PHE:N	10	2.7
(1,73)	1:A:73:THR:C	1:A:74:ILE:N	1:A:74:ILE:CA	1:A:74:ILE:C	20	2.7
(1,72)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:ILE:N	14	2.7
(1,38)	1:A:38:ILE:N	1:A:38:ILE:CA	1:A:38:ILE:C	1:A:39:SER:N	15	2.7
(1,28)	1:A:26:ALA:N	1:A:26:ALA:CA	1:A:26:ALA:C	1:A:27:PHE:N	19	2.7
(1,26)	1:A:25:ALA:N	1:A:25:ALA:CA	1:A:25:ALA:C	1:A:26:ALA:N	1	2.6
(1,22)	1:A:23:PHE:N	1:A:23:PHE:CA	1:A:23:PHE:C	1:A:24:LYS:N	7	2.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,91)	1:A:84:VAL:C	1:A:85:ARG:N	1:A:85:ARG:CA	1:A:85:ARG:C	2	2.5
(1,90)	1:A:84:VAL:N	1:A:84:VAL:CA	1:A:84:VAL:C	1:A:85:ARG:N	20	2.5
(1,90)	1:A:84:VAL:N	1:A:84:VAL:CA	1:A:84:VAL:C	1:A:85:ARG:N	22	2.5
(1,78)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	1:A:79:PHE:N	13	2.5
(1,75)	1:A:76:PHE:C	1:A:77:GLU:N	1:A:77:GLU:CA	1:A:77:GLU:C	15	2.5
(1,38)	1:A:38:ILE:N	1:A:38:ILE:CA	1:A:38:ILE:C	1:A:39:SER:N	20	2.5
(1,35)	1:A:36:GLY:C	1:A:37:ASP:N	1:A:37:ASP:CA	1:A:37:ASP:C	6	2.5
(1,35)	1:A:36:GLY:C	1:A:37:ASP:N	1:A:37:ASP:CA	1:A:37:ASP:C	23	2.5
(1,28)	1:A:26:ALA:N	1:A:26:ALA:CA	1:A:26:ALA:C	1:A:27:PHE:N	7	2.5
(1,24)	1:A:24:LYS:N	1:A:24:LYS:CA	1:A:24:LYS:C	1:A:25:ALA:N	18	2.5
(1,22)	1:A:23:PHE:N	1:A:23:PHE:CA	1:A:23:PHE:C	1:A:24:LYS:N	5	2.5
(1,22)	1:A:23:PHE:N	1:A:23:PHE:CA	1:A:23:PHE:C	1:A:24:LYS:N	14	2.5
(1,87)	1:A:82:MET:C	1:A:83:MET:N	1:A:83:MET:CA	1:A:83:MET:C	16	2.4
(1,38)	1:A:38:ILE:N	1:A:38:ILE:CA	1:A:38:ILE:C	1:A:39:SER:N	4	2.4
(1,38)	1:A:38:ILE:N	1:A:38:ILE:CA	1:A:38:ILE:C	1:A:39:SER:N	13	2.4
(1,38)	1:A:38:ILE:N	1:A:38:ILE:CA	1:A:38:ILE:C	1:A:39:SER:N	18	2.4
(1,35)	1:A:36:GLY:C	1:A:37:ASP:N	1:A:37:ASP:CA	1:A:37:ASP:C	1	2.4
(1,33)	1:A:35:GLY:C	1:A:36:GLY:N	1:A:36:GLY:CA	1:A:36:GLY:C	23	2.4
(1,28)	1:A:26:ALA:N	1:A:26:ALA:CA	1:A:26:ALA:C	1:A:27:PHE:N	12	2.4
(1,28)	1:A:26:ALA:N	1:A:26:ALA:CA	1:A:26:ALA:C	1:A:27:PHE:N	15	2.4
(1,78)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	1:A:79:PHE:N	19	2.3
(1,72)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:ILE:N	13	2.3
(1,36)	1:A:37:ASP:N	1:A:37:ASP:CA	1:A:37:ASP:C	1:A:38:ILE:N	2	2.3
(1,35)	1:A:36:GLY:C	1:A:37:ASP:N	1:A:37:ASP:CA	1:A:37:ASP:C	24	2.3
(1,24)	1:A:24:LYS:N	1:A:24:LYS:CA	1:A:24:LYS:C	1:A:25:ALA:N	9	2.3
(1,91)	1:A:84:VAL:C	1:A:85:ARG:N	1:A:85:ARG:CA	1:A:85:ARG:C	7	2.2
(1,90)	1:A:84:VAL:N	1:A:84:VAL:CA	1:A:84:VAL:C	1:A:85:ARG:N	21	2.2
(1,72)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:ILE:N	7	2.2
(1,38)	1:A:38:ILE:N	1:A:38:ILE:CA	1:A:38:ILE:C	1:A:39:SER:N	8	2.2
(1,36)	1:A:37:ASP:N	1:A:37:ASP:CA	1:A:37:ASP:C	1:A:38:ILE:N	4	2.2
(1,34)	1:A:36:GLY:N	1:A:36:GLY:CA	1:A:36:GLY:C	1:A:37:ASP:N	1	2.2
(1,101)	1:A:118:ASP:C	1:A:119:ALA:N	1:A:119:ALA:CA	1:A:119:ALA:C	10	2.2
(1,94)	1:A:86:GLN:N	1:A:86:GLN:CA	1:A:86:GLN:C	1:A:87:MET:N	24	2.1
(1,84)	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	1:A:82:MET:N	18	2.1
(1,78)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	1:A:79:PHE:N	6	2.1
(1,78)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	1:A:79:PHE:N	11	2.1
(1,69)	1:A:71:SER:C	1:A:72:GLY:N	1:A:72:GLY:CA	1:A:72:GLY:C	2	2.1
(1,38)	1:A:38:ILE:N	1:A:38:ILE:CA	1:A:38:ILE:C	1:A:39:SER:N	23	2.1
(1,36)	1:A:37:ASP:N	1:A:37:ASP:CA	1:A:37:ASP:C	1:A:38:ILE:N	19	2.1
(1,35)	1:A:36:GLY:C	1:A:37:ASP:N	1:A:37:ASP:CA	1:A:37:ASP:C	17	2.1
(1,96)	1:A:87:MET:N	1:A:87:MET:CA	1:A:87:MET:C	1:A:88:LYS:N	6	2.0
(1,94)	1:A:86:GLN:N	1:A:86:GLN:CA	1:A:86:GLN:C	1:A:87:MET:N	4	2.0
(1,90)	1:A:84:VAL:N	1:A:84:VAL:CA	1:A:84:VAL:C	1:A:85:ARG:N	25	2.0
(1,78)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	1:A:79:PHE:N	8	2.0
(1,72)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:ILE:N	5	2.0
(1,72)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:ILE:N	8	2.0
(1,72)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:ILE:N	22	2.0
(1,69)	1:A:71:SER:C	1:A:72:GLY:N	1:A:72:GLY:CA	1:A:72:GLY:C	9	2.0
(1,24)	1:A:24:LYS:N	1:A:24:LYS:CA	1:A:24:LYS:C	1:A:25:ALA:N	2	2.0
(1,84)	1:A:81:VAL:N	1:A:81:VAL:CA	1:A:81:VAL:C	1:A:82:MET:N	16	1.9
(1,78)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	1:A:79:PHE:N	7	1.9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,78)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	1:A:79:PHE:N	12	1.9
(1,78)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	1:A:79:PHE:N	15	1.9
(1,75)	1:A:76:PHE:C	1:A:77:GLU:N	1:A:77:GLU:CA	1:A:77:GLU:C	9	1.9
(1,72)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:ILE:N	12	1.9
(1,38)	1:A:38:ILE:N	1:A:38:ILE:CA	1:A:38:ILE:C	1:A:39:SER:N	3	1.9
(1,26)	1:A:25:ALA:N	1:A:25:ALA:CA	1:A:25:ALA:C	1:A:26:ALA:N	8	1.9
(1,91)	1:A:84:VAL:C	1:A:85:ARG:N	1:A:85:ARG:CA	1:A:85:ARG:C	5	1.8
(1,90)	1:A:84:VAL:N	1:A:84:VAL:CA	1:A:84:VAL:C	1:A:85:ARG:N	17	1.8
(1,78)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	1:A:79:PHE:N	17	1.8
(1,75)	1:A:76:PHE:C	1:A:77:GLU:N	1:A:77:GLU:CA	1:A:77:GLU:C	20	1.8
(1,72)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:ILE:N	4	1.8
(1,72)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:ILE:N	10	1.8
(1,36)	1:A:37:ASP:N	1:A:37:ASP:CA	1:A:37:ASP:C	1:A:38:ILE:N	15	1.8
(1,35)	1:A:36:GLY:C	1:A:37:ASP:N	1:A:37:ASP:CA	1:A:37:ASP:C	9	1.8
(1,34)	1:A:36:GLY:N	1:A:36:GLY:CA	1:A:36:GLY:C	1:A:37:ASP:N	17	1.8
(1,31)	1:A:27:PHE:C	1:A:28:ASP:N	1:A:28:ASP:CA	1:A:28:ASP:C	24	1.8
(1,22)	1:A:23:PHE:N	1:A:23:PHE:CA	1:A:23:PHE:C	1:A:24:LYS:N	22	1.8
(1,78)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	1:A:79:PHE:N	9	1.7
(1,38)	1:A:38:ILE:N	1:A:38:ILE:CA	1:A:38:ILE:C	1:A:39:SER:N	6	1.7
(1,36)	1:A:37:ASP:N	1:A:37:ASP:CA	1:A:37:ASP:C	1:A:38:ILE:N	5	1.7
(1,36)	1:A:37:ASP:N	1:A:37:ASP:CA	1:A:37:ASP:C	1:A:38:ILE:N	16	1.7
(1,34)	1:A:36:GLY:N	1:A:36:GLY:CA	1:A:36:GLY:C	1:A:37:ASP:N	6	1.7
(1,32)	1:A:28:ASP:N	1:A:28:ASP:CA	1:A:28:ASP:C	1:A:29:MET:N	4	1.7
(1,32)	1:A:28:ASP:N	1:A:28:ASP:CA	1:A:28:ASP:C	1:A:29:MET:N	13	1.7
(1,32)	1:A:28:ASP:N	1:A:28:ASP:CA	1:A:28:ASP:C	1:A:29:MET:N	18	1.7
(1,28)	1:A:26:ALA:N	1:A:26:ALA:CA	1:A:26:ALA:C	1:A:27:PHE:N	1	1.7
(1,24)	1:A:24:LYS:N	1:A:24:LYS:CA	1:A:24:LYS:C	1:A:25:ALA:N	8	1.7
(1,24)	1:A:24:LYS:N	1:A:24:LYS:CA	1:A:24:LYS:C	1:A:25:ALA:N	21	1.7
(1,109)	1:A:122:LYS:C	1:A:123:ALA:N	1:A:123:ALA:CA	1:A:123:ALA:C	20	1.7
(1,106)	1:A:121:LEU:N	1:A:121:LEU:CA	1:A:121:LEU:C	1:A:122:LYS:N	18	1.7
(1,101)	1:A:118:ASP:C	1:A:119:ALA:N	1:A:119:ALA:CA	1:A:119:ALA:C	6	1.7
(1,96)	1:A:87:MET:N	1:A:87:MET:CA	1:A:87:MET:C	1:A:88:LYS:N	4	1.6
(1,91)	1:A:84:VAL:C	1:A:85:ARG:N	1:A:85:ARG:CA	1:A:85:ARG:C	9	1.6
(1,90)	1:A:84:VAL:N	1:A:84:VAL:CA	1:A:84:VAL:C	1:A:85:ARG:N	12	1.6
(1,87)	1:A:82:MET:C	1:A:83:MET:N	1:A:83:MET:CA	1:A:83:MET:C	9	1.6
(1,82)	1:A:80:LEU:N	1:A:80:LEU:CA	1:A:80:LEU:C	1:A:81:VAL:N	15	1.6
(1,8)	1:A:11:ALA:N	1:A:11:ALA:CA	1:A:11:ALA:C	1:A:12:ARG:N	3	1.6
(1,75)	1:A:76:PHE:C	1:A:77:GLU:N	1:A:77:GLU:CA	1:A:77:GLU:C	3	1.6
(1,75)	1:A:76:PHE:C	1:A:77:GLU:N	1:A:77:GLU:CA	1:A:77:GLU:C	4	1.6
(1,75)	1:A:76:PHE:C	1:A:77:GLU:N	1:A:77:GLU:CA	1:A:77:GLU:C	10	1.6
(1,72)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:ILE:N	1	1.6
(1,72)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:ILE:N	18	1.6
(1,69)	1:A:71:SER:C	1:A:72:GLY:N	1:A:72:GLY:CA	1:A:72:GLY:C	5	1.6
(1,38)	1:A:38:ILE:N	1:A:38:ILE:CA	1:A:38:ILE:C	1:A:39:SER:N	17	1.6
(1,36)	1:A:37:ASP:N	1:A:37:ASP:CA	1:A:37:ASP:C	1:A:38:ILE:N	13	1.6
(1,28)	1:A:26:ALA:N	1:A:26:ALA:CA	1:A:26:ALA:C	1:A:27:PHE:N	13	1.6
(1,27)	1:A:25:ALA:C	1:A:26:ALA:N	1:A:26:ALA:CA	1:A:26:ALA:C	20	1.6
(1,24)	1:A:24:LYS:N	1:A:24:LYS:CA	1:A:24:LYS:C	1:A:25:ALA:N	20	1.6
(1,22)	1:A:23:PHE:N	1:A:23:PHE:CA	1:A:23:PHE:C	1:A:24:LYS:N	21	1.6
(1,96)	1:A:87:MET:N	1:A:87:MET:CA	1:A:87:MET:C	1:A:88:LYS:N	1	1.5
(1,96)	1:A:87:MET:N	1:A:87:MET:CA	1:A:87:MET:C	1:A:88:LYS:N	13	1.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,92)	1:A:85:ARG:N	1:A:85:ARG:CA	1:A:85:ARG:C	1:A:86:GLN:N	7	1.5
(1,90)	1:A:84:VAL:N	1:A:84:VAL:CA	1:A:84:VAL:C	1:A:85:ARG:N	10	1.5
(1,87)	1:A:82:MET:C	1:A:83:MET:N	1:A:83:MET:CA	1:A:83:MET:C	8	1.5
(1,87)	1:A:82:MET:C	1:A:83:MET:N	1:A:83:MET:CA	1:A:83:MET:C	14	1.5
(1,66)	1:A:62:ILE:C	1:A:63:ILE:N	1:A:63:ILE:CA	1:A:63:ILE:C	3	1.5
(1,38)	1:A:38:ILE:N	1:A:38:ILE:CA	1:A:38:ILE:C	1:A:39:SER:N	9	1.5
(1,35)	1:A:36:GLY:C	1:A:37:ASP:N	1:A:37:ASP:CA	1:A:37:ASP:C	12	1.5
(1,29)	1:A:26:ALA:C	1:A:27:PHE:N	1:A:27:PHE:CA	1:A:27:PHE:C	24	1.5
(1,25)	1:A:24:LYS:C	1:A:25:ALA:N	1:A:25:ALA:CA	1:A:25:ALA:C	19	1.5
(1,24)	1:A:24:LYS:N	1:A:24:LYS:CA	1:A:24:LYS:C	1:A:25:ALA:N	16	1.5
(1,10)	1:A:12:ARG:N	1:A:12:ARG:CA	1:A:12:ARG:C	1:A:13:SER:N	5	1.5
(1,96)	1:A:87:MET:N	1:A:87:MET:CA	1:A:87:MET:C	1:A:88:LYS:N	10	1.4
(1,96)	1:A:87:MET:N	1:A:87:MET:CA	1:A:87:MET:C	1:A:88:LYS:N	19	1.4
(1,95)	1:A:86:GLN:C	1:A:87:MET:N	1:A:87:MET:CA	1:A:87:MET:C	23	1.4
(1,78)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	1:A:79:PHE:N	4	1.4
(1,78)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	1:A:79:PHE:N	24	1.4
(1,76)	1:A:77:GLU:N	1:A:77:GLU:CA	1:A:77:GLU:C	1:A:78:GLU:N	11	1.4
(1,75)	1:A:76:PHE:C	1:A:77:GLU:N	1:A:77:GLU:CA	1:A:77:GLU:C	14	1.4
(1,72)	1:A:73:THR:N	1:A:73:THR:CA	1:A:73:THR:C	1:A:74:ILE:N	24	1.4
(1,38)	1:A:38:ILE:N	1:A:38:ILE:CA	1:A:38:ILE:C	1:A:39:SER:N	22	1.4
(1,36)	1:A:37:ASP:N	1:A:37:ASP:CA	1:A:37:ASP:C	1:A:38:ILE:N	7	1.4
(1,33)	1:A:35:GLY:C	1:A:36:GLY:N	1:A:36:GLY:CA	1:A:36:GLY:C	14	1.4
(1,24)	1:A:24:LYS:N	1:A:24:LYS:CA	1:A:24:LYS:C	1:A:25:ALA:N	1	1.4
(1,75)	1:A:76:PHE:C	1:A:77:GLU:N	1:A:77:GLU:CA	1:A:77:GLU:C	16	1.3
(1,36)	1:A:37:ASP:N	1:A:37:ASP:CA	1:A:37:ASP:C	1:A:38:ILE:N	1	1.3
(1,36)	1:A:37:ASP:N	1:A:37:ASP:CA	1:A:37:ASP:C	1:A:38:ILE:N	25	1.3
(1,3)	1:A:8:GLN:C	1:A:9:ALA:N	1:A:9:ALA:CA	1:A:9:ALA:C	12	1.3
(1,27)	1:A:25:ALA:C	1:A:26:ALA:N	1:A:26:ALA:CA	1:A:26:ALA:C	8	1.3
(1,24)	1:A:24:LYS:N	1:A:24:LYS:CA	1:A:24:LYS:C	1:A:25:ALA:N	4	1.3
(1,106)	1:A:121:LEU:N	1:A:121:LEU:CA	1:A:121:LEU:C	1:A:122:LYS:N	19	1.3
(1,10)	1:A:12:ARG:N	1:A:12:ARG:CA	1:A:12:ARG:C	1:A:13:SER:N	25	1.3
(1,96)	1:A:87:MET:N	1:A:87:MET:CA	1:A:87:MET:C	1:A:88:LYS:N	21	1.2
(1,78)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	1:A:79:PHE:N	1	1.2
(1,78)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	1:A:79:PHE:N	5	1.2
(1,78)	1:A:78:GLU:N	1:A:78:GLU:CA	1:A:78:GLU:C	1:A:79:PHE:N	16	1.2
(1,75)	1:A:76:PHE:C	1:A:77:GLU:N	1:A:77:GLU:CA	1:A:77:GLU:C	5	1.2
(1,75)	1:A:76:PHE:C	1:A:77:GLU:N	1:A:77:GLU:CA	1:A:77:GLU:C	23	1.2
(1,38)	1:A:38:ILE:N	1:A:38:ILE:CA	1:A:38:ILE:C	1:A:39:SER:N	2	1.2
(1,38)	1:A:38:ILE:N	1:A:38:ILE:CA	1:A:38:ILE:C	1:A:39:SER:N	11	1.2
(1,38)	1:A:38:ILE:N	1:A:38:ILE:CA	1:A:38:ILE:C	1:A:39:SER:N	21	1.2
(1,36)	1:A:37:ASP:N	1:A:37:ASP:CA	1:A:37:ASP:C	1:A:38:ILE:N	12	1.2
(1,36)	1:A:37:ASP:N	1:A:37:ASP:CA	1:A:37:ASP:C	1:A:38:ILE:N	21	1.2
(1,35)	1:A:36:GLY:C	1:A:37:ASP:N	1:A:37:ASP:CA	1:A:37:ASP:C	7	1.2
(1,35)	1:A:36:GLY:C	1:A:37:ASP:N	1:A:37:ASP:CA	1:A:37:ASP:C	10	1.2
(1,35)	1:A:36:GLY:C	1:A:37:ASP:N	1:A:37:ASP:CA	1:A:37:ASP:C	13	1.2
(1,35)	1:A:36:GLY:C	1:A:37:ASP:N	1:A:37:ASP:CA	1:A:37:ASP:C	18	1.2
(1,32)	1:A:28:ASP:N	1:A:28:ASP:CA	1:A:28:ASP:C	1:A:29:MET:N	3	1.2
(1,32)	1:A:28:ASP:N	1:A:28:ASP:CA	1:A:28:ASP:C	1:A:29:MET:N	19	1.2
(1,32)	1:A:28:ASP:N	1:A:28:ASP:CA	1:A:28:ASP:C	1:A:29:MET:N	24	1.2
(1,26)	1:A:25:ALA:N	1:A:25:ALA:CA	1:A:25:ALA:C	1:A:26:ALA:N	2	1.2
(1,26)	1:A:25:ALA:N	1:A:25:ALA:CA	1:A:25:ALA:C	1:A:26:ALA:N	23	1.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Atom-3	Atom-4	Model ID	Violation (°)
(1,24)	1:A:24:LYS:N	1:A:24:LYS:CA	1:A:24:LYS:C	1:A:25:ALA:N	24	1.2
(1,22)	1:A:23:PHE:N	1:A:23:PHE:CA	1:A:23:PHE:C	1:A:24:LYS:N	15	1.2
(1,22)	1:A:23:PHE:N	1:A:23:PHE:CA	1:A:23:PHE:C	1:A:24:LYS:N	17	1.2
(1,109)	1:A:122:LYS:C	1:A:123:ALA:N	1:A:123:ALA:CA	1:A:123:ALA:C	7	1.2
(1,108)	1:A:122:LYS:N	1:A:122:LYS:CA	1:A:122:LYS:C	1:A:123:ALA:N	12	1.2
(1,90)	1:A:84:VAL:N	1:A:84:VAL:CA	1:A:84:VAL:C	1:A:85:ARG:N	11	1.1
(1,42)	1:A:43:LEU:N	1:A:43:LEU:CA	1:A:43:LEU:C	1:A:44:GLY:N	19	1.1
(1,38)	1:A:38:ILE:N	1:A:38:ILE:CA	1:A:38:ILE:C	1:A:39:SER:N	12	1.1
(1,32)	1:A:28:ASP:N	1:A:28:ASP:CA	1:A:28:ASP:C	1:A:29:MET:N	21	1.1
(1,27)	1:A:25:ALA:C	1:A:26:ALA:N	1:A:26:ALA:CA	1:A:26:ALA:C	2	1.1
(1,109)	1:A:122:LYS:C	1:A:123:ALA:N	1:A:123:ALA:CA	1:A:123:ALA:C	24	1.1
(1,106)	1:A:121:LEU:N	1:A:121:LEU:CA	1:A:121:LEU:C	1:A:122:LYS:N	10	1.1
(1,10)	1:A:12:ARG:N	1:A:12:ARG:CA	1:A:12:ARG:C	1:A:13:SER:N	21	1.1